



Título: Análise do envenenamento por monóxido de carbono de superfícies de Pt e SnO₂ /Pt:
uma abordagem teórica

Discente: Sarah Fonseca da Silva

Orientador: Prof. Dr. Leandro Moreira de Campos Pinto

O envenenamento por CO na superfície dos catalisadores de células a combustível limita o funcionamento do dispositivo e diminui sua viabilidade, visto que o monóxido de carbono se adsorve fortemente na superfície do catalisador. Assim, a configuração cristalográfica do material empregado pode influenciar no envenenamento, além disso, recobrir a superfície com outro metal, cuja interação com o CO seja mais fraca, pode não só reduzir o envenenamento, como também aumentar a atividade eletroquímica do catalisador. Dessa forma, a teoria do funcional da Densidade, DFT, do inglês *Density Functional theory*, é empregada para estudar as alterações na interação do CO com a superfície, nas diferentes configurações de Pt (111), (100) e (110), puras e recobertas com SnO₂. Os resultados obtidos mostram que a adsorção do CO em Pt é extremamente favorável, de forma que, quanto menos empacotada for a superfície mais fortemente se adsorverá o monóxido de carbono, em que a superfície de Pt(110) pura tem as energias de adsorção mais baixas, ou seja, a interação nessa estrutura é mais forte do que as demais configurações mais empacotadas, e se torna menos favorável a medida que mais moléculas de CO cobrem a superfície em todas as configurações testadas. Entretanto, a adição de SnO₂ aumenta significativamente a energia de adsorção do CO, indicando uma dificuldade maior de adsorção e redução do envenenamento para todas as superfícies. O efeito desse envenenamento é observado sobre o combustível, o glicerol, que também adsorve melhor na superfície mais aberta de Pt(110), apesar disso, o CO reduz parte da interação com a superfície dificultando a aproximação do glicerol com a Pt, aumentando a sua energia de adsorção. A adição do SnO₂, melhora a adsorção do glicerol, nas superfícies de Pt (110) e (100), graças ao efeito eletrônico, mas, a presença do monóxido de carbono continua dificultando a interação do combustível com o catalisador, contudo, a redução significativa da adsorção de CO causada pelo SnO₂, pode tornar viável o uso dessa espécie como recobrimento para o catalisador.

Palavras-chave: DFT; células a combustível; envenenamento por CO; catalisador