

# QUÍMICA entre as CIÊNCIAS NATURAIS 2

Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua (Organizador)



Ano 2022

O papel fundamental da

# QUÍMICA entre as CIÊNCIAS NATURAIS 2

Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua (Organizador)



Ano 2022

Editora chefe

Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Antonella Carvalho de Oliveira

Editora executiva

Natalia Oliveira

Assistente editorial

Flávia Roberta Barão

Bibliotecária

Janaina Ramos

Projeto gráfico

Bruno Oliveira

Diulio Olivella

Camila Alves de Cremo Daphynny Pamplona

Gabriel Motomu Teshima

Natália Sandrini de Azevedo

Luiza Alves Batista

Luiza Aives Datista

Imagens da capa

iStock

Edição de arte

Luiza Alves Batista

2022 by Atena Editora

Copyright © Atena Editora

Copyright do texto © 2022 Os autores

Copyright da edição © 2022 Atena Editora

Direitos para esta edição cedidos à Atena

Editora pelos autores.

Open access publication by Atena Editora



Todo o conteúdo deste livro está licenciado sob uma Licença de Atribuição Creative Commons. Atribuição-Não-Comercial-NãoDerivativos 4.0 Internacional (CC BY-NC-ND 4.0).

O conteúdo dos artigos e seus dados em sua forma, correção e confiabilidade são de responsabilidade exclusiva dos autores, inclusive não representam necessariamente a posição oficial da Atena Editora. Permitido o download da obra e o compartilhamento desde que sejam atribuídos créditos aos autores, mas sem a possibilidade de alterá-la de nenhuma forma ou utilizá-la para fins comerciais.

Todos os manuscritos foram previamente submetidos à avaliação cega pelos pares, membros do Conselho Editorial desta Editora, tendo sido aprovados para a publicação com base em critérios de neutralidade e imparcialidade acadêmica.

A Atena Editora é comprometida em garantir a integridade editorial em todas as etapas do processo de publicação, evitando plágio, dados ou resultados fraudulentos e impedindo que interesses financeiros comprometam os padrões éticos da publicação. Situações suspeitas de má conduta científica serão investigadas sob o mais alto padrão de rigor acadêmico e ético.

#### Conselho Editorial

#### Ciências Exatas e da Terra e Engenharias

Prof. Dr. Adélio Alcino Sampaio Castro Machado - Universidade do Porto

Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Alana Maria Cerqueira de Oliveira - Instituto Federal do Acre

Profa Dra Ana Grasielle Dionísio Corrêa - Universidade Presbiteriana Mackenzie

Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Ana Paula Florêncio Aires – Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro

Prof. Dr. Carlos Eduardo Sanches de Andrade - Universidade Federal de Goiás

Profa Dra Carmen Lúcia Voigt - Universidade Norte do Paraná



Prof. Dr. Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua - Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás

Prof. Dr. Douglas Goncalves da Silva - Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia

Prof. Dr. Eloi Rufato Junior - Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Profa Dra Érica de Melo Azevedo – Instituto Federal do Rio de Janeiro

Prof. Dr. Fabrício Menezes Ramos - Instituto Federal do Pará

Prof<sup>a</sup> Dra. Jéssica Verger Nardeli – Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho

Prof. Dr. Juliano Bitencourt Campos - Universidade do Extremo Sul Catarinense

Prof. Dr. Juliano Carlo Rufino de Freitas - Universidade Federal de Campina Grande

Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Luciana do Nascimento Mendes – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Norte

Prof. Dr. Marcelo Marques - Universidade Estadual de Maringá

Prof. Dr. Marco Aurélio Kistemann Junior - Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. Dr. Miguel Adriano Inácio - Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais

Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Neiva Maria de Almeida - Universidade Federal da Paraíba

Profa Dra Natiéli Piovesan - Instituto Federal do Rio Grande do Norte

Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Priscila Tessmer Scaglioni – Universidade Federal de Pelotas

Prof. Dr. Sidney Gonçalo de Lima - Universidade Federal do Piauí

Prof. Dr. Takeshy Tachizawa - Faculdade de Campo Limpo Paulista





# O papel fundamental da química entre as ciências naturais 2

**Diagramação:** Daphynny Pamplona **Correção:** Maiara Ferreira

Indexação: Amanda Kelly da Costa Veiga

Revisão: Os autores

Organizador: Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua

#### Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

P214 O papel fundamental da química entre as ciências naturais 2 / Organizador Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua.

- Ponta Grossa - PR: Atena, 2022.

Formato: PDF

Requisitos de sistema: Adobe Acrobat Reader

Modo de acesso: World Wide Web

Inclui bibliografia

ISBN 978-65-258-0027-1

DOI: https://doi.org/10.22533/at.ed.271220604

1. Química. I. Paniagua, Cleiseano Emanuel da Silva (Organizador). II. Título.

**CDD 540** 

Elaborado por Bibliotecária Janaina Ramos - CRB-8/9166

#### Atena Editora

Ponta Grossa – Paraná – Brasil Telefone: +55 (42) 3323-5493 www.atenaeditora.com.br

contato@atenaeditora.com.br





### **DECLARAÇÃO DOS AUTORES**

Os autores desta obra: 1. Atestam não possuir qualquer interesse comercial que constitua um conflito de interesses em relação ao artigo científico publicado; 2. Declaram que participaram ativamente da construção dos respectivos manuscritos, preferencialmente na: a) Concepção do estudo, e/ou aquisição de dados, e/ou análise e interpretação de dados; b) Elaboração do artigo ou revisão com vistas a tornar o material intelectualmente relevante; c) Aprovação final do manuscrito para submissão.; 3. Certificam que os artigos científicos publicados estão completamente isentos de dados e/ou resultados fraudulentos; 4. Confirmam a citação e a referência correta de todos os dados e de interpretações de dados de outras pesquisas; 5. Reconhecem terem informado todas as fontes de financiamento recebidas para a consecução da pesquisa; 6. Autorizam a edição da obra, que incluem os registros de ficha catalográfica, ISBN, DOI e demais indexadores, projeto visual e criação de capa, diagramação de miolo, assim como lançamento e divulgação da mesma conforme critérios da Atena Editora.





