

REVISTA

# DESAFIOS

ISSN: 2359-3652

V.12, n.1, ABRIL/2025 – DOI: [http://dx.doi.org/10.20873/pibic\\_2024\\_21108](http://dx.doi.org/10.20873/pibic_2024_21108)

## ATIVIDADE FOTOCATALÍTICA DOS COMPÓSITOS $g\text{-C}_3\text{N}_4/\text{CaMoO}_4$ SOB RADIAÇÃO DE LUZ VISÍVEL E ULTRAVIOLETA.

*PHOTOCATALYTIC ACTIVITY OF THE  $g\text{-C}_3\text{N}_4/\text{CaMoO}_4$  COMPOSITES UNDER VISIBLE AND ULTRAVIOLET LIGHT RADIATION.*

*ACTIVIDAD FOTOCATALÍTICA DE COMPUESTOS  $g\text{-C}_3\text{N}_4/\text{CaMoO}_4$  BAJO RADIACIÓN DE LUZ VISIBLE Y ULTRAVIOLETA.*

---

### Raissa Santos Sousa:

Graduanda em Química Ambiental. Universidade Federal do Tocantins (UFT). E-mail: [raissa.sousa@mail.uft.edu.br](mailto:raissa.sousa@mail.uft.edu.br) | Orcid.org/0000-0002-4272-3966

### Gabriella Rodrigues Fernandes da Silva:

Graduanda em Química Ambiental. Universidade Federal do Tocantins (UFT). E-mail: [gabriella.silva@mail.uft.edu.br](mailto:gabriella.silva@mail.uft.edu.br) | Orcid.org/0009-0007-4211-3328

### João Paulo de Souza Santos:

Graduando em Química Ambiental. Universidade Federal do Tocantins (UFT). E-mail: [souza.santos@mail.uft.edu.br](mailto:souza.santos@mail.uft.edu.br) | Orcid.org/0009-0003-8016-9462

### Gleice Botelho:

Professora do Programa de Pós Graduação em Química. Universidade Federal do Tocantins (UFT). E-mail: [gleice.lorena@mail.uft.edu.br](mailto:gleice.lorena@mail.uft.edu.br) | Orcid.org/0000-0002-791-1381

---

## RESUMO

O nitreto de carbono grafítico ( $g\text{-C}_3\text{N}_4$ ) é um semicondutor que tem se destacado pelo seu potencial em aplicações photocatalíticas. Porém, mesmo sendo promissor, este material possui limitações, como a alta recombinação de cargas, sendo necessário estratégias, como a formação de um compósito. Dessa forma, este estudo investigou a síntese e caracterização dos compósitos formados por  $g\text{-C}_3\text{N}_4$  e molibdato de cálcio ( $\text{CaMoO}_4$ ), seguido da avaliação de sua atividade photocatalítica para a degradação do corante Rodamina B (RhB). Utilizou-se um método simples de coprecipitação para obtenção de compósitos de  $g\text{-C}_3\text{N}_4$ , com 5% (CNMo5) e 10% (CNMo10) em massa de  $\text{CaMoO}_4$ . Os materiais foram caracterizados por difração de Raios X, espectroscopia no infravermelho com transformada de Fourier, espectroscopia de reflectância difusa no UV–Vis e microscopia eletrônica de varredura. A avaliação photocatalítica revelou que os compósitos, assim como o  $g\text{-C}_3\text{N}_4$ , produziram subprodutos sob luz visível. Sob luz ultravioleta, o CNMo10 degradou 98% da RhB após 150 minutos de exposição, superando o  $g\text{-C}_3\text{N}_4$  e o CNMo5, sem geração de subprodutos. Os testes também indicaram que a adição de  $\text{CaMoO}_4$  reduziu a taxa de recombinação de pares elétron-buraco, melhorando a eficiência do processo, destacando seu potencial para aplicações na remoção de corantes.

---

**PALAVRAS-CHAVE:** Fotocatálise heterogênea, compósitos,  $g\text{-C}_3\text{N}_4/\text{CaMoO}_4$

---

---

## ABSTRACT:

*Graphitic carbon nitride ( $g\text{-C}_3\text{N}_4$ ) is a semiconductor that has stood out for its potential in photocatalytic applications. However, despite being promising, this material has limitations, such as high charge recombination, requiring strategies such as the formation of a composite. Thus, this study investigated the synthesis and characterization of composites formed by  $g\text{-C}_3\text{N}_4$  and calcium molybdate ( $\text{CaMoO}_4$ ), followed by the evaluation of their photocatalytic activity for the degradation of the dye Rhodamine B (RhB). A simple coprecipitation method was used to obtain  $g\text{-C}_3\text{N}_4$  composites with 5% (CNMo5) and 10% (CNMo10) by weight of  $\text{CaMoO}_4$ . The materials were characterized by X-ray diffraction, Fourier transform infrared spectroscopy, UV-Vis diffuse reflectance spectroscopy and scanning electron microscopy. Photocatalytic evaluation revealed that the composites, as well as  $g\text{-C}_3\text{N}_4$ , produced byproducts under visible light. Under ultraviolet light, CNMo10 degraded 98% of RhB after 150 minutes of exposure, outperforming  $g\text{-C}_3\text{N}_4$  and CNMo5, without generating byproducts. The tests also indicated that the addition of  $\text{CaMoO}_4$  reduced the electron-hole pair recombination rate, improving the process efficiency, highlighting its potential for applications in dye removal.*

