



Título: Adsorção de monóxido de carbono sobre metais

Aluno: Dalton Galantini Ribeiro

Orientador: Ednilsom Orestes

RESUMO

A busca por fontes de energia limpas e de desenvolvimento sustentável tem aumentado recentemente diante do impacto ambiental causado pelo homem. A célula a combustível para veículos automotores pode ter destaque positivo nesse aspecto já que tem como combustível o hidrogênio, o qual pode ser obtido de fontes renováveis, possui alta eficiência energética comparada aos motores à combustão e ausência de emissão de poluentes. Contudo, o envenenamento do catalisador de Pt causado pela adsorção de CO sobre sua superfície é um problema grave nas células a combustível que trabalham com a oxidação direta de metanol. Neste trabalho, a energia de adsorção do CO sobre a Pt foi investigada para 3 sítios de adsorção (*Top*, *Bridge* e *Hollow*) em função da altura da molécula de CO em relação à superfície de Pt usando o funcional de troca e correlação semi-local da DFT. Os resultados mostram uma inversão na ordem preferencial de sítios de adsorção da Pt , quando comparados com resultados teóricos e experimentais. Este problema é conhecido como “enigma da adsorção do CO ” e suas causas estão relacionadas à uma retro-doação de carga do metal para a molécula superestimada por funcionais altamente afetados pelo erro de auto-interação. A inclusão de interações dispersivas nas simulações bem como a correção do erro de auto-interação em funcionais não-locais são estratégias para resolver o enigma.

Palavras-chave: célula a combustível, energia de adsorção, enigma do CO , envenenamento da Pt , reforma a vapor, sítio catalítico