### DECLARAÇÃO DA EDITORA

A Atena Editora declara, para os devidos fins de direito, que: 1. A presente publicação constitui apenas transferência temporária dos direitos autorais, direito sobre a publicação, inclusive não constitui responsabilidade solidária na criação dos manuscritos publicados, nos termos previstos na Lei sobre direitos autorais (Lei 9610/98), no art. 184 do Código Penal e no art. 927 do Código Civil; 2. Autoriza e incentiva os autores a assinarem contratos com repositórios institucionais, com fins exclusivos de divulgação da obra, desde que com o devido reconhecimento de autoria e edição e sem qualquer finalidade comercial; 3. Todos os e-book são open access, desta forma não os comercializa em seu site, sites parceiros, plataformas de e-commerce, ou qualquer outro meio virtual ou físico, portanto, está isenta de repasses de direitos autorais aos autores; 4. Todos os membros do conselho editorial são doutores e vinculados a instituições de ensino superior públicas, conforme recomendação da CAPES para obtenção do Qualis livro; 5. Não cede, comercializa ou autoriza a utilização dos nomes e e-mails dos autores, bem como nenhum outro dado dos mesmos, para qualquer finalidade que não o escopo da divulgação desta obra.





# **APRESENTAÇÃO**

O e-book: "O papel fundamental da química entre as ciências naturais 2" é composto por onze capítulos que apresentam trabalhos nas diferentes áreas da química: *i*) teoria e prática no ensino de química; *ii*) química dos produtos naturais; *iii*) química dos materiais; e *iv*) aplicação de novos materiais e biotecnologia para remediação ambiental.

O primeiro capítulo apresenta um trabalho resultante da observação, experiência e desafios enfrentados por discentes do curso de licenciatura em química, frente ao desafio do processo de ensino-aprendizagem de alunos do ensino médio.

O segundo capítulo apresenta um estudo que trata da importância de compostos fenólicos com propriedades antioxidantes, provenientes de frutos que compõem a dieta alimentar de milhares de famílias. Já os capítulos três e quatro apresentam estudos que avaliaram as propriedades físico-químicas de biodiesel provenientes da espécie Ouricuri e das sementes de *Glycine Max* e *Ricinus Communis L*.

Os capítulos de cinco a nove apresentam trabalhos que objetivaram sintetizar, caracterizar e elucidar as inúmeras propriedades de materiais provenientes de fibra de carbono, aminas quirais, fibras de TiO<sub>2</sub> e de bambu funcionalizadas com óxido de ferro; a fim de se avaliar inúmeras propriedades: i) catalíticas; ii) semicondutoras e luminescentes; iii) novas nanoestruturas pela combinação de duas ou mais substâncias químicas; iv) preparo de filmes finos biodegradáveis entre outras propriedades que visem a sua aplicação em larga escala, que leve a proporcionar inúmeros benefícios em forma de tecnologia para a sociedade.

O capítulo 10 apresenta um trabalho de revisão no qual se avaliou a eficiência de  $Ag_2WO_4$  como fotocatalisador para a remoção de corantes em matrizes aquosas. Por fim, o capítulo 11 apresenta uma revisão da aplicação da propriedade de bioluminescência da bactéria *Vibrio fischeri* frente à exposição da toxicidade provenientes de inúmeras classes de Contaminantes de Interesse Emergente e seus produtos de transformação provenientes da aplicação de diferentes processos oxidativos avançados em matrizes aquosas.

Diante desta diversidade de trabalhos que abordaram a aplicação de diferentes áreas da química e afins, está área da ciência demonstra a sua fundamental importância para aperfeiçoar, desenvolver e remediar novos produtos que chegam até o consumo da sociedade e que objetiva melhorar e aumentar a qualidade de vida das pessoas.

Nesta perspectiva, a Atena Editora vem trabalhando de forma a estimular e incentivar cada vez mais pesquisadores do Brasil e de outros países a publicarem seus trabalhos com garantia de qualidade e excelência em forma de livros, capítulos de livros e artigos científicos.

SUMÁRIO
CAPÍTULO 11
EXPERIÊNCIAS DE INSERÇÃO PROFISSIONAL NO ENSINO DE QUÍMICA: TEORIA E PRÁTICA
Alan Stampini Benhame de Castro Hauster Maximiler Campos de Paula
https://doi.org/10.22533/at.ed.2712206041
CAPÍTULO 2
€ https://doi.org/10.22533/at.ed.2712206042
CAPÍTULO 323
AVALIAÇÃO DAS PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS DAS MISTURAS DE BIODIESEL DE OURICURI E DIESEL DE PETRÓLEO  Rafaela Gabriel  João Inácio Soletti  Sandra Helena Vieira de Carvalho
€ https://doi.org/10.22533/at.ed.2712206043
CAPÍTULO 4
CAPÍTULO 545
A THERMODYNAMIC APPROACH FOR MICROSTRUCTURES WITHIN CARBON FIBERS PRECURSORY MESOPHASE PITCH BASED ON THE MÜLLER-LIU PROCEDURE Caio Cesar Ferreira Florindo
€ https://doi.org/10.22533/at.ed.2712206045
CAPÍTULO 653
RESOLUÇÃO CINÉTICA DINÂMICA DE AMINAS QUIRAIS COM CATALISADOR HETEROGÊNEO DE PALÁDIO SUPORTADO EM DOLOMITA

Fernanda Amaral de Siqueira Renata Costa Zimpeck José Carlos Queiroz Arêas Larissa Moisés da Silva Lívia Yuriko Sawada