**KEYWORDS:** *Heterogeneous photocatalysis, composites,  $g\text{-C}_3\text{N}_4/\text{CaMoO}_4$*

---

## RESUMEN:

*El nitruro de carbono grafítico ( $g\text{-C}_3\text{N}_4$ ) es un semiconductor que destaca por su potencial en aplicaciones fotocatalíticas. Sin embargo, a pesar de ser prometedor, este material presenta limitaciones, como alta recombinación de cargas, requiriendo estrategias como la formación de un compuesto. Así, este estudio investigó la síntesis y caracterización de compuestos formados por  $g\text{-C}_3\text{N}_4$  y molibdato de calcio ( $\text{CaMoO}_4$ ), seguido de la evaluación de su actividad fotocatalítica para la degradación del colorante Rodamina B (RhB). Se utilizó un método de coprecipitación simple para obtener compuestos  $g\text{-C}_3\text{N}_4$  con 5% (CNMo5) y 10% (CNMo10) en peso de  $\text{CaMoO}_4$ . Los materiales se caracterizaron mediante difracción de rayos X, espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier, espectroscopía de reflectancia difusa UV-Vis y microscopía electrónica de barrido. La evaluación fotocatalítica reveló que los compuestos, así como el  $g\text{-C}_3\text{N}_4$ , produjeron subproductos bajo luz visible. Bajo luz ultravioleta, CNMo10 degradó el 98% de RhB después de 150 minutos de exposición, superando a  $g\text{-C}_3\text{N}_4$  y CNMo5, sin generar subproductos. Las pruebas también indicaron que la adición de  $\text{CaMoO}_4$  redujo la tasa de recombinación de pares electrón-hueco, mejorando la eficiencia del proceso y destacando su potencial para aplicaciones en la eliminación de colorantes.*

**Palabras clave:** *Fotocatálisis heterogénea, compuestos,  $g\text{-C}_3\text{N}_4/\text{CaMoO}_4$*

---

## INTRODUÇÃO

O estudo e desenvolvimento de materiais com propriedades específicas, como os materiais semicondutores, têm ganhado visibilidade nos últimos anos devido às novas necessidades da sociedade moderna. Os materiais semicondutores, por exemplo, podem ser utilizados como fotocatalisadores, com potencial na degradação de poluentes orgânicos, purificação e desinfecção da água (Wang *et al.*, 2022).

Os processos oxidativos avançados (POAs) são alternativas eficientes para o tratamento de efluentes, podendo-se destacar a fotocatálise heterogênea. Sua aplicação consiste na utilização de um semicondutor (catalisador sólido) para acelerar uma reação química, através da utilização de radiação visível ou ultravioleta (Wang *et al.*, 2022). Os materiais semicondutores são uma classe de materiais avançados que apresentam propriedades elétricas intermediárias entre os condutores e isolantes, e sua escolha para a formação de um material compósito oferece várias vantagens, incluindo aumento de propriedades mecânicas, durabilidade e estabilidade (Callister, 2016).

O nitreto de carbono grafítico ( $g\text{-C}_3\text{N}_4$ ) é um semicondutor com grande potencial para aplicações fotocatalíticas, por possuir boa estabilidade química/física e energia de *band gap* reduzida, de aproximadamente 2,7 eV. Porém, este material apresenta limitações, como, por exemplo, sua alta taxa de recombinação de carga, que podem ser contornadas através da formação de um material compósito (Zhu *et al.*, 2014; Chen *et al.*, 2020; Ismael, 2020). Um material compósito é formado por dois ou mais constituintes (fases) diferentes. A combinação das diferentes fases em um único material tem ganhado atenção, visto que podem melhorar o desempenho em diferentes aplicações, o que seria difícil de obter com os componentes individualmente (Callister, 2016). O material escolhido para a formação do compósito foi o molibdato de cálcio ( $\text{CaMoO}_4$ ), que apresenta características, como bom desempenho redox, gap eletrônico favorável e facilidade de controle de sua morfologia e tamanho (Ray; Hur, 2020).

Recentemente, vários compósitos a base de  $g\text{-C}_3\text{N}_4$  têm sido obtidos, apresentando resultados promissores (Narkbuakaew; Sujaridworakun, 2020; Raza *et al.*, 2021; Shanmugam *et al.*, 2020; Wang; Li; Han, 2021). Por exemplo, Raza *et al.* (2022) desenvolveram um nanocompósito de  $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4@\text{Pg-C}_3\text{N}_4$ , que apresentou uma taxa de fotodegradação de 90,04% do corante Rodamina B (RhB) em 240 minutos, desempenho superior aos observados nos materiais puros. Outro estudo foi realizado por Shanmugam *et al.* (2020), que demonstrou que o nanocompósito de  $\text{Bi}_2\text{MoO}_6$ -

Ag/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> apresentou excelente atividade fotocatalítica, removendo 99,6% do corante azul de metileno, sob radiação visível em 80 minutos. Além de exibir estabilidade em ciclos sucessivos e efeito antibacteriano, sendo caracterizado como um ótimo tratamento para a remediação de poluentes orgânicos.

Dentre a classe de contaminantes que podem ser degradados via fotocatálise heterogênea, os corantes se destacam devido sua persistência no meio ambiente. A RhB é conhecida como um contaminante orgânico, muito utilizado em diversas indústrias, que possui resistência à degradação fotoquímica tornando-a uma substância de preocupação ambiental (Veena; Seetha, 2024).

Dessa forma, este presente estudo apresenta a síntese de nanocompósitos formados pela combinação de g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> e CaMoO<sub>4</sub>, além da análise de estabilidade e propriedades fotocatalíticas dos materiais formados para a degradação do contaminante RhB.

## METODOLOGIA

### Síntese dos semicondutores puros (g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> e CaMoO<sub>4</sub>)

O g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> foi sintetizado pelo método de policondensação térmica, utilizando como precursor a melamina (1,3,5-triazina-2,4,6-triamina) (Mamba; Mishra, 2016). Para isso, 10 g de melamina (C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>N<sub>6</sub>, Sigma-Aldrich, 99%) foram macerados em um almofariz de ágata e adicionada a um cadinho de porcelana com tampa. O material foi tratado em mufla à 550 °C por 3 horas com taxa de aquecimento de 5 °C/min, obtendo um material com coloração amarela, que em seguida foi desagregado em almofariz. O CaMoO<sub>4</sub> foi sintetizado pelo método de coprecipitação (Botelho *et al.*, 2016). Inicialmente, 0,6079 g de molibdato de sódio dihidratado (Na<sub>2</sub>MoO<sub>4</sub>.2H<sub>2</sub>O, Dinâmica, 99,5) e 0,4449 g de acetato de cálcio monohidratado (Ca(CH<sub>3</sub>CO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>·H<sub>2</sub>O, Synth, 99%) foram pesados e solubilizados cada um deles em 50 mL de etilenoglicol (C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>O<sub>2</sub>, Alphatec, 99,5%), sob agitação. As duas soluções foram misturadas em um frasco com tampa e adicionadas em um bêquer contendo glicerina. Manteve-se sob agitação e temperatura de 120 °C por 1 hora. O precipitado resultante foi levado à centrífuga, lavado com água destilada e seco em estufa, obtendo-se um material com coloração branca.

