



ESTUDIO DFT DE LA ADSORCIÓN Y DIFUSIÓN DE OXÍGENO SOBRE DIFERENTES METALES DE TRANSICIÓN

Elizabeth del V. Gómez^{(1)*}, Lucía B. Avalle⁽¹⁾, María C. Gimenez⁽¹⁾

⁽¹⁾Instituto de Física Enrique Gaviola, Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Medina Allende, Córdoba, Argentina.

*Correo Electrónico: elizabethdelvgomez@hotmail.com

RESUMEN

Debido a las limitaciones de los combustibles fósiles, hoy en día se hace imprescindible el estudio de fuentes de energía renovables (como la eólica, la energía solar, etc.). Un rol muy importante en la obtención y almacenamiento de estas energías lo cumplen las celdas de combustible. Las mismas consisten en la utilización del oxígeno y el hidrógeno molecular, para formar agua y obtener energía a partir de dicha reacción. El estudio de oxígeno e hidrógeno adsorbido sobre superficies metálicas es importante en la comprensión de catálisis heterogénea y electrocatálisis [1,2]. La interacción de oxígeno con electrodos tales como oro, plata, platino, complejos de metales de transición, han sido el foco de considerables investigaciones debido a la importancia tecnológica en sistemas de conversión de energía [3]. En el presente trabajo se realizaron cálculos teóricos a nivel DFT para la difusión de oxígeno atómico sobre la superficie (100) de distintos metales de transición. Los cálculos se han llevado a cabo en el marco de la teoría del funcional de la densidad (DFT) haciendo uso de la aproximación de gradiente generalizado (GGA) de Perdew- Burke-Ernzerhof (PBE) para el funcional de intercambio-correlación y de los códigos pwscf y pwneb, distribuidos con el paquete de Quantum-ESPRESSO[4]. La superficie de los diferentes metales se ha modelado en una celda computacional $p(2 \times 2)$ con condiciones periódicas de contorno. El espesor de la superficie es de 5 capas.

ABSTRACT

The study of renewable energy sources (such as wind, solar, etc) is an essential topic that is being intensively investigated. Fuel cells have an important role in the collection and storage of these energies. They consist of the use of oxygen and molecular hydrogen to form water, obtaining the energy from this process. The study of oxygen and hydrogen adsorbed on metal surfaces is important in understanding electrochemical heterogeneous catalysis [1, 2]. The interaction of oxygen with electrodes such as gold, silver, platinum, transition metal complexes, have been the focus of considerable research because of the technological importance in energy conversion systems [3]. In this report, the atomic oxygen diffusion on the surface (100) of different transition metals was calculated at a Density Functional Theory (DFT) level. The calculations were carried out in the framework of the DFT using the generalized gradient approximation (GGA) of Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) for the exchange-correlation functional and pwscf and pwneb codes (distributed with the package Quantum-ESPRESSO) [4]. The surface of different metals has been modeled in a computational cell $p(2 \times 2)$ with periodic boundary conditions. The thickness of the surface layers was 5.

REFERENCIAS

1. Bockris J.O.M., Conway B.E. "Modern Aspects of electrochemistry", Plenum Press, N.Y. (1974).
2. Kolb D.M., Gerischer H., Tobias C.W. "Advances in Electrochemistry and Electrochemical Engineering", Wiley, N.Y (1978).
3. Alvarez-Rizatti M., Juttner K.. "Electrocatalysis of oxygen reduction by upd of lead on gold single crystal surfaces", J. Electroanal. Chem. 144,351-363 (1993).

4. Giannozzi, P. et al “QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials”, J. Phys.: Condens. Matter, 21,

TÓPICO DEL CONGRESO O SIMPOSIO: *T06*

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