11. https://doi.org/10.22555/at.ed.2712200046
CAPÍTULO 764
OBSERVAÇÃO DA INFLUÊNCIA DE TUNGSTÊNIO PRESENTE EM FIBRAS DE TIO <sub>2</sub> UTILIZADAS COMO SEMICONDUTORES EM FOTOCATÁLISE HETEROGÊNEA Luana Góes Soares da Silva Annelise Kopp Alves
€ https://doi.org/10.22533/at.ed.2712206047
CAPÍTULO 875
SÍNTESE DE SEMICONDUTORES DE DIFERENTES COMPOSIÇÕES E SUA CAPACIDADE DE ABSORÇÃO NA REGIÃO UVA  Luana Góes Soares da Silva  Annelise Kopp Alves
€ https://doi.org/10.22533/at.ed.2712206048
CAPÍTULO 985
PREPARAÇÃO DE FILMES FINOS BIODEGRADÁVEIS A BASE DE BAMBU FUNCIONALIZADOS COM ÓXIDO DE FERRO  Vivyane Alencar Marques Araújo do Nascimento  Marcelo Ramon da Silva Nunes  William Ferreira Alves  Anselmo Fortunato Ruiz Rodriguez  https://doi.org/10.22533/at.ed.2712206049
CAPÍTULO 1094
UMA BREVE REVISÃO DO DESEMPENHO DO Ag2WO4 NA REMOÇÃO DE CORANTES EM SOLUÇÃO AQUOSA POR FOTOCATÁLISE Francisco das Chagas Marques da Silva Germano Pereira dos Santos Francisco de Assis Araújo Barros Geraldo Eduardo da Luz Júnior
€ https://doi.org/10.22533/at.ed.27122060410
CAPÍTULO 11104
UTILIZAÇÃO DA BACTÉRIA Vibrio fischeri NA INDICAÇÃO DE TOXICIDADE AGUDA PROVENIENTES DE CONTAMINANTES DE INTERESSE EMERGENTE E SEUS PRODUTOS DE DEGRADAÇÃO AVALIADOS EM DIFERENTES MATRIZES AQUOSAS Cleiseano Emanuel da Silva Paniagua Valdinei de Oliveira Santos  1 https://doi.org/10.22533/at.ed.27122060411
SOBRE O ORGANIZADOR117
ÍNDICE REMISSIVO 118

# **CAPÍTULO 7**

# OBSERVAÇÃO DA INFLUÊNCIA DE TUNGSTÊNIO PRESENTE EM FIBRAS DE TIO, UTILIZADAS COMO SEMICONDUTORES EM FOTOCATÁLISE HETEROGÊNEA

Data de aceite: 01/03/2022 Data de submissão: 07/02/2022

#### Luana Góes Soares da Silva

Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Departamento de Engenharia de Materiais Porto Alegre – RS http://lattes.cnpq.br/8474215025680480

#### **Annelise Kopp Alves**

Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Departamento de Engenharia de Materiais Porto Alegre – RS http://lattes.cnpq.br/0064626732086273

RESUMO: A aplicabilidade de nanomateriais em catálises, células solares, células combustíveis, membranas, baterias de hidrogênio, materiais estruturais que requerem elevada resistência mecânica. nanoeletrônicos. sensores. dispositivos ópticos, magnetos eletrônicos. engenharia de tecidos e biossensores, estão cada vez mais frequentes, em virtude de propiciarem produtos finais mais eficazes, leves e de baixo custo. A preferência em se utilizar as fibras, ao invés de compostos cerâmicos com dimensões tradicionais, nas mais diversas aplicações, se deve ao fato de entre os nanomateriais, as fibras serem uma das nanoestruturas unidimensionais que mais têm chamado atenção, em razão de sua: flexibilidade, propriedades ópticas e capacidade de interação com outras áreas da ciência. Esta relação multidisciplinar promove o desenvolvimento de novas técnicas de produção, associando o entendimento de suas propriedades ao emprego destes novos materiais. Neste trabalho fibras nanoestruturadas de TiO, e de TiO,/ WO<sub>3</sub> foram obtidas por electrospinning e tratadas termicamente entre 650 °C e 800 °C em um forno tipo mufla. A técnica de difração de raios X (DRX) foi empregada na determinação da estrutura cristalina e tamanho de cristalito. A morfologia das fibras nanoestruturadas TiO, e de TiO,/WO, foi observada por meio de microscopia eletrônica de varredura (MEV) e, a atividade fotocatalítica foi analisada através de ensaios de fotodegradação de 125 mL de uma solução 20 ppm do corante alaranjado de metila. Os resultados apontam que as fibras nanoestruturadas de TiO, misturadas ao tungstênio (H<sub>2</sub>WO<sub>4</sub>) apresentaram-se mais eficientes na descoloração do corante alaranjado de metila, indicando uma maior atividade catalítica destas amostras em comparação com um catalisador padrão P25 e as amostras de TiO<sub>a</sub>. A presença de tungstênio aumentou a eficiência fotocatalítica dos materiais, inibiu da recombinação do par elétron/lacuna [(e)/(h+)], permitindo a transferência de cargas entre o TiO, e o WO, A elevação da temperatura de tratamento térmico possibilitou que as vacâncias de O<sub>a</sub> adquirissem a mobilidade necessária para passar para um estado desordenado na rede, aumentando a capacidade de degradação das amostras.

**PALAVRAS-CHAVE:** Fibras, Nanoestruturadas, Dióxido de Titânio (TiO<sub>2</sub>), Trióxido de Tungstênio (WO<sub>3</sub>), *Electrospinning* e Vacâncias de O<sub>3</sub>.

# 1 I INTRODUÇÃO

A nanotecnologia tem como princípio elementar o manejo da matéria em escala atômica, para a geração de estruturas com diferentes arranjos moleculares, incorporando inúmeras propriedades ao material já existente. Os materiais e compostos nanoestruturados possuem propriedades químicas intensificadas ou até mesmo modificadas em consequência da redução de tamanho [1].