### Síntese dos compósitos de g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/CaMoO<sub>4</sub>

O compósito g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/CaMoO<sub>4</sub> foi sintetizado pelo método de coprecipitação, uma adaptação de metodologias disponíveis na literatura (Silva *et al.*, 2021; Mubeen *et al.*, 2023). Obteve-se um compósito de g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>/CaMoO<sub>4</sub> contendo 5% (CNMo5) e 10% (CNMo10) em massa de CaMoO<sub>4</sub>. Para a síntese do compósito CNMo5 partiu-se de 0,3800 g de g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> previamente sintetizado, e quantidades adequadas de Na<sub>2</sub>MoO<sub>4</sub>.2H<sub>2</sub>O e de Ca(CH<sub>3</sub>CO<sub>2</sub>)<sub>2</sub>·H<sub>2</sub>O, a fim de obter um compósito com 5% em massa de CaMoO<sub>4</sub> e 95% de g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>. O g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> e o molibdato de sódio foram adicionados a dois bêqueres separados, ambos contendo 50 mL de etilenoglicol, sendo então mantidos sob agitação. Em seguida, o conteúdo dos dois bêqueres foi misturado em um frasco de vidro com tampa. E da mesma forma que na obtenção do CaMoO<sub>4</sub> puro, foi mantido sob agitação e aquecimento de 120°C por 1 hora. O precipitado resultante foi levado à centrífuga, lavado com água destilada e seco em estufa para posteriormente ser desaglomerado. O mesmo procedimento foi realizado para o compósito de CNMo10, ajustando as quantidades dos reagentes.

### Caracterização dos materiais

A técnica de Difração de Raios X (DRX) foi empregada para a caracterização de estruturas cristalinas dos materiais obtidas. Basicamente a organização estrutural dos átomos de um material provoca um padrão de interferências construtivas causadas pela incidência de um feixe de raios-X como descrita pela lei de Bragg (Fonseca Filho; Lopes, 2014). As amostras foram analisadas por um difratômetro de Raios-X Rigaku, modelo DMax2500PC com radiação de Cu-K $\alpha$  ( $\lambda=1,5406\text{ \AA}$ ), no intervalo de 10° a 70°. Os materiais também foram caracterizados por espectroscopia de infravermelho com transformada de Fourier (FTIR, do inglês “*Fourier transform infrared spectroscopy*”), a fim de determinar grupos funcionais presentes nas amostras. As análises foram realizadas em um espectrofômetro PerkinElmer IR Spectrum Two, com resolução de 4 cm<sup>-1</sup> e 32 varreduras, no intervalo de 450-4000 cm<sup>-1</sup>. Para as análises, foram utilizados cerca de 1% de cada amostra para o preparo das pastilhas de brometo de potássio (KBr, Merck, 100%), previamente seco. Os materiais foram avaliados por microscopia eletrônica de varredura (MEV), sendo uma técnica bastante utilizada para a identificação de tamanho, forma e distribuição de partículas. As análises foram realizadas em um microscópio eletrônico de varredura por emissão de campo, marca JEOL, modelo JSM 7100-F. Espectroscopia de reflectância difusa no UV–Vis foi avaliada em um espectrofômetro Varian Cary 5G. A energia de *band gap* (E<sub>gap</sub>) das amostras foi calculada pela equação de Tauc

(Equação 1), em que  $\alpha$  é o coeficiente de absorção;  $h\nu$  é a frequência de luz;  $n$  é o tipo de transição eletrônica que está presente no material e  $A$  é uma constante de proporcionalidade.

$$(ahv)^{1/n} = A(h\nu - E_{gap}) \quad (\text{Equação 1})$$

Tanto o CaMoO<sub>4</sub> quanto o g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> apresentam transição direta permitida, portanto, o nos cálculos foi utilizado  $n=1/2$  para todas as amostras (Botelho *et al.*, 2016; Castro *et al.*, 2024). O  $\alpha$  foi considerado equivalente a função de Kubelka–Munk ( $F(R_\infty)$ ), resultando na Equação 2. Então, os valores de  $E_{gap}$  foram obtidos traçando um gráfico de  $(F(R_\infty)h\nu)^2$  *versus*  $h\nu$ .

$$(F(R_\infty)h\nu)^2 = A(h\nu - E_{gap}) \quad (\text{Equação 2})$$

A análise colorimétrica dos materiais sintetizados foi conduzida utilizando um colorímetro digital, Chroma Meter CR-400/410, devidamente calibrado. Os dados colorimétricos foram obtidos em termos de coordenadas e, em seguida, interpretados através de gráficos de cromaticidade desenvolvidos em aplicativo de diagrama de cromaticidade CIE 1931, disponível on-line, para visualizar e comparar as características de cada material (Hasabeldaim, Swart; Kroon, 2023).

### Avaliação da atividade fotocatalítica

Foram conduzidos ensaios fotocatalíticos em um reator adaptado no próprio laboratório, que consiste em seis lâmpadas. Os testes foram realizados tanto utilizando-se lâmpadas no visível (Philips TL-D 15W/75-650) quanto no UV (Osram UVC 15 W -  $\lambda_{\text{max}} > 254$  nm). A reação ocorreu a uma temperatura constante de 20°C sob agitação contínua. Inicialmente, dispersou-se em ultrassom (Lavadora Ultrassônica mod. SONICLEAN 15), 50 mg de catalisador em uma solução aquosa de Rodamina B (C<sub>28</sub>H<sub>31</sub>CIN<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Dinâmica, 95%) com concentração de 7 mg·L<sup>-1</sup>. Em seguida, a suspensão resultante foi transferida para o reator e mantida no escuro por 30 minutos para assegurar que ocorresse o equilíbrio da adsorção/dessorção do contaminante na superfície do catalisador. Após esse período, uma alíquota de 3 mL foi coletada. Posteriormente, a suspensão foi iluminada, e as alíquotas foram retiradas em diferentes intervalos de tempo, de 0 a 120 min sob radiação visível e de 0 a 150 min sob radiação UV. As alíquotas coletadas foram centrifugadas para remover o catalisador empregado e, em seguida, foram analisadas utilizando um

