



XXXII
CAFOI

VIRTUAL

**Congreso Argentino de Fisicoquímica y
Química Inorgánica - La Plata 2021**



XXII CONGRESO ARGENTINO DE FÍSICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA LA PLATA 2021

ESTUDIO TEÓRICO Y EXPERIMENTAL DE SUPERFICIES LIBRES O FUNCIONALIZADAS DE CNTs PARA LA DEPOSICIÓN DE Rh y Pd

Ambrusi Rubén E.^{1,2}, Patrignani Mauro², Gutierrez Victoria³, Volpe María A.³ y
Pronsato Estela^{1,2}.

¹Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS)

²Instituto de Física del Sur (IFISUR&UNS)

³Planta Piloto de Ingeniería Química (PLAPIQUI)

Correo autor: ruben.ambrusi@uns.edu.ar

Introducción

Los materiales basados en nanotubos de carbono (CNTs) poseen un amplio potencial de aplicaciones debido a su estructura electrónica y geometría unidimensional, entre las cuales se encuentra el almacenamiento de hidrogeno [1]. Estudios teóricos previos se centraron en CNTs microporosos, los cuales pueden no ser lo suficientemente realistas acerca de las interacciones presentes en sistemas experimentales donde los CNTs generalmente son mesoporosos.

En el presente trabajo, se realizó un estudio teórico acerca la deposición de Rh y Pd sobre superficies carbonosas con diferentes radios de curvaturas, determinando la energía de unión y sitios más estables. La superficie carbonosa empleada como soporte de estos metales se caracterizó desde el punto de vista teórico y experimental, antes y después de funcionalizarla con grupos –OH(oxidrilo) y C–O–C(epoxi), lo cual es clave para realizar el anclaje de los metales que actúan activando la adsorción de H₂.

Resultados y Conclusiones

Inicialmente, a través de modelos de *slab* se realizaron cálculos basados en el funcional de la densidad (DFT) para la adsorción de átomos de Rh y Pd sobre nanotubos “zigzag” de diferente diámetro obteniéndose la energía de unión de los mismos. A partir de diámetros de 6.3 nm y 7.8 nm se halló que esta energía representa aproximadamente 0.25 % y menos del 4% respectivamente del valor del Rh y el Pd sobre grafeno. Por otro lado, se efectuó la medición experimental de isotermas BET de CNT pristino y a partir de análisis de distribución de poros se determinó un radio medio de poros de 18.5 nm. De la comparación de estos resultados, se observa que estas superficies presentan una curvatura adecuada como para ser modeladas como grafeno.

Consecuentemente, a través de cálculos de dinámica de red en límite armónico para grafeno pristino se hallaron los modos normales de vibración, bandas acústicas y ópticas y densidad de estados de fonones en gran concordancia con los valores teóricos y experimentales citados en literatura. A partir de este modelo, se repitieron estos cálculos en grafeno con grupos oxidrilo y epoxi y se halló el espectro infrarrojo (IR) teórico de estas superficies determinando los modos normales activos en el IR y a qué tipo de vibración corresponden.

Se plantea continuar este estudio llevando a cabo la deposición de Rh y Pd a partir de sus respectivos acetilacetatos en superficies de CNT funcionalizados así como también su caracterización mediante FTIR y otras espectroscopias.

Referencias

- 1) Ye, Y. et al., *Appl. Phys. Lett.*, **1999**, 74, 2307-2309.