
PROJETO DE PESQUISA

Programa de Iniciação Científica e Tecnológica – CBPF

Nome do Orientador e Coordenação (Pesquisador/Tecnologista/Pós-doc):
Fernando Stavale – Pesquisador COMAN

Nome do pesquisador ou tecnologista e Instituição de Pesquisa Externa: (Coorientador ou Colaborador externo, se houver):
N/A

Nome do Supervisor e Coordenação: (Pesquisador/Tecnologista):
Luiz Sampaio- Coordenador COMAN

Título do Projeto: Microscopia de tunelamento e força atômica de alta resolução para caracterização de mecanismos de adsorção e reação de moléculas sobre filmes ultrafinos de sulfetos de cobalto

Palavra-chave: Microscopia, superfícies, instrumentação

Área de conhecimento: Física da matéria condensada & física de materiais

Pré-requisitos desejáveis (se houver): $\geq 5^{\circ}$ período de Bacharel ou Licenciatura de Física, Química ou Engenharias

Pré-requisitos obrigatórios (se houver): $\geq 5^{\circ}$ período de Bacharel ou Licenciatura de Física, Química ou Engenharias

Possibilidade de orientação remota:

() Sim

(x) Não

Rio de Janeiro, 11 de fevereiro de 2026

PROJETO:
(Máximo de 3 páginas)

Resumo: Sulfetos metálicos representam uma das classes de materiais mais importantes e tecnologicamente relevantes, com aplicações em sensores de gás, optoeletrônica, fotoquímica, energia fotovoltaica e catálise. De particular interesse para nossa proposta é a relevância dos sulfetos de cobalto na catálise, principalmente devido à sua estabilidade térmica, à alta atividade e à seletividade. Essas propriedades são críticas para processos industriais, tais como: (1) Hidrodessulfurização (HDS), na qual a remoção de compostos contendo enxofre da gasolina e do diesel pode reduzir a poluição do ar e melhorar a qualidade do combustível; (2) Reações de hidrogenação, nas quais são utilizados para converter alcenos em alcanos; (3) Hidrodesnitrogenação (HDN), para remover compostos contendo nitrogênio (como piridina e quinolina), visto que esses compostos podem envenenar catalisadores e contribuir para a poluição do ar; (4) Síntese de Fischer-Tropsch (FTS) de gás de síntese (CO e H_2), na qual essas moléculas são convertidas em hidrocarbonetos, incluindo gasolina, diesel e parafinas; e (5) Eletrocatalise, especificamente relacionada a aplicações da reação de evolução de hidrogênio (HER). Além disso, a interação de moléculas com sulfetos de cobalto é altamente relevante não apenas para a catálise, mas também para outros fenômenos, incluindo aplicações relacionadas à corrosão e à lubrificação. Portanto, uma investigação minuciosa da interação de moléculas com superfícies de sulfetos — incluindo a determinação das forças de ligação, das reações químicas após a adsorção, etc. — é urgentemente necessária. Sabe-se que as propriedades dos catalisadores à base de sulfeto de cobalto podem ser ajustadas variando fatores como sua fase, a razão de composição em relação a outros cátions promotores (ex.: espécies de molibdênio), bem como sua estrutura de superfície e métodos de preparação [[x]]. No entanto, a pesquisa fundamental sobre sistemas-modelo de sulfetos de Co é, até o momento, escassa na literatura. Portanto, visamos elucidar os mecanismos fundamentais de reação relacionados às etapas

elementares de adsorção, difusão e dissociação conectadas à fase e à estrutura atômica dos sulfetos de cobalto. Para explorar esses fenômenos, superfícies de amostra atômicamente definidas serão preparadas e investigadas com microscópios de tunelamento e de força atômica em ultra-alto vácuo (UHV). Esta caracterização permitirá identificar e conectar as reações de superfície a dois principais campos de aplicação: catálise heterogênea e eletrocatalise.