

Engenharia Física

Simulações Computacionais de Catalisadores 2D para a Reação de Evolução de Hidrogênio

Edgar Marques Paoletti Oliveira - Décimo período de Engenharia Física, UFLA, Bolsista FAPEMIG

Igor Saulo Santos de Oliveira - Orientador DFI , UFLA - Orientador(a)

Resumo

A crescente demanda por fontes de energia limpa e sustentável tem direcionado esforços para a produção de hidrogênio verde, no qual a reação de evolução de hidrogênio (HER) surge como etapa central. Entre os catalisadores promissores, os dicalcogenetos de metais de transição (TMDs), como PtTe₂, PtSe₂ e PtS₂, destacam-se pelo desempenho catalítico. Nesse contexto, este trabalho propõe o estudo computacional do Pt₂Te₂, material bidimensional com propriedades estruturais e eletrônicas favoráveis, visando explorar seu potencial como catalisador para HER. O objetivo consiste em caracterizar a estrutura eletrônica e a estabilidade do Pt₂Te₂, além de avaliar sua atividade catalítica frente à HER. Para isso, serão utilizados cálculos baseados na Teoria do Funcional da Densidade (DFT), permitindo investigar propriedades fundamentais e a energia livre de adsorção de hidrogênio, parâmetro essencial para a eficiência catalítica. A metodologia inclui a modelagem de superfícies de Pt₂Te₂ e de heteroestruturas com TMDs correlatos, com posterior otimização geométrica. A partir dessas simulações, serão obtidos dados da energia de adsorção, intermediários de reação e energias de ativação das etapas elementares da HER. Essa abordagem possibilitará a análise comparativa entre Pt₂Te₂ e outros materiais, como PtTe₂, PtSe₂ e PtS₂. Os resultados esperados incluem a identificação de sítios ativos e a compreensão dos mecanismos envolvidos na reação, permitindo relacionar estrutura e atividade catalítica. Assim, o estudo poderá contribuir para o avanço de catalisadores 2D aplicados à produção de hidrogênio verde, fornecendo uma alternativa sustentável para geração de energia limpa.

Palavras-Chave: Hidrogênio verde, catalisadores 2D, Pt₂Te₂.

Instituição de Fomento: FAPEMIG

Link do pitch: https://youtu.be/dvLYU_C9_zY