



RENIECYT - LATINDEX - Research Gate - DULCINEA - CLASE - Sudoc - HISPANA - SHERPA UNIVERSIA - E-Revistas - Google Scholar
DOI - REDIB - Mendeley - DIALNET - ROAD - ORCID

Title: Modelado molecular de un ánodo de carbón activado como soporte de platino por medio de cálculos DFT

Authors: VALENZUELA-HERMOCILLO, Ernesto, PACHECO-SÁNCHEZ- Juan y RIVAS-CASTRO, Sofía.

Editorial label ECORFAN: 607-8695

BCIERMMI Control Number: 2019-135

BCIERMMI Classification (2019): 241019-135

Pages: 17

RNA: 03-2010-032610115700-14

ECORFAN-México, S.C.

143 – 50 Itzopan Street
La Florida, Ecatepec Municipality
Mexico State, 55120 Zipcode
Phone: +52 1 55 6159 2296
Skype: ecorfan-mexico.s.c.
E-mail: contacto@ecorfan.org
Facebook: ECORFAN-México S. C.

Twitter: @EcorfanC

www.ecorfan.org

Holdings

Mexico	Colombia	Guatemala
Bolivia	Cameroon	Democratic
Spain	El Salvador	Republic
Ecuador	Taiwan	of Congo
Peru	Paraguay	Nicaragua

Introduction

Methodology

Results

Conclusions

References

Introduction

El excesivo uso de combustibles fósiles, ha ocasionado el aumento de contaminantes al ambiente, así como, la creciente demanda energética a nivel mundial.

A provocado la necesidad de diseñar e investigar nuevas fuentes alternas para producir energía de manera más eficiente y amigable con el ambiente.

