



## Resumo

### CARBETOS DE METAIS DE TRANSIÇÃO NA ELETROCATÁLISE DE REAÇÕES DE DESPRENDIMENTO DE HIDROGÊNIO E OXIGÊNIO

\*Ricardo Bruno Ajonas Rocha<sup>1</sup>; Leandro Moreira de Campos Pinto<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Química, Universidade Federal de Mato Grosso do Sul, Campo Grande MS, Brasil. \*ricardo.ajonas@ufms.br

Com a crescente preocupação em questões ambientais, diversas inovações em várias áreas vêm sendo feitas, dentre elas na catálise, por isso novos catalisadores são de vital importância na indústria e a busca por eles se faz necessária de acordo com os princípios da química verde. Catalisadores tem uma ampla variedade de usos, de processos industriais diversos até células a combustível. Uma das ferramentas usadas nessa busca é a química computacional, onde a partir de simulações computacionais realizadas a partir de cálculos das propriedades dos materiais pode inferir possíveis usos, uma das técnicas utilizadas é o DFT (Density Functional Theory) que trata a densidade eletrônica como funcionais usando princípios de mecânica Quântica. Neste trabalho se investigou o uso de carbetos de metais de transição (particularmente o Titânio) na forma de Clusters metálicos (aglomerados metálicos contendo pelo menos 3 átomos de metal) com enfoque no  $C_8Ti_8$  e suas interações com íon Oxigênio e Oxidril. Primeiramente se fez uma otimização da superfície do cluster, esse processo consiste em uma série de cálculos DFT pelo funcional PBE para obter a conformação de menor energia do conjunto visando melhores transições eletrônicas e estabilidade como um todo, a interação com Oxigênio e Oxidril foi realizada por inserção dos respectivos íons em sítios ao redor do cluster metálico visando a melhor atividade catalítica, tal processo também foi realizado por DFT pelo funcional revPBE (PBE revisado).

Palavras -chave: Titânio, Química Computacional, Catalisadores. Clusters metálicos