

ALICIA QUINTILIANO MOURA

**SÍNTESE E CARACTERIZAÇÃO DE MoS₂ PARA APLICAÇÃO COMO
ELETRODO DE PSEUDOCAPACITORES**

Monografia apresentada ao Departamento de Química da Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências para a conclusão do Curso de Bacharelado em Química.

Orientador: Paulo Fernando Ribeiro Ortega
Co-orientador: Garbas Anacleto dos S. Junior

VIÇOSA – MINAS GERAIS

2024

RESUMO

MOURA, Alicia, projeto de conclusão do Curso de Bacharelado em Química. Universidade Federal de Viçosa, Setembro, 2024. **Síntese e caracterização de MoS₂ para aplicação como eletrodo de pseudocapacitores.** Orientador: Paulo Fernando Ribeiro Ortega.

Com a crescente demanda de energia, bem como dispositivos eficientes para seu armazenamento, os supercapacitores vêm sendo estudados como resposta à essa demanda. Este projeto teve como objetivo o estudo do dissulfeto de molibdênio (MoS₂) aplicado como eletrodo de pseudocapacitores. O MoS₂ possui diferentes fases e duas de importância eletroquímica (2H e 1T). A fase semicondutora 2H-MoS₂ tem menor condutividade e sua obtenção é termodinamicamente favorecida. Já a 1T-MoS₂ é meta-estável, porém possui maior condutividade, sendo denominada fase metálica. Ambas fases foram objetos de estudo desse trabalho. Foram realizadas sínteses por rota hidrotermal dos produtos nas fases 2H e 1T, além dos compósitos com óxido de grafeno reduzido afim de otimizar a condutividade elétrica do material. Análises de difração de Raios X (DRX) e espectroscopia Raman foram utilizadas para analisar estruturalmente as fases 2H e 1T presentes nos materiais obtidos. Foram preparados eletrodos dos materiais, que foram utilizados na montagem de células utilizando eletrólito aquoso Na₂SO₄ (1 mol L⁻¹). Foram realizadas medidas eletroquímicas, obtendo dados como capacidade específica, resistência, eficiência coulombica e energética, densidade de energia e potência a partir de testes voltamétricos e galvanostáticos. Com os resultados obtidos, foi realizado um estudo para melhoria da aplicação desse material pseudocapacitivo, visando superar as dificuldades capacitivas apresentadas pela fase 2H. Observou-se sucesso nas rotas sintéticas aplicadas para a obtenção do MoS₂, obtendo percentagem de fase 1T nos produtos obtidos comprovados pelas caracterizações estruturais. Observou-se também o melhoramento de capacitância como eletrodo para supercapacitores, obtendo valores de capacidade específica igual a 219,0 F g⁻¹ a 0,1 A g⁻¹ e densidade de potência 762,7 W kg⁻¹ para o compósito sintetizado.

Palavras-chaves: dissulfeto de molibdênio, supercapacitores, materiais pseudocapacitivos, eletroquímica

ABSTRACT

MOURA, Alicia, Undergraduate Final Paper Submitted to the Department of Chemistry in Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree of Bachelor in Chemistry, Universidade Federal de Viçosa, Março, 2024. **Synthesis and characterization of MoS₂ for application as a pseudocapacitors' electrode.** Advisor: Paulo Fernando Ribeiro Ortega.

With the increasing demand for energy, as well as efficient devices for its storage, supercapacitors are trained as a response to this demand. This project studied molybdenum disulfide (MoS₂) applied as an electrode for pseudocapacitors. MoS₂ has different phases and two of electrochemical importance (2H and 1T). The semiconductor phase 2H-MoS₂ has lower conductivity and its production is thermodynamically favored. The 1T-MoS₂ is metastable, but has higher conductivity, and is called the metallic phase. Both phases were the object of study in this work. Synthesis were carried out by hydrothermal route of the products in the 2H and 1T phases, in addition to the composites with reduced graphene oxide in order to optimize the electrical conductivity of the material. X-ray diffraction (XRD) and Raman spectroscopy analyses were used to structurally analyze the 2H and 1T phases presented in the obtained materials. Electrodes of materials were used in the assembly of cells using aqueous electrolyte Na₂SO₄ (1 mol L⁻¹) were prepared. Electrochemical measurements were performed, obtaining data such as specific capacity, resistance, coulombic and energy efficiency, energy density and power from voltammetric and galvanostatic tests. With the results obtained, a study was carried out to improve the application of this pseudocapacitive material, overcoming the capacitive difficulties presented by the 2H phase. It was observed success in the synthetic routes applied to obtain MoS₂, obtaining 1T phase percentages in the products verified by the structural characterizations. It was also observed the improvement of the capacitance as an electrode for supercapacitors, obtaining specific capacity values equal to 219.0 F g⁻¹ at 0.1 A g⁻¹ and power density of 762.7 W kg⁻¹ for the synthesized compound.

Keywords: molybdenum disulfide, supercapacitors, pseudocapacitive materials, electrochemistry