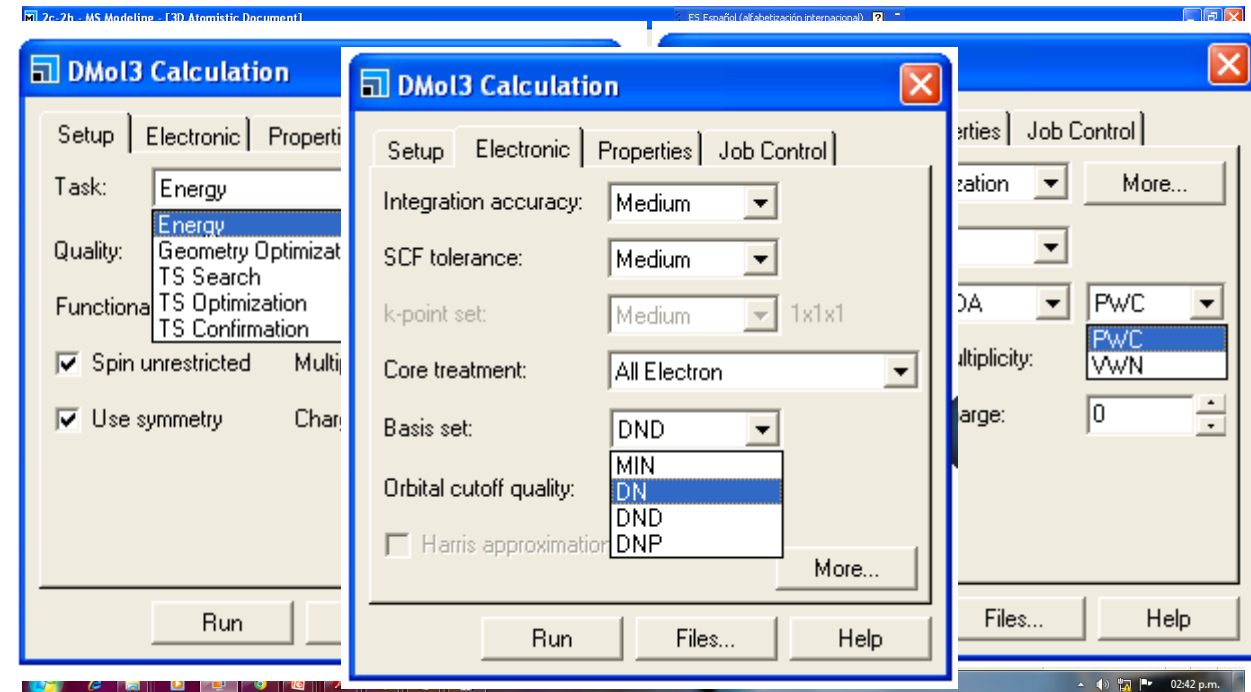
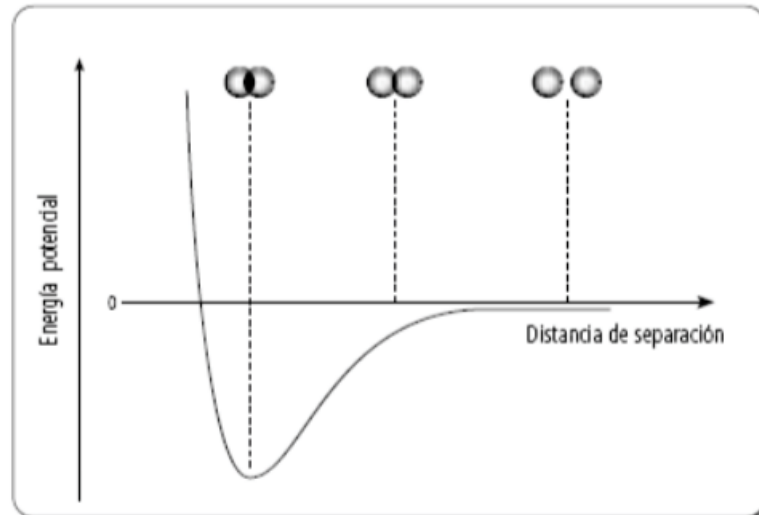
Las celdas de combustible representas una gran alternativa para la generación de energía eficiente y limpia, en equipos móviles o estacionarios. Eficiencia teórica del 80% y emision nula de contaminates.PEM.

Sir. William Robert Grove.

La problemática en la celdas de combustible.

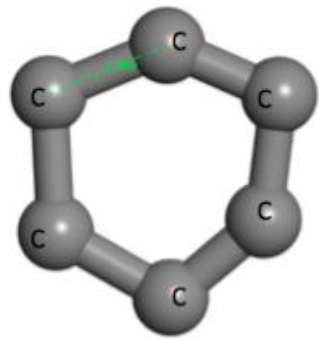
Methodology

Modelos {
Thomas-Fermi
Hohenberg-
Kohn
Kohn y Sham



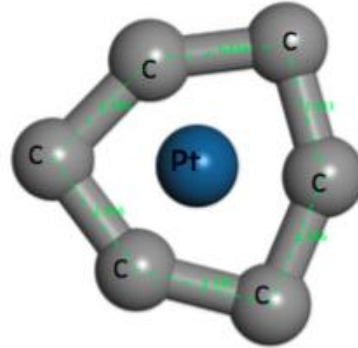
Results

Interacción Pt-C₆ (C₆ activado con KOH)



a)

Input
 $d = 1.333\text{-}1423 \text{ \AA}$

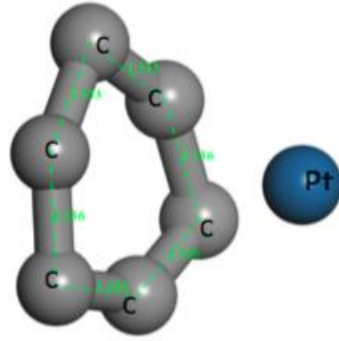


b)