Materiais nanoestruturados são assim chamados, quando ao menos, uma de suas dimensões se apresenta com valores menores ou igual a 100 nm. Os resultados mais importantes relacionados a estes materiais relatam à possibilidade de regular e manipular a sua morfologia, área superficial, volume, que podem melhorar e/ou criar novas propriedades [2,3].

Nanomateriais podem ser classificados em: zero dimensional, quando se apresentam na forma de partículas; unidimensionais, quando se apresentam na forma de tubos, fitas e fibras; e bidimensionais, quando se apresentam na forma de filmes [2,3].

Materiais cerâmicos com dimensões nanométricas podem substituir compostos cerâmicos com dimensões tradicionais em várias aplicações como catálises, células solares, células combustíveis, membranas, baterias de hidrogênio, materiais estruturais que requerem elevada resistência mecânica, nanoeletrônicos, sensores, em dispositivos ópticos, magnetos eletrônicos, engenharia de tecidos e biossensores [2,3].

Dentro deste contexto, o presente trabalho relata a obtenção por *electrospinning* de fibras nanoestruturadas de TiO<sub>2</sub> e de TiO<sub>2</sub>/WO<sub>3</sub>, para serem utilizadas como semicondutores em fotocatálise heterogênea e, terem a sua atividade fotocatalítica na degradação de 125 mL de uma solução 20 ppm do corante alaranjado de metila analisada.

# 21 MATERIAIS E MÉTODOS

A Figura 1 ilustra como as fibras nanoestruturadas de  ${\rm TiO_2}$  e de  ${\rm TiO_2/WO_3}$  foram obtidas por *electrospinning*, dos métodos empregados para a sua caracterização quanto: as fases cristalinas, morfologia, energia de *band gap*, fotoatividade, e, dos principais resultados obtidos.

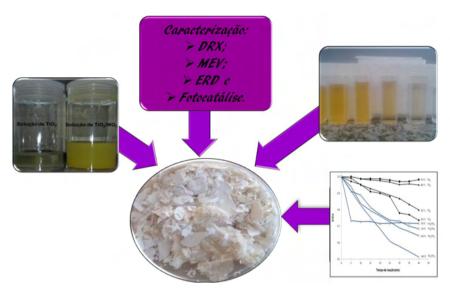


Figura 1. Ilustração esquemática da metodologia empregada e dos resultados obtidos.

## 2.1 Electrospinning

As fibras nanoestruturadas foram obtidas através do preparo de 2 soluções precursoras. A solução de TiO₂ foi obtida através da mistura de 2,5 mL de propóxido de titânio (TIP), 2,0 mL de ácido acético glacial e 5,0 mL de uma solução alcoólica contendo 10% em peso de polivinilpirrolidona (PVP). A solução de TiO₂/WO₃ foi preparada misturando os reagentes acima mencionados acrescida de 1 mL de peróxido de hidrogênio e 0,10 g de H₂WO₄, que foram mantidos sob agitação magnética por 15 minutos. Em seguida, uma seringa de plástico foi carregada com 5 mL da solução precursora de TiO₂ ou de TiO₂/WO₃ que foi conectada a uma agulha de alimentação de aço inoxidável hipodérmica por uma fonte de alta tensão. A distância entre o tubo capilar e o coletor cilíndrico foi de 12 cm, a tensão foi de 13,5 kV com um fluxo de 1,8 mL/h. O coletor cilíndrico foi recoberto com uma folha de alumínio para coletar as fibras nanoestruturadas produzidas a cada 30 minutos por um período de 4 horas. As fibras nanoestruturadas de TiO₂ e de TiO₂/WO₃ foram tratadas termicamente em um forno elétrico (SANCHIS) a 650 °C, 700 °C, 750 °C ou 800 °C com patamar de 1 h e taxa de aquecimento de 1,4 C/min.

A Figura 2 são fotografias do aspecto visual, da aparência das fibras nanoestruturadas de  $\text{TiO}_2$  e de  $\text{TiO}_2/\text{WO}_3$  obtidas por *electrospinning*, após o tratamento térmico.

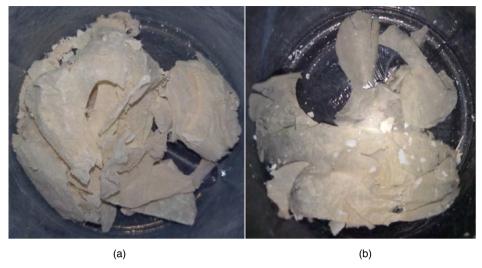


Figura 2. Fotografias da aparência das fibras nanoestruturadas de (a) TiO<sub>2</sub> e (b) TiO<sub>2</sub>/WO<sub>3</sub> após o tratamento térmico.

#### 2.2 Caracterização

Utilizou-se um difratômetro PHILIPS com radiação CuKα, com tensão de 40 kV e 40 mA, equipado com o software X'PERT HightScore, para identificar as fases presentes em todas as fibras nanoestruturadas. Um microscópio eletrônico de varredura (MEV, JEOL 6060) equipado com EDS (espectroscopia de energia dispersiva), usado para avaliar a morfologia das amostras e identificar a presença de átomos de W, Ti e O, dependendo da composição das fibras nanoestruturadas. O diâmetro médio das fibras foi estimado com o auxílio do programa *UTHSCSA ImageTool*. O equipamento utilizado para medir a energia de *band gap* foi um espectrofotômetro de feixe duplo UV-vis- NIR (Cary 5000), com uma esfera integradora no modo de reflexão difusa de luz. Os valores da energia de *band gap* foram obtidos através da correlação de Kubelka e Munk.

