VII EAITI 2017 — Encontro Anual de Iniciação Tecnológica e Inovação
Universidade Estadual de Ponta Grossa | 09 e 10 de novembro de 2017

SÍNTESE, SIMULAÇÃO E APLICAÇÃO DA ESTRUTURA MOLECULAR DO ÓXIDO DE GRAFENO DOPADO COM ZnO

Andressa Oliveira Rodrigues (PIBITI/Fundação Araucária/UEPG), Sérgio Ricardo de Lázaro (Orientador), lazaro.sergio6@gmail.com

UEPG/Departamento de Química Tecnológica

1.06.00.00-0 / 1.06.03.00-0

Palavras Chave: *óxido de grafeno, ZnO, mecanismo sinérgico, fotocatálise,*

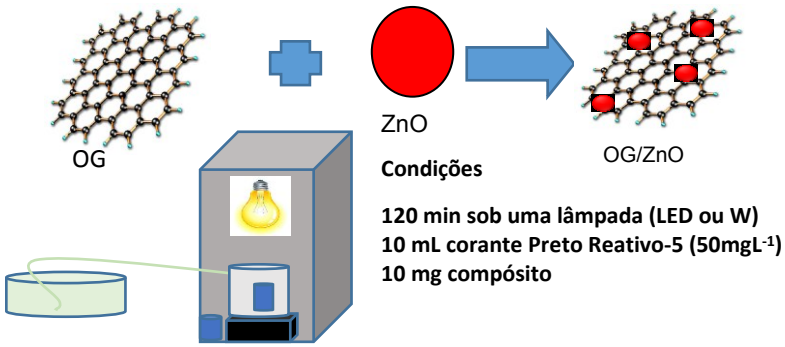
Resumo

Os processos oxidativos avançados são amplamente estudados por serem uma forma mais sustentável de transformar poluentes em compostos menos nocivos, dentre os processos, tem-se a fotocatálise heterogênea, que utiliza-se um óxido metálico com alguma modificação estrutural. O óxido de zino possui propriedade de hidrolisar a água na presença de luz UV. O óxido de grafeno apresenta ótimas propriedades elétricas, ópticas e estabilidade química com dopantes tipo-p. Através dos defeitos químicos presentes na estrutura de OG é possível o ancoramento das partículas e ZnO, possibilitando a hidrólise da água em outras regiões do espectro.

Introdução

O Óxido de Grafeno (OG) apresenta excelentes propriedades ópticas, elétricas, térmicas, mecânicas, ótima estabilidade química e dispersão em água.[1] O óxido de Zinco (ZnO) é um semicondutor com *band gap* (3,37 eV) na região do ultravioleta (367,28nm), amplamente utilizado (pelo baixo custo), como gerador de radicais em meio aquoso para degradação de matéria orgânica (p.ex. corantes têxteis).[2] Desta forma, o presente trabalho busca estudar do ponto de vista experimental e teórico, o compósito OG/ZnO em diferentes proporções, tento como interesse o *band gap* observando através de aplicações fotocatalíticas

Material e Métodos



Resultados Obtidos

As amostras de OG e ZnO puro foram analisadas por Raman e DRX, e os compósitos sintetizados OG/ZnO e foram analisadas por UV-Vis, FEG, EDS e Raman.

Tabela 1. Espectroscopia FEG (a) 99%OG/ZnO1%, (b) 50%OG/ZnO50% e (c) 1%OG/ZnO99%

Compósito	OG	ZnO	Compósito	OG	ZnO
OG/ZnO (m/m)	99%	1%	OG/ZnO (m/m)	80%	20%
OG/ZnO (m/m)	98%	2%	OG/ZnO (m/m)	1%	99%
OG/ZnO (m/m)	95%	5%	OG/ZnO (m/m)	2%	98%
OG/ZnO (m/m)	90%	10%	OG/ZnO (m/m)	5%	95%

Figura 2. Espectroscopia FEG (a) 99%OG/ZnO1%, (b) 50%OG/ZnO50% e (c) 1%OG/ZnO99%

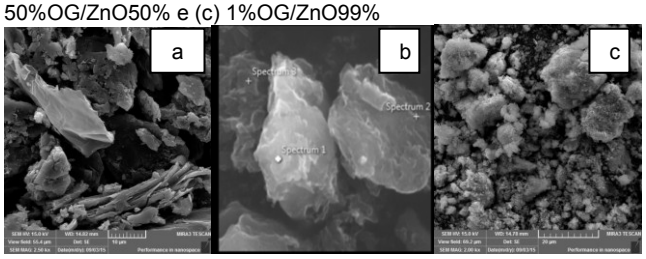


Figura 3. Espectroscopia UV-Vis dos compósitos 99%OG/ZnO1%, 80%OG/ZnO20%, OG, ZnO frente ao corante em lampada (a) LED e (b) Tungstênio

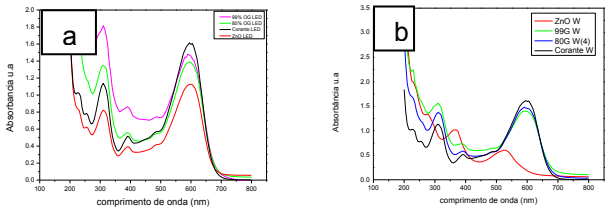
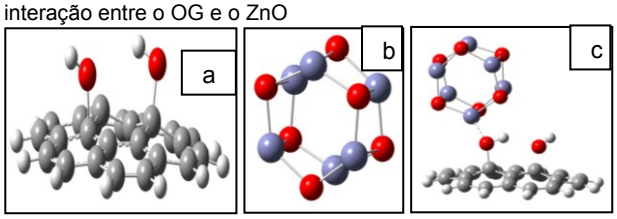


Figura 4. Simulação computacional do (a) OG puro, (b) ZnO e (c)da interação entre o OG e o ZnO



Conclusão

A partir dos resultados obtidos é possível observar um mecanismo sinérgico entre as duas espécies visto pela simulação computacional e verificado pela aplicação em fotocatálise heterogênea, foi possível obter diferentes regiões de absorção no espectro dos compósitos pela variação inicial da massa.

Agradecimentos

CNPq Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico; GGAETS UEPG - PR; Clabmu; Fundação Araucária Apoio ao Desenvolvimento Científico e Tecnológico do Paraná

[1]ZHU, Y. et al. Graphene and Graphene Oxide: Synthesis, Properties and Applications, **advanced materials**, v. 22, p. 3.908, 2010.
[2]Ü. ÖZGÜR, Ü. et al. A comprehensive review of ZnO materials and devices, **Journal of Applied Physics**, v. 98, p.1-103, 2005.