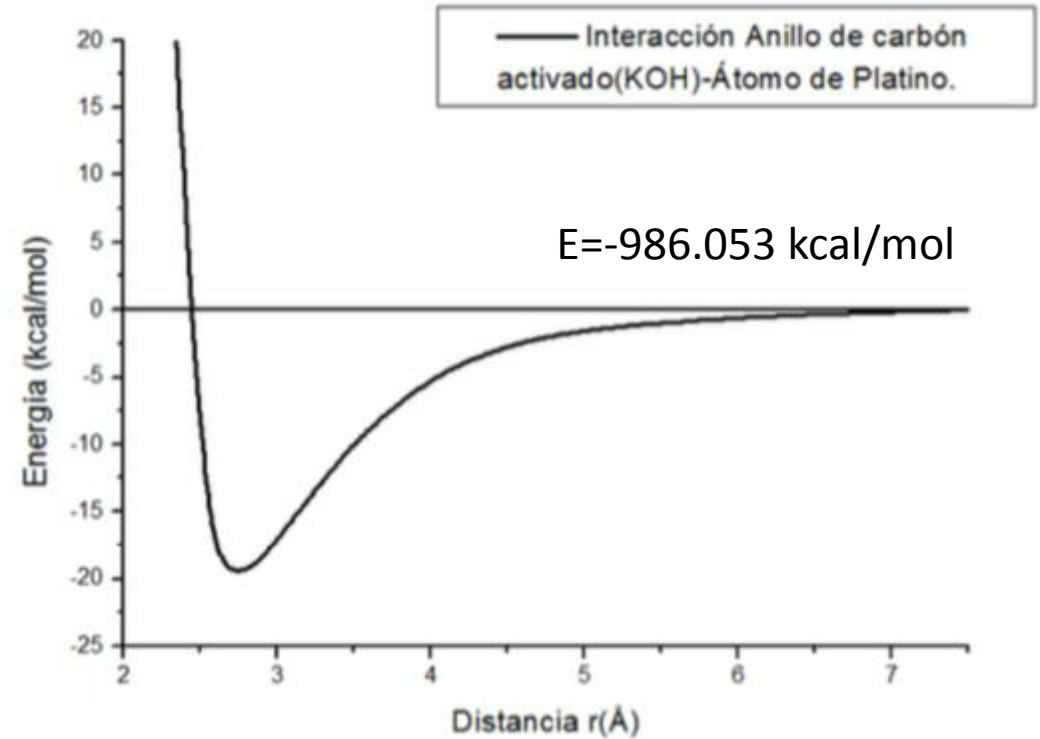


a)

