

Atividade fotocatalítica de nanopartículas de ZnO:N

*Ivan Mouritys Pereira Silva*¹

*Gabriela Byzynski Soares*²

*Caue Ribeiro de Oliveira*³

*Elson Longo*⁴

¹Aluno de graduação em Química, Universidade de São Paulo, São Carlos, SP;

²Pós-graduanda em Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP;

³Pesquisador, Embrapa Instrumentação, São Carlos, SP.

⁴Professor do Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP.

As amostras de ZnO e ZnO dopados com nitrogênio (ZnO:N) foram sintetizadas com base no método dos precursores poliméricos, onde as nanopartículas de Zn foram preparadas pela adição de nitrato de zinco hexahidratado e ácido cítrico. Para a dopagem com nitrogênio, foi adicionado ureia nas proporções de 0,1, 0,5, 1,0, 2,0, 3,0, 4,0 e 5,0 %. Posteriormente foi realizado um tratamento térmico a 850 °C por 4 horas. Para a caracterização, foram feitas análises de Difração de Raios-X (DRX) e Espectroscopia de Reflectância Difusa (DRS) no UV-Vis. Para estudo da atividade fotocatalítica foram realizados estudos de fotodegradação de corante Rodamina-B sob irradiação UVC e visível. A análise de DRX das nanopartículas confirmou a estrutura hexagonal característica do ZnO (wurtzita) para todas as amostras. Pequenas variações no ângulo de difração e na intensidade dos picos de difração são atribuídos a substituição do nitrogênio por O²⁻ e por mudanças no grau de formação do material devido a incorporação do dopante, respectivamente. A partir dos picos de difração, foi calculado o tamanho do cristalito através da Equação de Scherrer, observando uma tendência de aumento no tamanho dos cristalitos conforme a concentração de nitrogênio aumenta. Para avaliar a energia de *band gap* das nanopartículas, foram feitas análises de Reflectância Difusa na região do UV-Vis. A partir dos espectros é notado um deslocamento do comprimento de absorção máxima das amostras de ZnO dopadas para comprimento de ondas maiores, chegando até a região do visível, indicando assim que o processo de dopagem é o responsável por essa mudança. O valor de *band gap* das amostras foi calculado pelo modelo de *Tauc*, sendo que não foram observadas mudanças significativas de energia para as nanopartículas, onde o valor de 3,22 eV é praticamente constante para as amostras. Na avaliação da atividade fotocatalítica das nanopartículas, sob irradiação UVC, foi observado que, de maneira geral, todas as amostras apresentam atividade fotocatalítica elevada, até mesmo para as amostras dopadas, sendo que as amostras mais ativas, na região do UVC, são as amostras com concentração de 4,0 e 5,0% de N, degradando mais do que 70% da concentração inicial após 120 minutos. Sob irradiação visível, a atividade fotocatalítica das amostras é menor quando comparada com a radiação UVC, apesar das amostras dopadas apresentarem uma atividade maior do que a amostra não dopada ZnO. O valor da constante de degradação do corante (*k'*) foi calculada tomando como base uma cinética de primeira ordem para o processo.

Palavras-chave: ZnO, ZnO:N, DRX, DRS, fotocatalise.

Apoio financeiro: Embrapa.

Área: Novos Materiais e nanotecnologia