

UM ESTUDO DE DFT EM SUPERFÍCIES DE PT DECORADAS COM AD-ÁTOMOS NA PRESENÇA DE GLUCOSE

Sarah Fonseca Da Silva (sarah_fsilva@hotmail.com)

Leandro Moreira De Campos Pinto (lmcporto@gmail.com)

Martins Cauê Alves (cauealvesmartins@gmail.com)

As Direct Glucose Fuel Cells (DGFCs) são dispositivos capazes de converter energia química em energia elétrica utilizando glucose como combustível. Seu funcionamento se dá por meio de reações eletroquímicas das quais a glucose é oxidada no ânodo enquanto o oxigênio é reduzido no cátodo, esse dispositivo se caracteriza de acordo com seus catalisadores podendo ser (i) bióticos (de origem biológica sendo neste caso enzimas), com a vantagem de serem mais seletivos oxidando apenas a glucose, porém não possuem alta estabilidade eletroquímica a longos períodos de operação, ou catalisadores (ii) abióticos (de origem não biológica, normalmente nanopartículas (NPs) de metais nobres ou ligas metálicas) em que estes possuem mais estabilidade eletroquímica para longos períodos de uso sendo considerados mais viáveis para utilização em dispositivos deste gênero. No entanto, é preciso desenvolver catalisadores abióticos que sejam compatíveis com o meio fisiológico, mas os experimentos que buscam simular esse meio demandam muito tempo e recursos de forma que pode ser de grande utilidade empregar cálculos teóricos baseados em DFT (do inglês Density Functional Theory) para a previsão teórica de catalisadores abióticos candidatos a ânodo de DGFC. Dessa forma, este trabalho tem por objetivo encontrar a energia de interação de glucose com a Pt e com M/Pt (onde M são ad-átomos), utilizando superfícies modelo construídas por DFT visando o desenvolvimento de um catalisador eficiente para as GDFC. O primeiro passo para simular essa interação é a otimização do bulk iniciada variando se os parâmetros de cálculo ecutwfc (utilizando o pacote computacional Quantum ESPRESSO para os cálculos) passando para a otimização dos pontos-k e do parâmetro cristalográfico a. Com base nos valores de otimização do bulk é otimizada a superfície, cujas as coordenadas atômicas são definidas no pacote computacional Atomic Simulation Environment, também deve ser otimizada a estrutura da molécula inicialmente isoladamente e posteriormente adsorvida sobre a superfície do catalisador, nesse caso a Pt possui 4 sítios onde é possível a adsorção da molécula. A adição do ad-átomo deve ser realizada por último após a otimização de todas as estruturas e medida a interação da molécula em Pt pura. Entretanto devido ao tamanho da molécula é necessária uma célula unitária grande para evitar problemas de interação lateral, esse fato somado ao tamanho da molécula de glucose impediu que o sistema (composto pela glucose e 36 átomos de platina), atingisse a convergência de forma que não foi possível obter valores de energia de adsorção da molécula no catalisador, nem adicionar o ad-átomo, dessa forma a realização desses cálculos utilizando esse pacote computacional com esse número de átomos se tornou inviável.