Output
 $d_e = 2.742 \text{ \AA}$

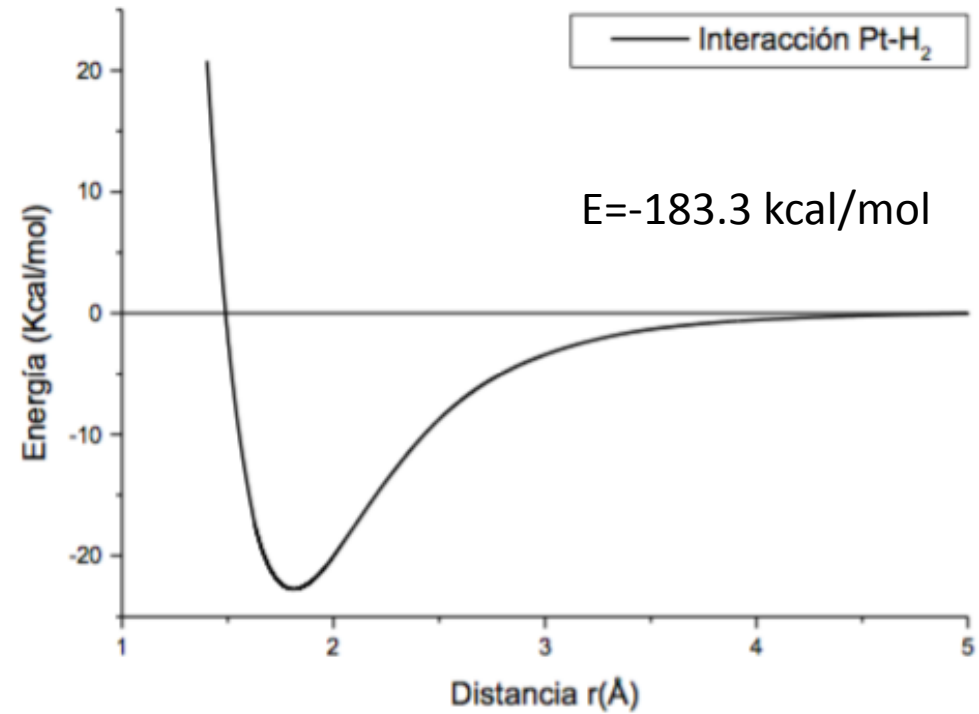
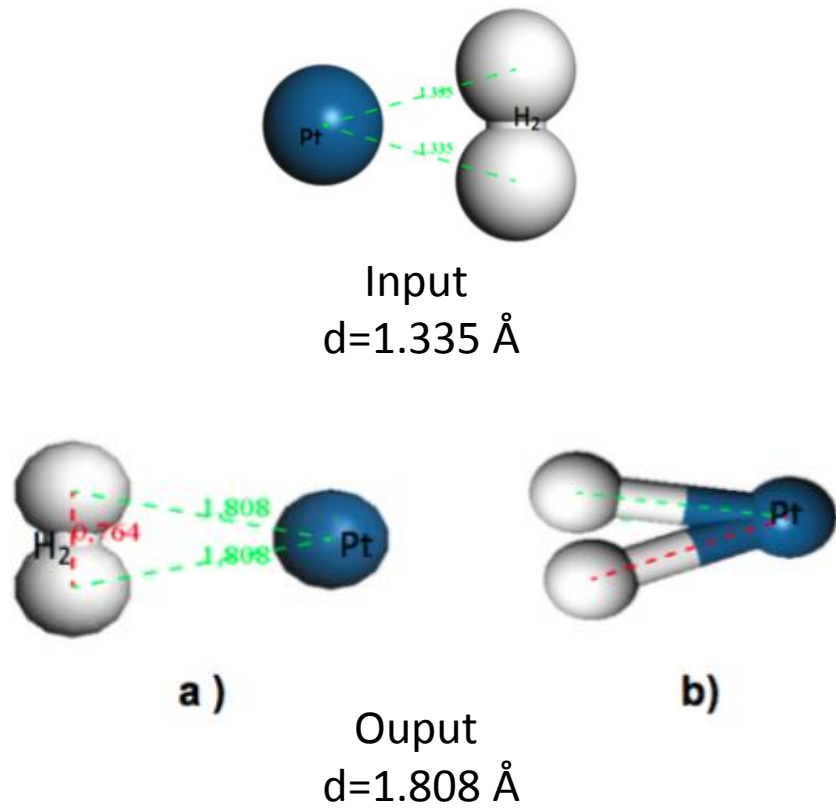


b)



$E_e = 19.511 \text{ kcal/mol}$

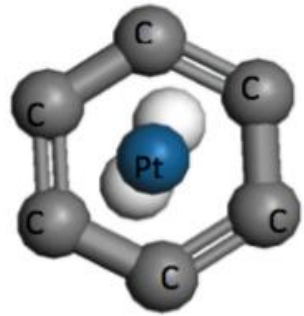
Interacción Pt-H₂



$$E_e=22.751 \text{ kcal/mol} \approx 0.9865 \text{ eV}$$

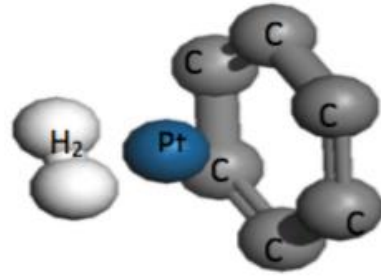
$$E_{\text{exp}}=26.52 \text{ kcal/mol} \approx 1.15 \text{ eV} [14]$$