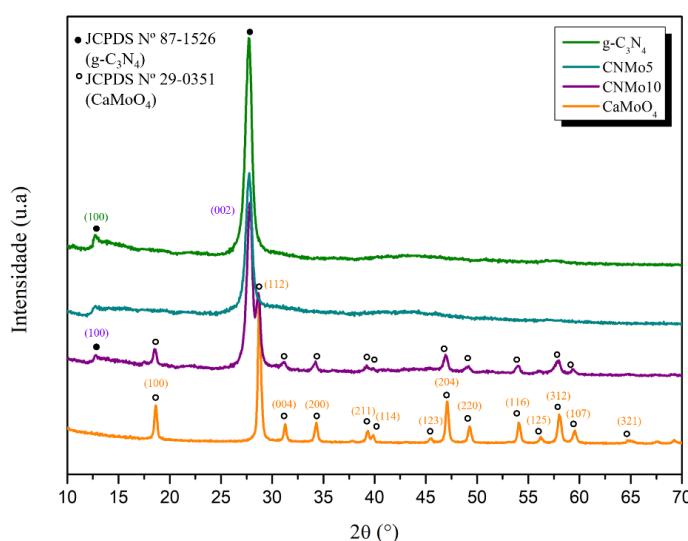
espectrofotômetro UV–Vis T70+ da PG Instruments LT, tendo como parâmetro o valor máximo de absorção da RhB (554 nm). A avaliação da atividade photocatalítica foi realizada para o g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> e os compósitos CNMo5 e CNMo10. Também foi realizado um teste sem a adição de catalisador, conhecido como fotólise, a fim de verificar o efeito apenas da luz na degradação do contaminante.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

### Caracterização dos materiais

As amostras obtidas foram caracterizadas por DRX, conforme ilustrado na Figura 1. O g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> exibiu dois picos de difração característicos, em aproximadamente 2θ 12,7° e 27,7°, que correspondem aos planos (100) e (002). Os planos (100) e (002) são associados ao empacotamento no plano das tri-s-triazinas e ao empilhamento intercamadas dos anéis aromáticos, respectivamente, (Bhosale *et al.*, 2019), que estão de acordo com a ficha cristalográfica JCPDS Nº 87-1526. O CaMoO<sub>4</sub> puro apresentou picos característicos (Figura 1) de uma estrutura tetragonal de corpo centrado, do tipo scheelita, com grupo espacial I41/a, conforme ficha cristalográfica JCPDS Nº 29-0351 (Castro *et al.*, 2024). Em ambas as amostras, não houve formação de fases secundárias. Os difratogramas dos compósitos apresentaram os principais picos do g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, e apenas o g-CNMo10 apresentou picos de ambas as fases dos materiais puros, o que está relacionado com o aumento da porcentagem mássica do CaMoO<sub>4</sub> utilizada na síntese.

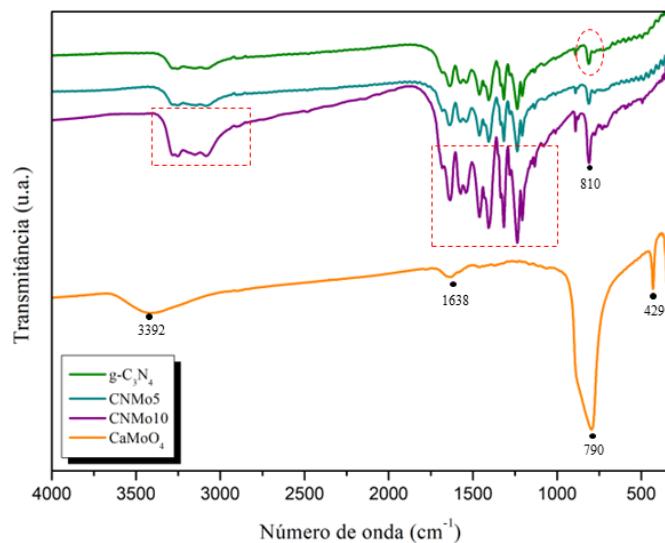
Figura 1 – Difratogramas das amostras puras (g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> e CaMoO<sub>4</sub>) e compósitos (CNMo5 e CNMo10).



Fonte: Autor, 2024.

As amostras também foram caracterizadas por FTIR, conforme ilustrado na Figura 2. No espectro do  $g\text{-C}_3\text{N}_4$  puro, as bandas entre 3000-3300  $\text{cm}^{-1}$  foram atribuídas às vibrações de estiramento das ligações de N-H, enquanto a banda em 810  $\text{cm}^{-1}$  foi relacionada com às vibrações das unidades de s-triazina. Os picos entre 1200-1635  $\text{cm}^{-1}$  foram atribuídos as vibrações de estiramento dos anéis aromáticos, relacionados com as ligações C-N (1235 – 1462  $\text{cm}^{-1}$ ) e C=N (1575 – 1635  $\text{cm}^{-1}$ ) (Huang *et al.*, 2015; Narkbuakaew; Sujaridworakun, 2020). No espectro da amostra de  $\text{CaMoO}_4$ , a banda intensa em 790  $\text{cm}^{-1}$  foi atribuída ao modo de vibração de estiramento da ligação Mo-O e a banda em 429  $\text{cm}^{-1}$  às vibrações assimétricas de O-Mo-O. Já a banda larga em 3392  $\text{cm}^{-1}$  e a banda em 1638  $\text{cm}^{-1}$  foram atribuídas às vibrações de estiramento das ligações O-H e H-O-H, respectivamente (Zhai *et al.*, 2021; Botelho *et al.*, 2016). Nos compósitos, foram identificadas as principais bandas do  $g\text{-C}_3\text{N}_4$  e a banda mais intensa do  $\text{CaMoO}_4$ , sobrepondo-se às bandas do  $g\text{-C}_3\text{N}_4$ , um indício da formação do compósito. A intensidade das bandas variou de acordo com as proporções mássicas de  $\text{CaMoO}_4$ .

Figura 2 – Espectros de FTIR para as amostras puras ( $g\text{-C}_3\text{N}_4$  e  $\text{CaMoO}_4$ ) e compósitos (CNMo5 e CNMo10).