O desempenho fotocatalítico das fibras nanoestruturadas de TiO<sub>2</sub> e de TiO<sub>2</sub>/WO<sub>3</sub> foi analisado através da alteração na concentração do corante alaranjado de metila, sob irradiação UVA. O processo de fotocatálise foi realizado em um reator fotocatalítico, de vidro *pyrex*, onde a radiação foi proporcionada por 12 lâmpadas negras UVA, de 8 W cada, modelo Flúor BLB T5 e da marca *Sadokin*. As lâmpadas estão dispostas em dois semi-cilindros, que possuem superfície interna refletora. Os outros componentes do reator fotocatalítico incluem; um agitador magnético, um sistema de aeração de ar comprimido e um banho termostático. Para a execução dos ensaios fotocatalíticos, as fibras nanoestruturadas de TiO<sub>2</sub> ou de TiO<sub>2</sub>/WO<sub>3</sub> foram misturadas a 125 mL de uma solução contendo 20 ppm do corante alaranjado de metila. A mistura foi colocada em um ultrassom (Cole-Parmer CP-750), por 15 minutos. A solução foi então transferida para o reator fotocatalítico, sob

constante agitação, e a temperatura de 30 °C. Fez-se borbulhar ar no período de exposição à luz UVA. Antes do início de cada ensaio, uma amostra de 4 mL desta solução foi coletada e definida como amostra inicial. Durante o ensaio, com sistema de luz UVA ligado, foram retiradas com uma seringa de plástico, alíquotas de 4 mL da solução, em intervalos de 15 minutos, filtradas em filtros de 0,2 µm e, colocadas em cubetas de polimetilmetacrilato (PMMA) para em seguida serem analisadas por espectrofotometria.

A determinação da atividade fotocatalítica foi realizada com base na relação C/Co, onde C é a concentração molar da solução aquosa de corante em presença do catalisador no tempo da análise e Co é a concentração molar inicial da solução aquosa de corante sem a presenca do catalisador.

#### 3 | RESULTADOS E DISCUSSÃO

A Figura 3 apresenta os resultados dos ensaios de difração de raios X (DRX) das fibras nanoestrututadas sem tratamento térmico (STT), de TiO, e de TiO,/WO, sintetizadas por electrospinning e tratadas termicamente a 650 °C, 700 °C, 750 °C e 800 °C. As amostras sem tratamento térmico (STT) apresentaram-se amorfas para todas as formulações. As fibras nanoestruturadas de TiO, (Figura 3a) tratadas até a temperatura de 700 °C apresentaram somente a presenca da fase cristalina anatase (JCPDS 010782486), com o primeiro pico característico em aproximadamente 2 \to = 25.271 \circ. As fibras nanoestruturadas tratadas a partir de 750 °C apresentaram além da fase anatase, a fase rutilo (JCPDS 01-077-0442), com o primeiro pico característico em aproximadamente 2  $\Theta$  = 27,294 °, resultado da ocorrência de uma transição de fases do TiO2, previsto após o aumento da temperatura de tratamento térmico [4,5]. As fibras nanoestruturadas de TiO<sub>2</sub>/WO<sub>3</sub> (Figura 3b) tratadas até 650 °C foram identificadas as fases anatase (JCPDS 01-078-2486) e brookita (JCPDS 01-075-1582) para TiO, com picos característicos em aproximadamente 20 = 25,271° e 25,425°, respectivamente. As fibras nanoestruturadas tratadas a partir de 700 °C apresentaram para o TiO<sub>2</sub> as fases anatase, brookita e rutilo (JCPDS 01-077-0442), com o primeiro pico característico em aproximadamente 2  $\Theta$  = 27,294 °. Para WO<sub>2</sub> a fase monoclínica (JCPDS 00-032-1393) apareceu em todas as temperaturas de tratamento térmico, com o primeiro pico característico a aproximadamente  $2\Theta = 23$ °.

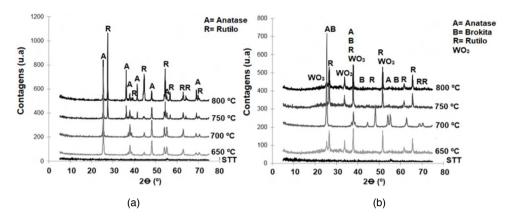


Figura 3. Difratograma das fibras nanoestruturadas sem tratamento térmico (STT) e as tratadas termicamente a 650 °C, 700 °C, 750 °C e 800 °C: (a)  $TiO_2$ , (b)  $TiO_2$ /W $O_3$ .

As Figuras 4 e 5 apresentam imagens de microscopia eletrônica de varredura (MEV) das fibras nanoestruturadas de  ${\rm TiO_2}$  e de  ${\rm TiO_2/WO_3}$ , tratadas termicamente entre 650 °C até 800 °C. Pelas imagens é possível observar que ambas fibras nanoestruturadas de  ${\rm TiO_2}$  e de  ${\rm TiO_2/WO_3}$  aparentam morfologia similar, parecem ser constituídas de um aglomerado de partículas primárias, com forma alongada, contínua e sem uma orientação preferencial. As fibras nanoestruturadas de  ${\rm TiO_2}$  apresentam diâmetro médio de (0,24  $\mu$ m), menor do que as fibras nanoestruturadas de  ${\rm TiO_2/WO_3}$  que exibiram diâmetro médio de (0,40  $\mu$ m). O aumento do diâmetro médio das fibras nanoestruturadas de  ${\rm TiO_2/WO_3}$  em relação as amostras de  ${\rm TiO_2}$  ocorre possivelmente em função da presença do aglomerado de  ${\rm WO_3}$  nas fibras nanoestruturadas provenientes desta formulação [6,7,8].

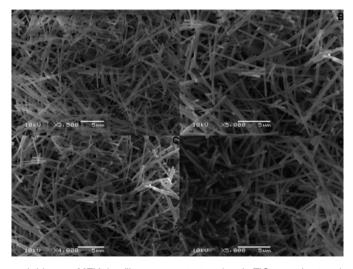


Figura 4: Imagens obtidas por MEV das fibras nanoestruturadas de  $TiO_2$  tratadas termicamente: (a) 650 °C, (b) 700 °C, (c) 750 °C e (d) 800 °C.