Interacción C₆-Pt-H₂

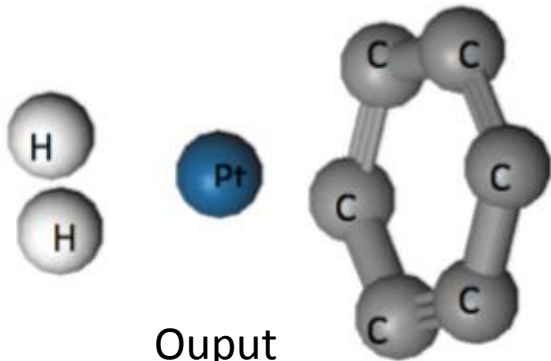


a)

Input

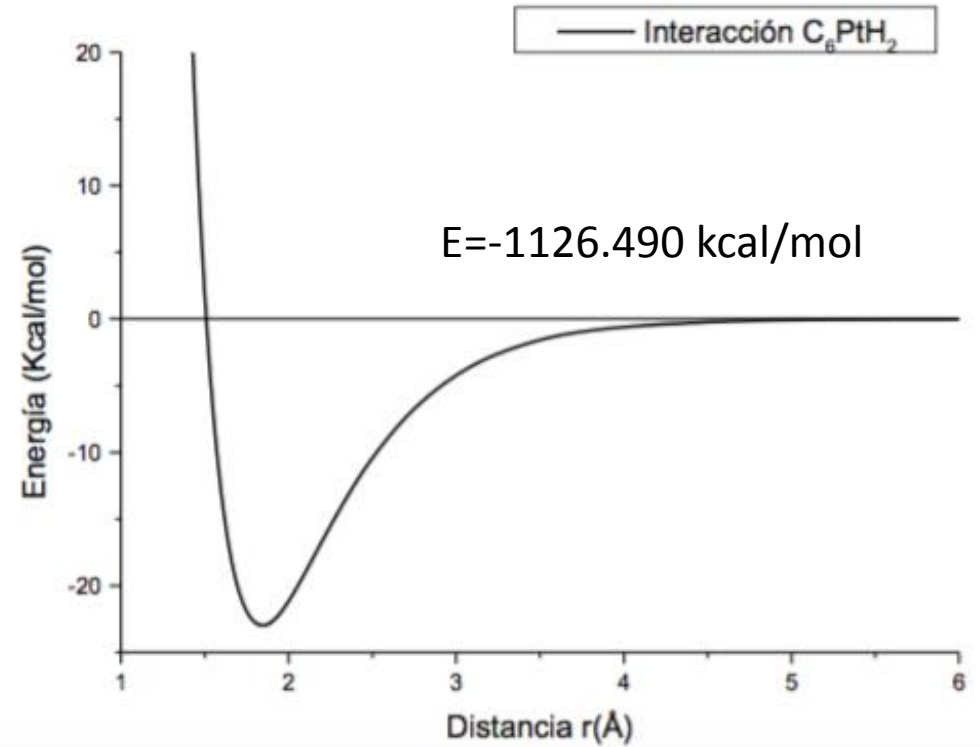


b)