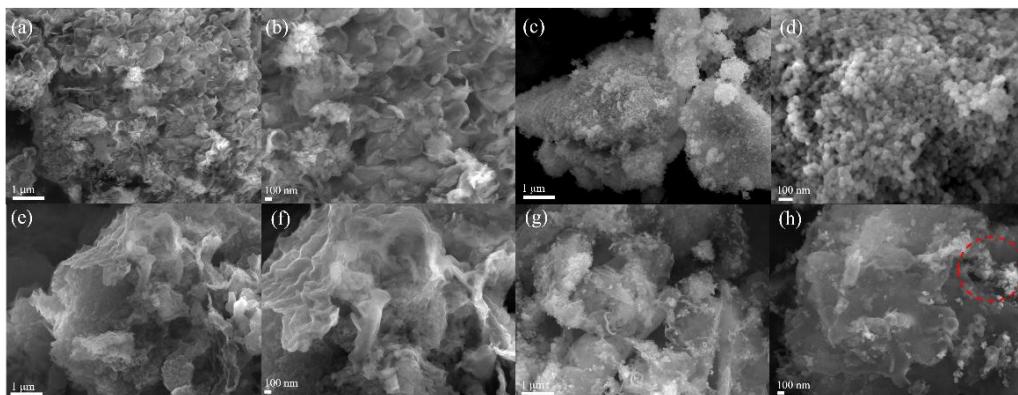


Fonte: Autor, 2024.

A morfologia das amostras puras e compósitos foram investigadas por MEV (Figura 3). Observa-se na Figura 3 (a e b), que o  $g\text{-C}_3\text{N}_4$  puro é formado por uma nanoestrutura planar semelhante a placas, que se aglomeraram, resultando em vários

agregados micrométricos. A morfologia observada é típica do g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> obtido por policondensação térmica (Qamar *et al.*, 2020; Wang; Li; Han, 2021). Na Figura 3 (c) observar-se que o CaMoO<sub>4</sub> puro é formado por grandes blocos micrométricos, porém, composto por um aglomerado de nanopartículas Figura 3 (d). A morfologia obtida está diretamente associada a utilização do etilenoglicol como solvente na síntese, visto que ele pode agir inibindo a crescimento de partícula, ao se ligar na superfície do CaMoO<sub>4</sub>, impedindo que ocorra agregação adicional (Botelho *et al.*, 2016).

Figura 3 – Micrografias das amostras de (a, b) g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>; (c, d) CaMoO<sub>4</sub>, (e, f) CNMo5 e (g, h) CNMo10.

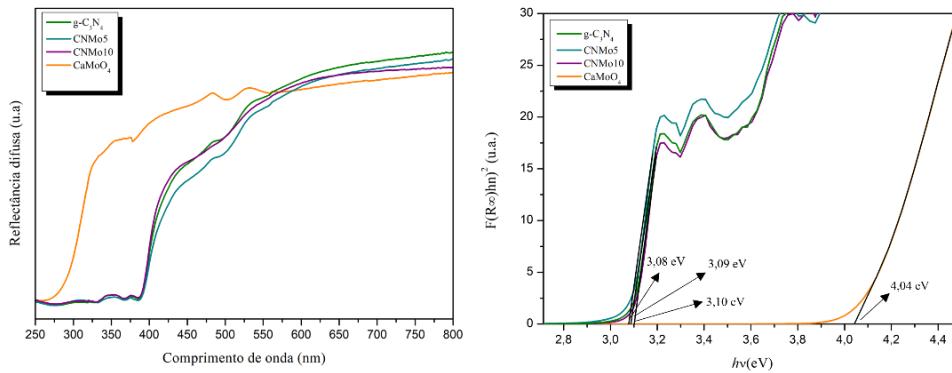


Fonte: Autor, 2024.

Nos compósitos de CNMo5 (Figura 3(e, f)) e CNMo10 (Figura 3 (g, h)) foi possível observar a presença de ambas as fases, porém, no compósito CNMo10, a presença de CaMoO<sub>4</sub> torna-se mais evidente, permitindo uma visualização aprimorada das nanopartículas de CaMoO<sub>4</sub> (destacadas pelo círculo tracejado em vermelho). Além disso, é possível observar a formação de uma superfície de contato entre as partículas dos dois materiais, o que pode garantir uma boa distribuição dos componentes, consequentemente, uma otimização das propriedades dos nanocompósitos.

A Figura 4 (a) ilustra o espectro de reflectância difusa no UV–Vis de todas as amostras. O g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> apresentou uma absorção em ~400 nm correspondente ao *band gap* de 3,09 eV, enquanto o CaMoO<sub>4</sub> exibe uma absorção em menor comprimento de onda (~ 300 nm), correspondente ao *band gap* de 4,04 eV. Estes valores obtidos estão de acordo com a literatura (Castro *et al.*, 2024). Os compósitos CNMo5 e CNMo10 apresentaram espectros semelhantes ao g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> puro, com *band gap* de 3,08 e 3,10 eV, respectivamente. Dessa forma, observa-se que mesmo após a adição de 10% em massa de CaMoO<sub>4</sub>, os compósitos continuaram apresentando absorção em maiores comprimentos de onda.

Figura 4 – Espectros de reflectância difusa no UV–Vis DRS e (b) valores de *band gap* estimado para as amostras puras ( $\text{g-C}_3\text{N}_4$  e  $\text{CaMoO}_4$ ) e compósitos (CNMo5 e CNMo10).



Fonte: Autor, 2024.

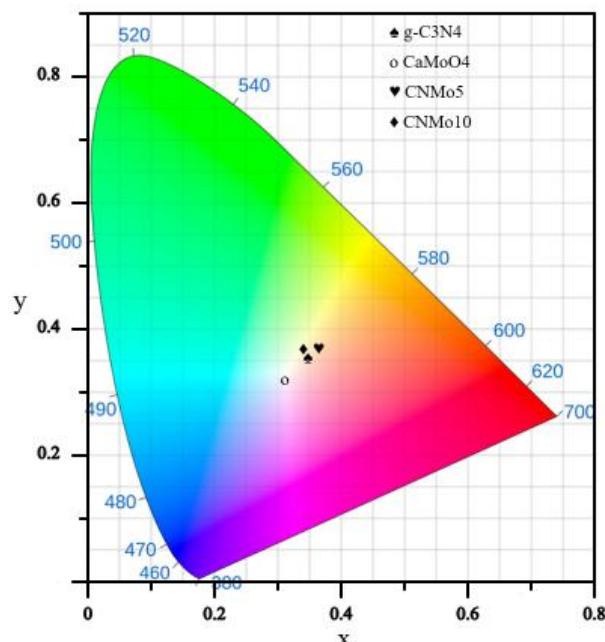
A avaliação da coloração dos materiais sintetizados foi realizada a partir das coordenadas de cromaticidade CIE e da temperatura de cor correlacionada (CCT) (Tranquilin *et al.*, 2019). Os dados obtidos estão apresentados na Tabela 1 e apresentados no diagrama de cromaticidade (Figura 5). O diagrama de cromaticidade (Figura 5) para o  $\text{CaMoO}_4$  apresenta uma coloração próxima ao branco, enquanto que o  $\text{g-C}_3\text{N}_4$ , CNMo5 e CNMo10 apresentaram uma coloração mais próxima ao amarelo claro. A análise confirma que a quantidade de cada material influencia diretamente a coloração obtida e, consequentemente, nas propriedades ópticas dos materiais.