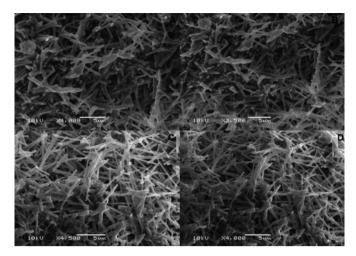


Figura 5: Imagens obtidas por MEV das fibras nanoestruturadas de  $TiO_2/WO_3$  tratadas termicamente: (a) 650 °C, (b) 700 °C, (c) 750 °C e (d) 800 °C.

As imagens abaixo foram obtidas por microscopia eletrônica de varredura (MEV), que além de corroborar a morfologia das fibras nanoestruturadas das Figuras 4 e 5 também identificou por espectroscopia de energia dispersiva (EDS), a presença de átomos de W, Ti e O nas amostras, dependendo da composição das fibras nanoestruturadas [9].

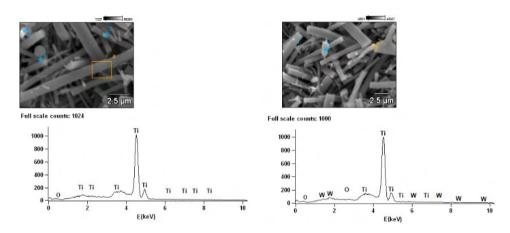


Figura 6. Imagens de microscopia eletrônica de varredura (MEV) das fibras nanoestruturadas de (a)  $TiO_2$  e de (b)  $TiO_2/WO_3$  tratadas a 800 °C.

A Figura 7 são cubetas de polimetilmetacrilato (PMMA) contendo a resposta fotocatalítica das fibras nanoestruturadas de TiO<sub>2</sub>/WO<sub>3</sub>, tratadas termicamente a 800 °C, na degradação de 125 mL de uma solução 20 ppm do corante alaranjado de metila, durante 135 minutos de irradiação UVA. É uma imagem antes das fibras nanoestruturadas serem analisadas por espectrofotometria, mas que já demonstra a efetividade destas amostras

na degradação do corante, visto que em 135 minutos de irradiação de luz, estas amostras conseguiram degradar aproximadamente 100% da coloração alaranjada, deixando-a bem parecida com a água.

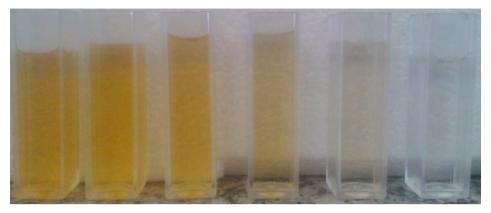


Figura 7. Resultado do ensaio fotocatalítico utilizando fibras nanoestruturadas de TiO<sub>2</sub>/WO<sub>3</sub> tratadas termicamente a 800 °C.

A Figura 8 apresenta a atividade fotocatalítica do padrão P25 e das fibras nanoestruturadas de  $TiO_2$  e de  $TiO_2/WO_3$  na degradação do corante alaranjado de metila durante 135 minutos de exposição à luz UVA ( $\lambda$  = 365 nm).

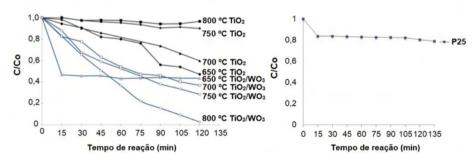


Figura 8. Concentração relativa do corante alaranjado de metila durante o ensaio fotocatalítico.

Observando a Figura 8 percebe-se que ocorre a degradação do corante alaranjado de metila sob a ação do padrão P25 e das fibras de nanoestruturadas de  ${\rm TiO_2}$  e de  ${\rm TiO_2}$ / WO $_3$  sintetizadas por *electrospinning*, ou seja, todas as amostras apresentaram atividade fotocatalítica.

A amostra contendo apenas  ${
m TiO_2}$  que mostrou maior eficiência na descoloração do corante alaranjado de metila foram aquelas tratadas à temperatura de 650 °C. Esta amostra degradou aproximadamente 50% do corante em 120 min de irradiação UV.

As fibras nanoestruturadas tratadas a 750 °C e o padrão P25 tiveram um comportamento similar, degradaram aproximadamente 20% do corante em 135 minutos de irradiação UVA. E as fibras nanoestruturadas tratadas a 700 °C e 800 °C, degradaram aproximadamente 30% e 10%, respectivamente, do corante em 135 minutos de irradiação UVA

Este decréscimo observado na fotoatividade das amostras é o resultado da formação da fase rutilo, que no caso das fibras nanoestruturadas surge a partir de tratamentos acima de 700 °C. A forma rutilo é menos fotoativa do que a forma anatase e, por esta razão o seu aparecimento reduz a atividade fotocatalítica das fibras nanoestruturadas sintetizadas [4].

A presença de tungstênio nas amostras de  ${\rm TiO_2/WO_3}$  aumentou a atividade fotocatalítica das fibras nanoestruturadas tratadas a temperatura de 700 °C, 750 °C e 800 °C, para aproximadamente 60%, 70% e 100% de degradação, respectivamente. Tal efetividade se deve; a redução do *band gap* de 3,05 eV até 2,89 eV (Tabela 1), inibição da recombinação do par elétron/lacuna [(e)/( $h^+$ )], que permitiu a transferência de cargas entre o  ${\rm TiO_2}$  e o  ${\rm WO_3}$ , e ao aumento na formação de defeitos pontuais (vacâncias de  ${\rm O_2}$ ). A elevação da temperatura de tratamento térmico possibilitou que as vacâncias de  ${\rm O_2}$  adquirissem a mobilidade necessária para passar para um estado desordenado na rede, aumentando a capacidade de degradação e a eficiência do processo [10,11,12].

Na Tabela 1 são apresentados os valores de *band gap* do padrão P25 e das fibras nanoestruturadas de  ${\rm TiO_2}$  e de  ${\rm TiO_2/WO_3}$  obtidas por *electrospinning*, tratadas termicamente à 650 °C, 700 °C, 750 °C e 800 °C.

