



## ESTUDIO TEÓRICO DE LA NANOALEACIÓN BINARIA $Pt_nX_m$ ( $X=Ir$ , $n+m=6$ ) COMO MODELO DE CATALIZADOR DE CELDA DE COMBUSTIBLE DE BAJA TEMPERATURA

J. Daniel Córdoba\*, Graciela Díaz, M. Beatriz López

Centro de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (CIFTA), Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Catamarca, Av. Belgrano 300, 4700, Catamarca, Argentina.

\*Correo Electrónico: [daniel-cr@outlook.com](mailto:daniel-cr@outlook.com)

### RESUMEN

Uno de los principales problemas de las celdas de combustible de baja temperatura, es la baja eficiencia de los catalizadores, conformados usualmente por platino, debido a la capacidad que presenta el Pt para electro-adsorber moléculas de CO en el ánodo, lo que inhabilita los sitios activos para una posterior reducción del combustible. En consecuencia, existe un creciente interés en el diseño de nuevos catalizadores económicamente viables, más efectivos frente a las reacciones electroquímicas y tolerantes a la presencia de CO.

El presente trabajo tiene por objetivo reportar los resultados obtenidos, usando cálculos DFT, de las propiedades estructurales, electrónicas y reactividad química de nanoaleaciones binarias  $Pt_nX_m$  ( $X=Ir$ ,  $n+m=6$ ), libres y soportadas en grafeno como bloques de construcción de catalizadores de celdas de combustibles. Los cálculos fueron realizados bajo el formalismo del programa gaussian 09, utilizando el funcional B3PW91 y el pseudopotencial LANL2DZ para los átomos metálicos y la base 6-31G\* para los átomos de carbono y oxígeno.

Se analizaron las distintas estructuras geométricas, propiedades electrónicas y reactividad química. Las propiedades electrónicas se determinaron por el análisis energético de los orbitales frontera HOMO/LUMO. La reactividad química de las estructuras energéticamente favorables se analizaron a través de los indicadores globales de reactividad: potencial química, dureza química e índice de electrofilicidad, permitiendo identificar la estructura más reactiva de la serie al sistema  $PtIr_5$ .

El grafeno como soporte provoca una modificación en las propiedades electrónicas de los catalizadores, puros y aleados, lo que genera un mayor debilitamiento en la energía de adsorción de CO.

Nuestros resultados permiten confirmar que el grafeno junto a las nanoaleaciones constituyen un catalizador con mayor tolerancia al CO que las nanoaleaciones no soportadas.

### ABSTRACT

One of the main problems of low temperature fuel cells, is the low efficiency of the catalysts, usually formed by platinum, because of the Pt capacity of electro-adsorbing CO molecules at the anode, which disables the active sites for further reduction of the fuel. Consequently, there is growing interest in designing new catalysts economically viable, more effective against tolerant electrochemical reactions to the presence of CO.

This paper aims to report the results obtained using DFT calculations of the structural, electronic and chemical reactivity of binary nanoalloys  $Pt_nX_m$  ( $X = Ir$ ,  $n + m = 6$ ), free and supported on graphene as building blocks fuel cell catalysts. The calculations were performed under the formalism of Gaussian 09 program, using the functional B3PW91 and LANL2DZ pseudopotential for the metal atoms and the 6-31G\* basis for the carbon and oxygen atoms.

*Various geometric structures, electronic properties and chemical reactivity were analyzed. The electronic properties are determined by the energy analysis orbitals HOMO/LUMO. The chemical reactivity of the energetically favorable structures are analyzed through global indicators of reactivity: chemical potential, chemical hardness and electrophilicity index, allowing the identification of the most reactive structure of the series to PtIr<sub>5</sub> system.*

*Graphene as a support causes a change in the electronic properties of catalysts, pure and alloyed, generating a further weakening in the energy of adsorption of CO.*

*Our results confirm that graphene with the nanoalloys constitute a catalyst with increased tolerance to CO that unsupported nanoalloys.*

**TÓPICO DEL CONGRESO O SIMPOSIO:** T22

**PRESENTACIÓN (ORAL O PÓSTER):** P (poster)