

XXII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA LA PLATA 2021

ANÁLISIS ESTRUCTURAL Y ENERGÉTICO DE NANOTUBOS DE CARBONO MODIFICADOS CON PLATINO

Nuñez José^{1,2}, Belletti Gustavo^{1,2}, Tielens Frederik³ y Quaino Paola^{1,2}.

¹Facultad de Ingeniería Química – Universidad Nacional del Litoral

²Instituto de Química Aplicada del Litoral (CONICET – UNL)

³General Chemistry (ALGC) – Materials Modelling Group, Vrije Universiteit Brussel
(Free University Brussels – VUB), Pleinlaan 2, 1050 Brussel, Belgium

jose.n@fbcb.unl.edu.ar

El platino es ampliamente conocido por su alta actividad catalítica en reacciones de interés tecnológico y científico como HER, OER, water splitting, water-gas shift, entre otras. Sin embargo, se trata de un material precioso y sumamente caro, por lo cual es imperante reducir su utilización. Una de las maneras de lograrlo es mediante la síntesis de nuevos compuestos con bajas proporciones de Pt que mantengan las características deseables del mismo. En este sentido, los nanotubos de carbono (CNT) han mostrado interesantes y únicas propiedades físicas y químicas (estructura tubular, alta estabilidad química, baja resistividad, alta conductividad térmica y eléctrica, y una enorme área superficial) que les permiten ser considerados excelentes materiales de electrodo, tanto individualmente como modificados con otro tipo de átomos, moléculas o iones conformando nuevos compuestos híbridos. Aunque la modificación de CNTs con Pt ha sido estudiada en diversos trabajos teóricos, ninguno presenta un análisis de la inserción gradual y sistemática de pocos átomos de platino sobre el nanotubo. En el presente trabajo fueron utilizados métodos computacionales *ab-initio* para modelar la adsorción de átomos, dímeros y trímeros de Pt sobre la superficie externa de nanotubos de carbono de quiralidad (5,5), con el objeto de estudiar la estabilidad energética, geometría y magnetización total de estos sistemas híbridos.

Nuestros resultados indican que la adsorción de átomos, dímeros y trímeros de Pt sobre la superficie del CNT (5,5) es energéticamente favorable en todos los casos analizados, produciéndose una respuesta magnética considerable en algunos de estos sistemas. Adicionalmente, la aglomeración de átomos de Pt se ve favorecida frente a su dispersión sobre la superficie carbonosa.

De acuerdo con los resultados obtenidos, la adsorción de Pt sobre CNT es factible y genera estructuras interesantes para un posterior análisis riguroso de los centros o zonas reactivas, y posteriormente de la reactividad química de estos sistemas híbridos en reacciones de interés tanto académico como tecnológico.