

ROSAL; Felipe João Oliveira¹, CAVALCANTE; Laécio Santos²

RESUMO

ESTRUTURA ELETRÔNICA E PROPRIEDADES SONOFOTOCATALÍTICAS DE NANOCRISTAIS DE NiWO₄ **Resumo**

Na literatura, vários métodos de síntese têm sido desenvolvidos para a obtenção de nanocristais de tungstato de níquel (NiWO₄), dentre essas rotas a precipitação de óxidos envolvendo a reação de dupla-troca ou metátese tem oferecido importantes vantagens quanto à redução nos custos e velocidade de obtenção de óxidos cristalinos. O crescente interesse nos tungstatos é devido apresentarem emissão luminescente na região do azul e/ou verde em temperatura ambiente, o que possibilita o desenvolvimento de novos dispositivos eletro-ópticos. Neste trabalho, relata-se a síntese dos nanocristais de NiWO₄ pela rota de precipitação/calцинаção controlada a 95 °C por 2h, seguido de tratamento térmico em diferentes temperaturas (100, 200, 300, 400, 500 e 600 °C) por 2 h bem como analisou-se a degradação e/ou descoloração do corante Violeta Brilhante 5R Remazol (VB5RR) pelo processo de sonofotocatálise (SFC). A estrutura dos nanocristais de NiWO₄ foi caracterizada por meio das técnicas de Difração de raios X (DRX), refinamento pelo método de Rietveld, espectroscopia de micro-Raman (m-Raman) e espectroscopia de absorção na região do infravermelho com transformada de Fourier (FT-IR). A microscopia eletrônica de varredura de alta resolução (MEV-AR) foi empregada para investigar o formato e tamanho médio de partícula bem como propor um mecanismo de crescimento para os nanocristais de NiWO₄ sintetizados. O comportamento óptico foi investigado por espectroscopia ultravioleta-visível (UV-Vis) e pelos cálculos dos princípios da teoria do funcional da densidade (TFD) da mecânica quântica com as bases (B3LYP) para obter sua estrutura eletrônica de bandas (EEB) e densidade de estados (DE). Além disso, investigou-se o potencial SFC dos nanocristais de NiWO₄ para degradação do corante VB5RR usando um diodo emissor de luz violeta com 10 W de potência. Os padrões de DRX indicam que os nanocristais de NiWO₄ tratados termicamente a 600 °C por 2 h tem estrutura monoclínica do tipo wolframita. As imagens de MEV-AR mostram a presença de cristais irregulares esféricos formados pela automontagem de vários nanocristais de NiWO₄. O gap óptico experimental ($E_{\text{gap[exp]}}$) foi encontrado em 2,77 eV usando espectroscopia de UV-Vis e os cálculos teóricos indicam um gap óptico ($E_{\text{gap[teo]}}$) com transição eletrônica indireta com valor de 3,91 eV, cujo orbitais 2p dos átomos de O são predominantemente na banda de valência e os orbitais 5d dos átomos de W na banda de condução. Demonstrou-se pela primeira vez que a atividade sonofotocatalítica pode ser aumentada após 120 min em aproximadamente 32% para a degradação do corante VB5RR usando nanocristais de NiWO₄.

PALAVRAS-CHAVE: NiWO₄, Cristais, Mecanismo de Crescimento, Banda Óptica Proibida, Sonofotocatálise

¹ IFMA - Instituto Federal do Maranhão, rosal_felipe@hotmail.com

² UESPI - Universidade Estadual do Piauí, laeciosc@gmail.com