Ouput

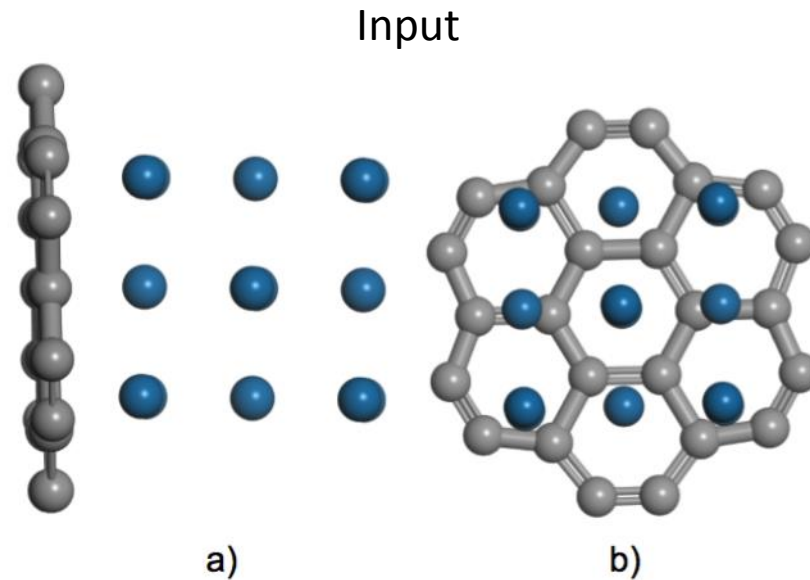
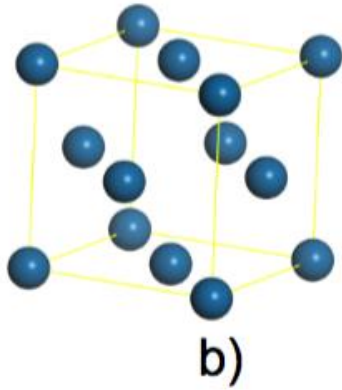
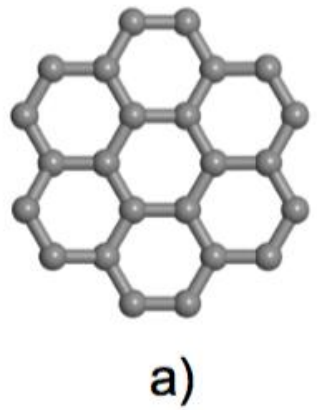
$$d_{\text{H-Pt}} = 1.827 \text{ \AA}$$
$$d_{\text{Pt-C}_6} = 2.630 \text{ \AA}$$



$$E_e = 23.301 \text{ kcal/mol} \approx 1.01 \text{ eV}$$

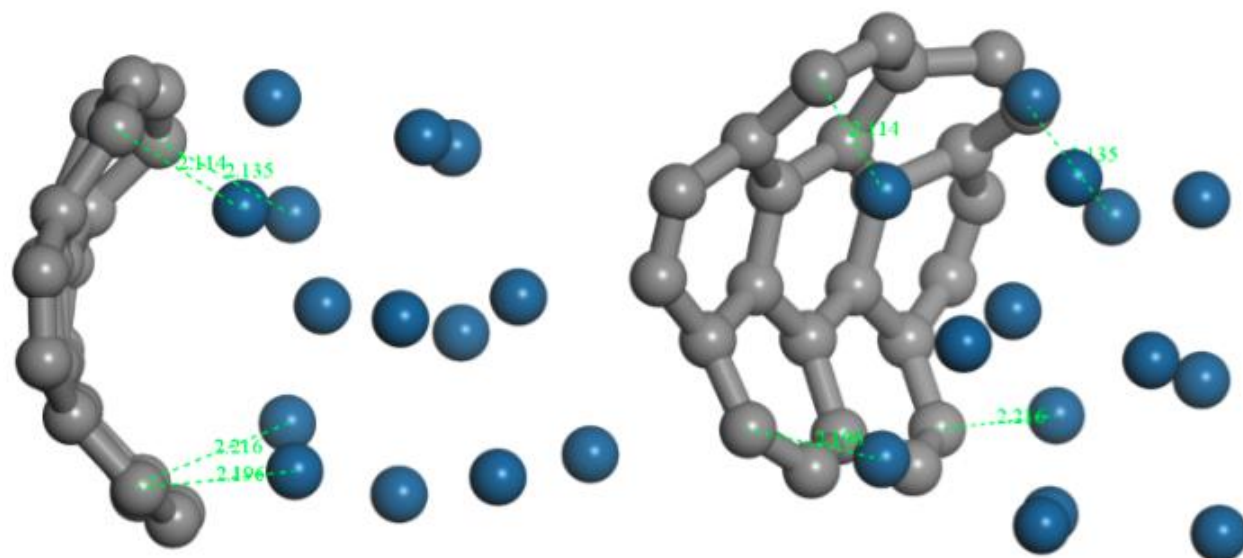
$$E_{\text{exp}} = 26.52 \text{ kcal/mol} \approx 1.15 \text{ eV} [14]$$

