

Estudio DFT de la adsorción de CO y NO sobre GDY funcionalizado con metales para remediación ambiental

Jiménez, M. Julia; Rossi Fernández, Ana C.; Juan, Julian; Sandoval, Mario G.; Jasen, Paula V.;
González, Estela A.

Instituto de Física del Sur (IFISUR-CONICET) UNS. Av. Alem 1253 Bahía Blanca, Bs As.

julia.jimenez@uns.edu.ar

Área temática: D. Fenómenos de Superficies

La transición hacia fuentes de energía limpias es un desafío global debido a la necesidad de mitigar la degradación ambiental causada por combustibles fósiles. A su vez, el aumento en la demanda energética genera emisiones de gases tóxicos industriales, como el monóxido de carbono (CO) y el óxido nítrico (NO), que afectan al medioambiente y la salud. Por ello, es clave desarrollar estrategias que satisfagan estas demandas minimizando la contaminación. Graphdiyne (GDY) es un material bidimensional (2D) de carbono, con estructura hexagonal (grupo espacial P6/mmm) caracterizada por enlaces Csp²-Csp² (1,43 Å), Csp²-Csp (1,39 Å), Csp-Csp (1,23 Å) y Csp-Csp (1,39 Å), generando una distribución de carga no homogénea. Sus parámetros de red son a=b=9,45 Å y posee una estructura porosa uniforme a nanoescala. GDY exhibe carácter semiconductor con alta conductividad eléctrica. Entre sus aplicaciones se encuentra: almacenamiento de energía, fotocatalizadores, fotodetectores, sensores y purificación de gases.

En este trabajo se realiza un estudio teórico basado en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), utilizando el código VASP, para analizar los efectos “single-atom catalysts” (SAC) y “dual-atom catalysts” (DAC) formado con metales de transición (TM: Rh, Fe, Mo, Co y Cr) sobre GDY en la adsorción de CO y NO para posibles aplicaciones de remediación ambiental.

Los resultados indican que la funcionalización con TM conduce a energías de enlace más favorables en sistemas DAC en comparación con SAC, en combinaciones de Rh con otros TM con valores en el rango de -8.12 a -9.95 eV para DAC y de -2.35 a -4.44 eV para SAC. Asimismo, las energías de adsorción resultan más favorables para NO que para CO en todos los casos analizados. Se observa que las moléculas se adsorben mediante los átomos de N y C en proximidad a los TM, mientras que los átomos de O se orientan alejándose de la superficie. Este comportamiento se explica mediante el análisis de cargas de Bader y mapas de diferencia de densidad de carga (CDD). El análisis de densidad de estados electrónicos (DOS) revela la hibridación entre los orbitales p (C, O, N) y los orbitales d de los TM, explicando los cambios en las propiedades electrónicas, químicas y magnéticas del sistema. En conjunto, los resultados sugieren que GDY funcionalizado con TM constituye un candidato prometedor como material catalítico para la captura y remoción de CO y NO en procesos de remediación ambiental.