Tabela 1 – Coordenadas de cromaticidade e cor de temperatura correlacionada para as amostras puras ( $\text{g-C}_3\text{N}_4$  e  $\text{CaMoO}_4$ ) e compósitos (CNMo5 e CNMo10).

Amostra	CIE (x,y)	CTT (K)
$\text{g-C}_3\text{N}_4$	(0.348, 0.355)	4895
$\text{CaMoO}_4$	(0.312, 0.320)	6608
CNMo5	(0.364, 0.368)	4405

CNMo10	(0.341, 0.347)	5138
--------	----------------	------

Figura 5 – Diagrama de cromaticidade para as amostras puras ( $g\text{-C}_3\text{N}_4$  e  $\text{CaMoO}_4$ ) e compósitos (CNMo5 e CNMo10).

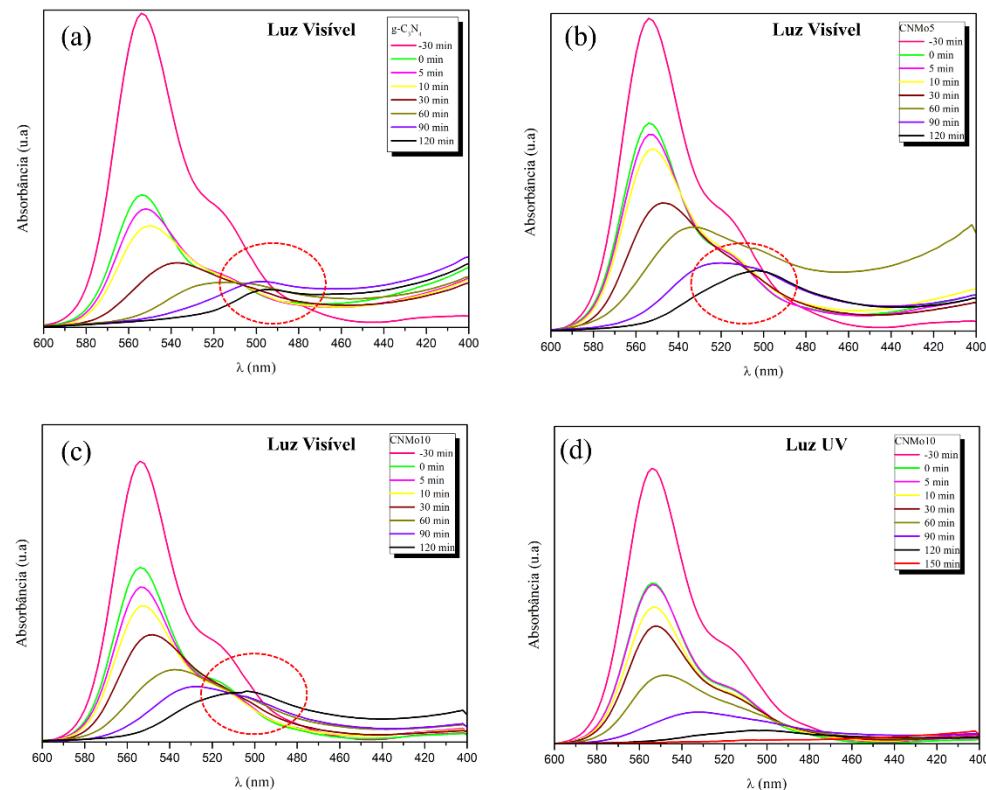


Fonte: Autor, 2024.

### Avaliação da atividade fotocatalítica do $g\text{-C}_3\text{N}_4$

Nos testes iniciais foi considerado a avaliação fotocatalítica das amostras de  $g\text{-C}_3\text{N}_4$ , CNMo5 e CNMo10, sob radiação de luz visível, utilizando como contaminante a RhB em pH original ( $\text{pH} \approx 5,4$ ). A amostra de  $\text{CaMoO}_4$  puro não foi considerada, visto que não apresentou atividade fotocatalítica sob radiação de luz visível, o que está relacionado com o seu alto valor de *band gap* de 4,04 eV (Sun *et al.*, 2024), como observado na Figura 4(a). Como pode ser observado na Figura 6 (a, b, c), os compósitos (CNMo5 e CNMo10) apresentaram perfil semelhante ao  $g\text{-C}_3\text{N}_4$  puro, todos com formação de bandas adicionais (deslocamento) mesmo após 120 min de reação, provavelmente associadas a formação de subprodutos na reação.

Figura 6 – Espectro de UV–Vis da RhB, sob radiação de luz visível, para o (a) g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, (b) CNMo5 e (c) CnMo10. (d) Espectro de UV–Vis da RhB, sob radiação de luz UV, para o CNMo10.



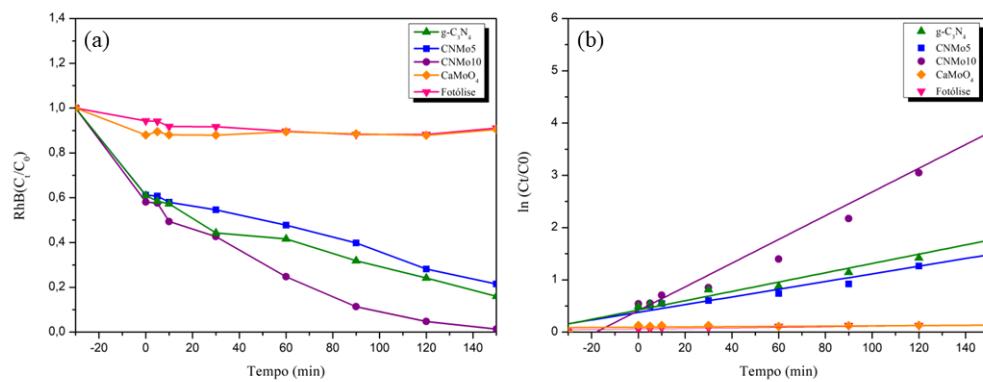
Fonte: Autor, 2024.