Interacción grafeno-estructura fcc platino

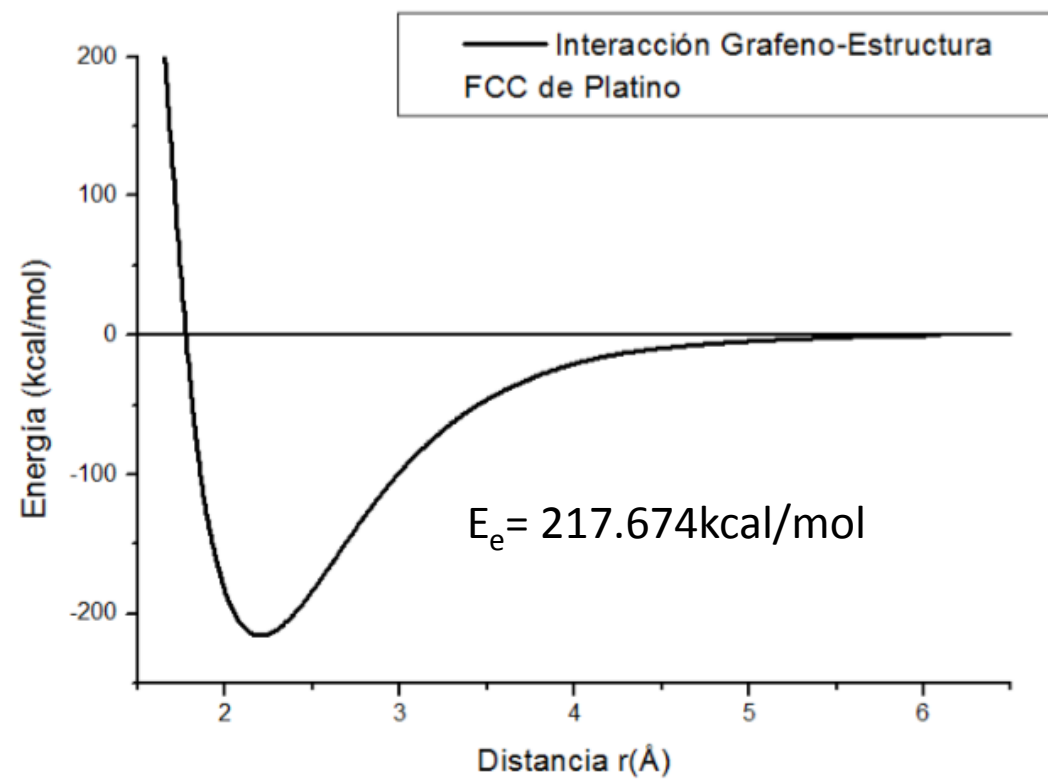


$d=2.5 \text{ \AA}$

Ouput

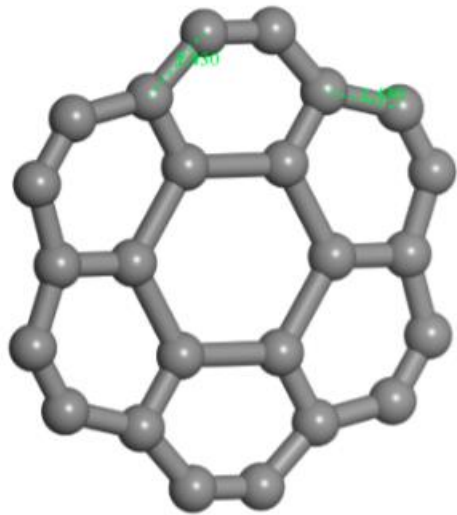


$d = 2.196 \text{ \AA}$



$E = -5814.346 \text{ kcal/mol}$

