



GRAFENO DOPADO COM NITROGÊNIO USADO COMO CATALISADOR EM CÉLULA COMBUSTÍVEL

Pedro Bellarmino Coêlho Neto¹, Arthur Vinícius de Sousa Batista² Luis Alberto Terrazos Javier³

RESUMO

O grafeno é um material relativamente novo que vem despertando o interesse de inúmeros pesquisadores ao redor do mundo. O interesse dos cientistas por esse alótropo do carbono, deve-se à sua versatilidade e suas excelentes propriedades, sejam elas eletrônicas ou mecânicas, como flexibilidade, resistência, ou condutibilidade.

Nesse trabalho, trabalhamos com a dopagem do grafeno com o nitrogênio, isto é, um dos átomos de carbono da folha de grafeno foi substituído por um de nitrogênio e, após isso, foi depositada uma nanopartícula de Pt nessa folha dopada. Com o objetivo de criar um suporte catalisador à platina em células combustíveis, cientistas descobriram que o grafeno exerceria esse papel como nenhum outro material. Foi feita cálculos da estrutura eletrônica do grafeno dopado com nitrogênio e com a nanopartícula na sua superfície utilizando o programa CASTEP que esta inserido no Materials Studio. Obtivemos a estrutura de bandas e a densidade de estados do grafeno puro e grafeno dopado com nitrogênio e observamos que as bandas se deslocam para baixo na banda de valência onde nos mostra que a densidade de estados aumenta na energia de Fermi.

Palavras-chave: Grafeno, Nanopartícula, Nitrogênio

¹Aluno do Instituto o Pequeno Doutor, Cuité, PB, e-mail: pedrindasneg@gmail.com

²Aluno do Instituto o Pequeno Doutor, cuité, PB, e-mail: arthurjanajosemar@gmail.com

³Doutor, professor, UAFM, UFCG, Cuité, PB, e-mail: lterrazo@ufcg.edu.br

NITROGEN-DOPED GRAPHENE USED AS A CATALYST IN FUEL CELLS

ABSTRACT

Graphene is an important allotrope that attracts significant attention due to its two-dimensional structure, monoatomic thickness consisting of carbon atoms, and hexagonal lattice arrangement. This material possesses indispensable characteristics and properties such as high thermal and mechanical resistance, flexibility, thinness, and excellent thermal conductivity. Graphene facilitates faster DNA sequencing through nanopores, which are small openings within its structure. Three types of nanopores with different diameters were developed: the first with a diameter of 5.58 Å, the second with 10.24 Å, and the third with 29.52 Å. We calculated the electronic structure of these nanopores using the CASTEP program integrated into the Materials Studio platform.

We conducted molecular dynamics simulations of the translocation of nitrogenous bases through the graphene nanopores using the Forcite program. During the molecular dynamics calculations, each base was found to be at different distances from the nanopores, specifically 5.68 Å, 10.24 Å, 29.52 Å, and 24.01 Å.

In the density of states of the nanopore, we observed that there are both s and p states at the Fermi energy, and as the nanopore dimensions increase, the number of s states at the Fermi energy also increases.

Keywords: Graphene, Nanoparticle, Nitrogen