Assim, foi necessário a utilização de radiação UV, como exemplificado para o CNMo10 (Figura 6(d)), que obteve alta descoloração, sem a formação de bandas adicionais após 150 min de irradiação. Acredita-se que devido o CaMoO<sub>4</sub> ser um semicondutor de *band gap* largo (Figura 4 (b)), a utilização de radiação UV foi necessária para sua ativação, permitindo uma transferência de cargas entre o CaMoO<sub>4</sub> e g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, dentro do compósito.

Dessa forma, apenas os testes sob radiação UV serão considerados nas próximas etapas do estudo. A Figura 7(a) ilustra gráfico de concentração relativa da RhB ( $C_t/C_0$ ) para as amostras de g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> e compósitos (CNMo5 e CnMo10). Em que,  $C_t$  é a concentração da solução de RhB em função de diferentes tempos (t) e  $C_0$  é a concentração inicial da solução de RhB. Observa-se que o compósito CNMo10 apresentou melhores resultados em relação ao g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> puro e CNMo5. As porcentagens de descoloração obtidas foram de 84%, 78% e 98% para o g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, CNMo5 e CNMo10, respectivamente, após 150 minutos sob radiação UV. Mesmo

com a utilização de radiação UV, a amostra de  $\text{CaMoO}_4$  puro não apresentou atividade photocatalítica. Também foi realizado o teste de fotólise, a fim de verificar o efeito apenas da luz na degradação do contaminante, o teste apresentou cerca de apenas 9% de degradação após 150 min de photocatálise.

Figura 7 – (a) Degradação photocatalítica e (b) cinética de pseudo-primeira ordem para as amostras puras ( $\text{g-C}_3\text{N}_4$  e  $\text{CaMoO}_4$ ) e compósitos (CNMo5 e CNMo10), sob radiação de luz UV.



Fonte: Autor, 2024.

A partir dos resultados obtidos, a cinética da reação foi avaliada. Considerando que a reação ocorre na superfície do catalisador por meio da adsorção de RhB em seus sítios ativos, os quais permanecem praticamente constantes devido à baixa concentração do contaminante em relação à do catalisador, espera-se que a reação siga uma cinética de pseudo-primeira ordem, conforme a Equação 3 (Atkins; Jones; Laverman, 2018).

$$v = - \frac{dc}{dt} = kC \quad (\text{Equação 3})$$

Onde  $v$  representa a velocidade da reação,  $k$  é a constante de velocidade da reação e  $C$  a concentração do contaminante. O modelo de pseudo-primeira ordem realiza um ajuste linear dos dados experimentais através de um gráfico de concentração em função do tempo. Dessa forma, o valor de  $k$  pode ser obtido a partir do coeficiente angular da reta, conforme a Equação 4.

$$\ln \left( \frac{C_t}{C_0} \right) = - kt \quad (\text{Equação 4})$$

A Figura 7(b) ilustra que os dados experimentais apresentaram um bom ajuste a cinética de pseudo-primeira ordem, com coeficientes de correlação linear ( $R^2$ ) próximos a 1 (Tabela 2). A Tabela 2 também apresenta os valores obtidos de constante de velocidade para todas as amostras. Observa-se, que a constante de velocidade para a reação com CNMo10 é superior às demais amostras.

Tabela 2 – Dados da cinética de pseudo-primeira ordem para as amostras puras (g- $C_3N_4$  e  $CaMoO_4$ ) e compósitos (CNMo5 e CNMo10), sob radiação de luz UV.

Amostra	k (min <sup>-1</sup> )	R <sup>2</sup>
g- $C_3N_4$	0,008976	0,9640
$CaMoO_4$	$2,591 \times 10^{-4}$	0,02391
CNMo5	0,007350	0,9472
CNMo10	0,02269	0,9558
Fotólise	$4,940 \times 10^{-4}$	0,5267

Fonte: Autor, 2024.

Com base nos resultados, verifica-se que a adição de 10% em massa de  $CaMoO_4$  nos compósitos a base de g- $C_3N_4$  refletiu em uma melhoria significativa na atividade fotocatalítica em comparação com o g- $C_3N_4$  puro, provavelmente associado com a redução na taxa de recombinação do compósito.

## CONSIDERAÇÕES FINAIS

As amostras foram sintetizadas com sucesso pelos métodos de policondensação térmica (g- $C_3N_4$ ), e coprecitação ( $CaMoO_4$  e g- $C_3N_4/CaMoO_4$ ), como observado nos resultados de DRX, FTIR e DRS. A fonte de excitação foi crucial para a eficiência fotocatalítica das amostras obtidas, sendo necessário a utilização de radiação UV. Além disso, a porcentagem em massa do  $CaMoO_4$  também influenciou diretamente a

eficiência fotocatalítica dos compósitos, sendo que o compósito CNMo10 apresentou resultados superiores em relação às demais amostras estudadas, para a degradação de RhB, descolorindo 98% do corante após 150 minutos de exposição à luz UV. Esse aumento de desempenho pode ser atribuído à sinergia entre as fases dos materiais, que devido a transferência de cargas entre os dois materiais pode ter contribuído para a redução da taxa de recombinação do compósito.

### ***Agradecimentos***

Ao apoio recebido pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq – Brasil.

### ***Referências Bibliográficas***

ATKINS, P.; JONES, L.; LAVERMAN, L. **Princípios de Química: Questionando a Vida Moderna e o Meio Ambiente**. Bookman Editora, 2018

BHOSALE, R. *et al.* Direct Z-scheme  $g\text{-C}_3\text{N}_4/\text{FeWO}_4$  nanocomposite for enhanced and selective photocatalytic  $\text{CO}_2$  reduction under visible light. **ACS applied materials & interfaces**, v. 11, n. 6, p. 6174-6183, 2019.