Pela Tabela 1 nota-se que em relação ao padrão P25, os valores de *band gap* obtidos para as fibras nanoestruturadas foram menores, o que é um indicativo de que estas amostras possuem potencialidade para atuar como semicondutores nanoestruturados em fotocatálise heterogênea. Pois, a medida que aumentou a temperatura de tratamento aos quais as fibras nanoestruturadas foram submetidas, esta influenciou na redução do valor de *band gap*. Resultado das diferenças existentes entre as estruturas das fases presentes nas fibras nanoestruturadas, da presença de ligações incompletas na superfície destes materiais, que influenciam na redução do *band gap* e favorecem as propriedades ópticas do material e, também dos efeitos de superfície sobre a distribuição de níveis eletrônicos [13,14].

A Tabela 1 também nos mostra que a presença de tungstênio nas fibras nanoestruturadas de TiO<sub>2</sub>/WO<sub>3</sub> contribuiu para a redução do *band gap* das amostras, pois a sincronidade existentes na posição da banda de condução destes dois tipos de semicondutores, inibiu a recombinação do par elétron/lacuna [(e)/(h+)], permitindo a transferência de cargas entre o TiO<sub>2</sub> e o WO<sub>3</sub> [10,11,12].

Amostras	Energia (eV)
Fibras nanoestruturadas TiO <sub>2</sub> 650 °C	3,58
Fibras nanoestruturadas TiO <sub>2</sub> 700 °C	3,52
Fibras nanoestruturadas TiO <sub>2</sub> 750 °C	3,46
Fibras nanoestruturadas TiO <sub>2</sub> 800 °C	3,27
Fibras nanoestruturadas TiO <sub>2</sub> /WO <sub>3</sub> 650 °C	3,05
Fibras nanoestruturadas TiO <sub>2</sub> /WO <sub>3</sub> 700 °C	2,95
Fibras nanoestruturadas TiO <sub>2</sub> /WO <sub>3</sub> 750 °C	2,91
Fibras nanoestruturadas TiO <sub>2</sub> /WO <sub>3</sub> 800 °C	2,89
Padrão P25	3,2

Tabela 1. Valores de *band gap do padrão P25 e* das fibras nanoestruradas de TiO2 e de TiO<sub>2</sub>/WO<sub>3</sub> tratadas à temperatura de 650, 700, 750 e 800 °C.

### **41 CONCLUSÕES**

Os resultados obtidos com as fibras nanoestruturadas sintetizadas quando da sua utilização em fotocatálise, é devido a sincronicidade existente entre as propriedades químicas e físicas dos óxidos de titânio e tungstênio, pela ocorrência da redução na energia de *band gap*, e pelo aumento na formação de defeitos pontuais (Vacâncias de  $O_2$ ) que foram essenciais na fotoatividade de degradação do corante alaranjado de metila. Todas as fibras nanoestruturadas puderam ser utilizadas como fotocatalisadores. Mesmo as fibras nanoestruturadas de  $TiO_2$  tratadas em temperaturas mais elevadas (750 °C e 800 °C) que tiveram baixa fotoatividade, também apresentaram capacidade de degradar o corante alaranjado de metila. A presença de tungstênio aumentou a eficiência fotocatalítica dos materiais, inibiu da recombinação do par elétron/lacuna [(e)/(h+)], permitindo a transferência de cargas entre o  $TiO_2$  e o  $WO_3$ . A elevação da temperatura de tratamento térmico possibilitou que as vacâncias de  $O_2$  adquirissem a mobilidade necessária para passar para um estado desordenado na rede, aumentando a capacidade de degradação e absorção de luz.

#### **AGRADECIMENTOS**

Os autores agradecem ao apoio financeiro da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e do CNPq.

#### REFERÊNCIAS

[1] Quintanilha, R. C.; Rocha, I.; Vichessi, R. B.; Lucht, E.; Naidek, K.; Winnischofer H.; Vidotti, M. Eletrocromismo: fundamentos e a aplicação de nanomateriais no desenvolvimento de eletrodos de alto desempenho. Quim. No., v.37, n.4, p.677-688, 2014.

