



ESTUDO TEÓRICO DA ADSORÇÃO DE MONÓXIDO DE CARBONO SOBRE SUPERFÍCIE DE Pd(100) DOPADA COM TÁLIO.

Mestrando: Lucas da Rocha Sandim

Orientador: Prof. Dr. Leandro Moreira de Campos Pinto

Atualmente existe uma dependência energética global profundamente relacionada aos combustíveis fósseis. Esta dependência está acompanhada de dois graves problemas. O primeiro, refere-se ao problema geopolítico gerado pela concentração dos recursos energéticos fósseis em determinados territórios. O segundo, está relacionado à emissão de gases poluentes como CO_2 e NO_x . As células a combustível apresentam-se como uma fonte energética alternativa atrativa, devido ao elevado rendimento teórico e à baixa emissão de poluentes. No entanto, a implementação destes dispositivos está limitada pelo desenvolvimento de catalisadores eficientes e economicamente viáveis. Entre os desafios econômicos na construção destes dispositivos está o elevado preço dos catalisadores, sendo a platina o mais utilizado. Entre os problemas relacionados a eficiência destaca-se o envenenamento por monóxido de carbono. Uma possibilidade que vem sendo amplamente estudada é a utilização de paládio como substituto da platina. A utilização do paládio não está relacionada apenas ao custo, mas também à atividade catalítica, que supera a atividade da platina em meio básico. No entanto, o paládio, assim como a platina, sofre com o envenenamento por monóxido de carbono. Neste contexto, o presente trabalho apresenta resultados da investigação teórica sobre a interação do monóxido de carbono sob superfície de Pd(100) dopada com tálio, em diferentes graus de recobrimento. A metodologia empregada consiste em uma série de cálculos baseados na teoria do funcional da densidade (DFT), realizados a partir do código GPAW. Os cálculos DFT foram utilizados na caracterização da estrutura geométrica e eletrônica dos materiais, assim como na determinação da energia de adsorção das espécies e geração dos diagramas de densidade de estado (DOS). A energia de adsorção foi calculada como a diferença da energia total do sistema e as energias da superfície e molécula de monóxido de carbono, $\Delta E_{\text{adsorção}} = E_{\text{sistema}} - (E_{\text{superfície}} + E_{\text{molécula}})$. Os diagramas de (DOS) foram utilizados para analisar a interação do monóxido de carbono e a superfície. Os graus de recobrimento utilizados neste estudo foram de $\theta = 0,11, 0,22, 0,33$ e $0,44$ sobre superfície (3x3) e $\theta = 0,50, 0,75$ e $1,00$ sobre superfície (2x2). O parâmetro de rede calculado foi de $3,91(88) \text{ \AA}$. A energia de corte otimizada foi de 400 eV e a rede de pontos-k utilizada foi de $16 \times 16 \times 1$. A partir da análise dos resultados pode-se afirmar que a presença de tálio em superfície de Pd(100) desfavorece a adsorção de monóxido de carbono.

Palavras-chave: Monóxido de carbono; Ad-átomo; Teoria do funcional da densidade; Diagrama de densidade de estados.