BOTELHO, G. *et al.* Study of structural and optical properties of  $\text{CaMoO}_4$  nanoparticles synthesized by the microwave-assisted solvothermal method. **Materials Chemistry and Physics**, v. 183, p. 110-120, 2016.

CALLISTER JR, W. D. **Ciência e Engenharia de Materiais: Uma introdução**. 8 ed. Rio de Janeiro:LTC, 2016.

CASTRO, M. A. M. *et al.* Improvement of dye degradation by photocatalysis and synergistic effect of sonophotocatalysis processes using  $\text{CaMoO}_4/g\text{-C}_3\text{N}_4$  heterojunction. **Optik**, v. 300, p. 171682, 2024.

CHEN, Z. *et al.* Synthesis and fabrication of  $g\text{-C}_3\text{N}_4$ -based materials and their application in elimination of pollutants. **Science of the Total Environment**, v. 731, p. 139054, 2020.

FONSECA FILHO, H. D. da.; LOPES, G, A, de, C.; Avanços em Caracterização de Amostras Sólidas Cristalinas Através de Difratometria de Raios-X. **Estação Científica (UNIFAP)**. v. 3, n.1, p. 31-45, 2014.

HASABELDAIM, E. H. H.; SWART, H. C.; KROON, R. E. Luminescence and stability of Tb doped  $\text{CaF}_2$  nanoparticles. **RSC advances**, v. 13, n. 8, p. 5353-5366, 2023.

HUANG, Z. *et al.* Effect of contact interface between  $\text{TiO}_2$  and  $g\text{-C}_3\text{N}_4$  on the photoreactivity of  $g\text{-C}_3\text{N}_4/\text{TiO}_2$  photocatalyst: (001) vs (101) facets of  $\text{TiO}_2$ . **Applied catalysis. B, Environmental**, v. 164, p. 420-427, 2015.

ISMAEL, M. A review on graphitic carbon nitride ( $g\text{-C}_3\text{N}_4$ ) based nanocomposites: synthesis, categories, and their application in photocatalysis. **Journal of Alloys and Compounds**. v. 846, p. 156446, 2020.

- MAMBA, G.; MISHRA, A. K. Graphitic carbon nitride ( $\text{g-C}_3\text{N}_4$ ) nanocomposites: a new and exciting generation of visible light driven photocatalysts for environmental pollution remediation. **Applied Catalysis B: Environmental**, v. 198, p. 347-377, 2016.
- MUBEEN, K. *et al.* Band structure tuning of  $\text{ZnO}/\text{CuO}$  composites for enhanced photocatalytic activity. **Journal of Saudi Chemical Society**, v. 27, n. 3, p. 101639, 2023.
- NARKBUAKAEW, T.; SUJARIDWORAKUN, P. Synthesis of tri-s-triazine based  $\text{g-C}_3\text{N}_4$  photocatalyst for cationic rhodamine B degradation under visible light. **Topics in Catalysis**, v. 63, p. 1086-1096, 2020.
- QAMAR, M. A. *et al.* Nanocompósitos  $\text{g-C}_3\text{N}_4/\text{Cr-ZnO}$  altamente eficientes com atividade photocatalítica e antibacteriana superior. **Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry**, v. 401, p. 112776, 2020.
- RAY, S. K.; HUR, J. Surface modifications, perspectives, and challenges of scheelite metal molybdate photocatalysts for removal of organic pollutants in wastewater. **Ceramics International**, v. 46, n. 13, p. 20608-20622, 2020.
- RAZA, A. *et al.* Adsorption kinetics and photocatalytic properties of  $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ @porous  $\text{g-C}_3\text{N}_4$  for contaminant removal. **Materials Science in Semiconductor Processing**, v. 150, p. 106912, 2022.
- SHANMUGAM, Vignesh *et al.* Construction of high efficient  $\text{g-C}_3\text{N}_4$  nanosheets combined with  $\text{Bi}_2\text{MoO}_6$ -Ag photocatalysts for visible-light-driven photocatalytic activity and inactivation of bacterias. **Arabian Journal of Chemistry**, v. 13, n. 1, p. 2439-2455, 2020.
- SILVA, G. N. *et al.* Synthesis of  $\text{Ag}_3\text{PO}_4/\text{SnO}_2$  composite photocatalyst for improvements in photocatalytic activity under visible light. **Materials Science in Semiconductor Processing**, v. 135, p. 106064, 2021.
- SUN, M.-T. *et al.* Synthesis of  $\text{Ag}_2\text{O}/\text{CaMoO}_4$  S-type heterojunction with enhanced sonocatalytic performance to remove crystal violet in dye wastewater. **Inorganic Chemistry Communications**, v. 167, p. 112778, 2024.
- TRANQUILIN, R. L. *et al.* Understanding the white-emitting  $\text{CaMoO}_4$  Co-doped  $\text{Eu}^{3+}$ ,  $\text{Tb}^{3+}$ , and  $\text{Tm}^{3+}$  phosphor through experiment and computation. **The Journal of Physical Chemistry C**, v. 123, n. 30, p. 18536-18550, 2019.
- VEENA, B.; SEETHA, M. Synthesis and Characterization of Cr doped  $\text{CeO}_2$  nanoparticles for Rhodamine B dye degradation. **Helion**, v. 10, n. 16, 2024.
- WANG, H. *et al.* A review on heterogeneous photocatalysis for environmental remediation: From semiconductors to modification strategies. **Chinese Journal of Catalysis**, v. 43, n. 2, p. 178-214, 2022.
- WANG, L.; LI, Y.; HAN, P. Electrospinning preparation of  $\text{g-C}_3\text{N}_4/\text{Nb}_2\text{O}_5$  nanofibers heterojunction for enhanced photocatalytic degradation of organic pollutants in water. **Scientific Reports**, v. 11 p. 22950, 2021.
- ZHAI, H. *et al.* Excitation-induced tunable luminescent properties of polyhedral  $\text{CaMoO}_4$  microcrystallites. **Journal of Materials Science: Materials in Electronics**, v. 32, p. 10008-10017, 2021.
- ZHU, J. *et al.* Graphitic carbon nitride: synthesis, properties, and applications in catalysis. **ACS applied materials & interfaces**, v. 6, n. 19, p. 16449-16465, 2014.