- [2] Yang, H. Electrospinning of polymeric and ceramic fibers: understanding of the morphological control and its application. 2013, 136p. University of Rochester, New York.
- [3] Jian, X. H., Zhou, Y. M., Wu, Y. C., Rang, T. L., He, J. X., Zhou, Y. M., Wu, Y. C., Liu, R. T., Nanofiber coated hybrid yarn fabricated by novel electrospinning-airflow twisting method. Surface & Coatings Technology, 2014, v.258, pp.398–404.
- [4] Feltrin, J. Jr., Sartor, De Noni, M. N. A., Bernardin, A. M., Hotza, D., Labrincha, J. A., Superfícies fotocatalíticas de titânia em substratos cerâmicos. Parte I: Síntese, estrutura e fotoatividade, Cerâmica, 2013, v.59, pp.620-632.
- [5] Rahimi, N., Pax, R. A., Mac, E. G., Review of functional titanium oxides. I: TiO<sub>2</sub> and its modifications, Progress in Solid State Chemistry, 2016, v.44, pp. 86-105.
- [6] Nguyen, T., Jun, T., Rashid, M., Kim, Y. S. Synthesis of mesoporous tungsten oxide nanofibers using the *electrospinning* method. *Materials Letters*, 2011, v.65, pp.2823–2825.
- [7] Shim, H. K, Jeong W., Sung, Y., Kim, W. B., Electrochromic properties of tungsten oxide nanowires fabricated by *electrospinning* method. Solar Energy Mat. & Sol. Cel., 2009, v.93, pp.2062–2068.
- [8] Cai, G.F. D., Zhou, Q.Q., Xiong, Zhang, J.H., Wang, X. L., Gu, C. D., GU, J. P. T., Efficient electrochromic materials based on TiO<sub>2</sub>@WO<sub>3</sub> core/shell nanorod arrays, Solar Energy Mat. & Sol. Cel., 2013, v.117, pp.231–238.
- [9] Soares, L., Alves A., Photocatalytic properties of TiO<sub>2</sub> and TiO<sub>2</sub>/WO<sub>3</sub> films applied as semiconductors in heterogeneous photocatalysis, Materials Letters, 2018, v.211, pp.339–342.
- [10] Muccillo, E. N. S., Condutores de íons oxigênio uma breve revisão, Cerâmica, 2008, v.54, pp.129-144.
- [11] Bharti, B., Kumar, S., Lee, H. N., Rajesh, K., Formation of oxygen vacancies and Ti<sup>3+</sup> state in TiO<sub>2</sub> thin film and enhanced optical properties by air plasma treatment, Scientific Reports, 2016, pp.1-12.
- [12] Oliveira, H. G., Eletrodos porosos contendo TiO₂ e WO₃: propriedades eletroquímicas e atividade fotocatalítica para remoção do corante rodamina 6G e do hormônio 17 α-etinilestradiol em solução aquosa. 2012. 188p. Doutorado. (Tese de doutorado em Ciências) Instituto de Química da Universidade Estadual de Campinas SP/Campinas.
- [13] Almeida, W. M., Síntese e avaliação da atividade fotocatalítica do Ag<sub>2</sub>O/TiO<sub>2</sub> na degradação de corante. 2012. 78p. Dissertação (Mestrado Ciência e Tecnologia Ambiental) Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia Ambiental do Centro de Ciência e Tecnologia da UEPB/Paraíba.
- [14] Tian, J., Chen, L., Yin, Y., Wang, X., Dai, J., Zhu, Z., Liu, X., Wu, P., Photocatalyst of TiO<sub>2</sub>/ZnO nano composite film: preparation, characterization, and photodegradation activity of methyl orange, Surface & Coatings Technology, 2009, v.204, pp.205–214.

74

# **ÍNDICE REMISSIVO**

#### Α

Absorção 73, 75, 76, 83, 92

Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP) 23

Alaranjado de metila 64, 65, 67, 70, 71, 73, 75, 77, 78, 79, 80, 83, 94, 96, 98, 99, 100

Aminas quirais 53, 63

Antioxidantes 12, 14, 15, 20, 25

Atividade fitoquímica 13

Azul de metileno 94, 96, 98, 100

#### В

Bambu 85, 86, 87, 89, 90, 91, 92

Band gap 65, 67, 72, 73, 77, 80, 83, 95

Bioativos 12, 14, 15, 20

Biodegradável 85, 87, 92

Biodiesel 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 62

#### C

Carboximetilcelulose (CMC) 85

Catalisador 24, 27, 35, 36, 39, 42, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60, 61, 63, 64, 68, 95

Catálise homogênea 36

Combustível 23, 24, 25, 28, 29, 30, 31, 32, 33

Conhecimento químico 1, 10

Corante 64, 65, 67, 68, 70, 71, 72, 73, 74, 75, 77, 78, 79, 80, 83, 84, 97, 98, 99, 100

#### D

Densidade 14, 23, 25, 26, 27, 28, 30, 31, 33

Dióxido de Titânio (TiO2) 64

Dolomita 53, 56, 57, 61, 63

#### Е

Electrospinning 64, 65, 66, 68, 71, 72, 74, 75, 77, 78, 82

Ensino aprendizagem 1

Ensino de química 1

Entropia 45

Estágio supervisionado 1, 2, 6, 11

### F

Fenólicos 12, 13, 14, 15, 16, 18, 19, 20

Fibras de carbono 45

Filmes finos 85, 87, 89, 90, 91, 92

Formação de professores 1, 4

Fotoatividade 65, 72, 73, 74, 75, 80, 83, 84, 100

Fotocatálise heterogênea 64, 65, 72, 95

Fotodegradação 64, 94, 99, 100

Fotoestável 94, 98

Fotorreação 95

# L

Luminescência 76, 77, 80, 81

Luz 15, 18, 67, 68, 71, 73, 76, 77, 78, 79, 80, 81, 83, 94, 95, 102, 103

#### M

Microestruturas 45

Microscopia Eletrônica de Transmissão (MET) 53, 57

Microscopia Eletrônica de Varredura (MEV) 64, 69, 70, 75, 79, 92

#### Ν

Nanocompósitos 85, 86, 87, 89, 91

Nanomateriais 64, 65, 73, 85, 86, 92

Nanotecnologia 65

#### 0

Óleo diesel 23, 24, 25

Óleo vegetal 33, 35, 36, 39, 43

Ouricuri 23, 24, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34

Óxido de ferro 85, 86, 87, 89, 90, 91, 92

#### P

Paládio 53, 55, 56, 61, 63

Piche mesofásico 45

Polietilenoglicol (PEG) 85

Polímeros 85

Poluição ambiental 95

Propriedades ópticas 64, 72, 75

Propriedades terapêuticas 12, 20

### R

Radiação eletromagnética 76

Reflectância 76

Remediação 95, 97, 98, 99, 117

Resolução cinética dinâmica (RCD) 53, 54

Rodamina B 98, 99

#### S

Semicondutor 95

Т

Teoria mesoscópica 45

Termodinâmica 45

Transesterificação 24, 27, 35, 36, 37, 38, 39, 42, 43, 44

Transmissão 53, 57, 76

Tungstênio 64, 72, 73, 75, 80, 83

#### V

Viscosidade 23, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 33

O papel fundamental da

# QUÍMICA entre as CIÊNCIAS NATURAIS 2

- m www.atenaeditora.com.br
- contato@atenaeditora.com.br
- @atenaeditora
- www.facebook.com/atenaeditora.com.br



Atena Ano 2022 O papel fundamental da

# QUÍMICA entre as CIÊNCIAS NATURAIS 2

- www.atenaeditora.com.br
- @ @atenaeditora
- f www.facebook.com/atenaeditora.com.br



Ano 2022