



Serviço Público Federal
Ministério da Educação
Fundação Universidade Federal de Mato Grosso do Sul
Instituto de Química - INQUI
Programa de Pós-Graduação em Química



Título: Estudo da influência de modificadores em nanopartículas de ouro na eletro-oxidação de etanol

Doutoranda: Ana Carolina Gaiotti de Oliveira

Orientador: Prof. Dr. Giuseppe Abíola Câmara da Silva

Palavras-chaves: eletro-oxidação de etanol; nanopartículas de ouro; ad-átomos; trisoctaedros de Au; nanocubos de Au

RESUMO

Etanol é uma molécula modelo para a eletrocatalise de moléculas orgânicas, sendo o menor dos álcoois a conter uma ligação C-C. Apesar de diversos estudos voltados à sua eletro-oxidação, este álcool ainda não é eficientemente oxidado à CO_2 , devido à sua alta estabilidade estrutural. Assim, dispositivos que convertam energia química proveniente da reação de eletro-oxidação de etanol (REO) em energia elétrica necessitam de eletrocatalisadores que promovam a quebra da ligação C-C e favoreçam a completa oxidação do álcool. Neste contexto, o design da estrutura de nanopartículas de metais nobres é um tópico promissor nesta área, pois aspectos como área superficial ativa, arranjo atômico da superfície e a presença de cocatalisadores influenciam a atividade e seletividade destas nanopartículas, visto que tais propriedades surgem da interação molécula-superfície. Especificamente para a confecção de nanopartículas de ouro (NPs Au, um candidato promissor) há técnicas de síntese que incluem mecanismos químicos, térmicos, eletroquímicos, entre outros, capazes de gerar materiais com alta reatividade (graças à alta energia de superfície) que se tornam eletrocatalisadores promissores frente à REO. Voltando à questão dos cocatalisadores, átomos de outros metais podem ser adsorvidos (ad-átomos) na superfície destas nanopartículas com o objetivo de mudar as propriedades eletrônicas e estruturais do material de partida, e assim inibir ou ativar vias reacionais. Neste contexto, o presente trabalho objetiva a síntese de nanopartículas de ouro (NPs Au) com dois arranjos superficiais - trisoctaedros (Au 221) e nanocubos (Au 100) - e o estudo da influência de modificadores adsorvidos nestas NPs frente à REO em meio básico. As sínteses das NPs Au foram feitas por redução química de íons Au^{3+} em solução aquosa, usando ácido ascórbico na presença de um surfactante para a obtenção de trisoctaedros (Au 221), e borohidreto de sódio para a formação de nanocubos (Au 100). As morfologias das nanopartículas foram confirmadas por microscopia eletrônica de varredura (MEV). A modificação superficial foi realizada pela adsorção eletroquímica de Pd. Até o momento, a caracterização eletroquímica e o estudo da REO foram realizados por voltametria cíclica para as NPs Au puras e após modificação com Pd. Os nanocubos e trisoctaedros de Au com 9% e 39% de suas superfícies modificadas por Pd, respectivamente, apresentaram as maiores atividades catalíticas da série. Para entender as mudanças nas respostas eletroquímicas causadas pela presença de Pd, os produtos de reação estão sendo monitorados através da técnica de FTIR *in situ*.