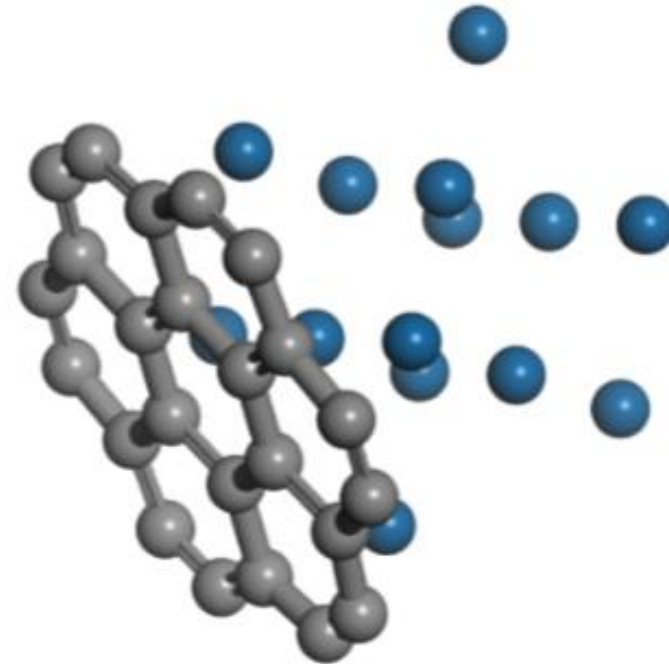
Interacción grafeno activado (Cl_2Zn)-estructura fcc platino



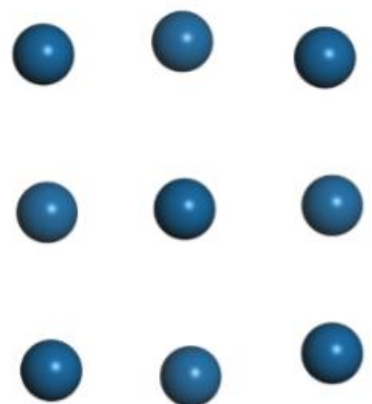
a)



b)

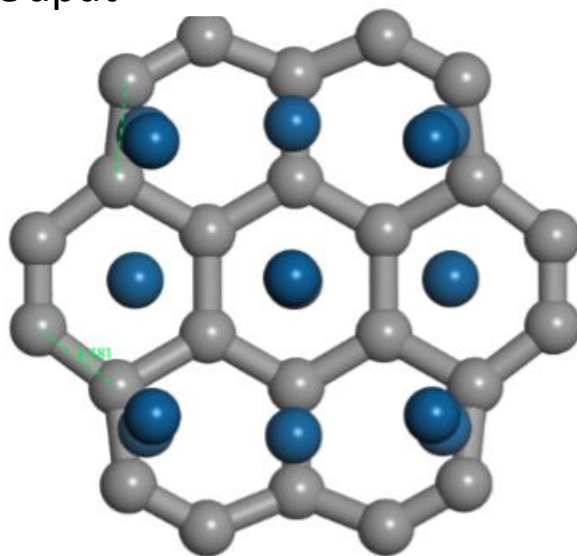


Input



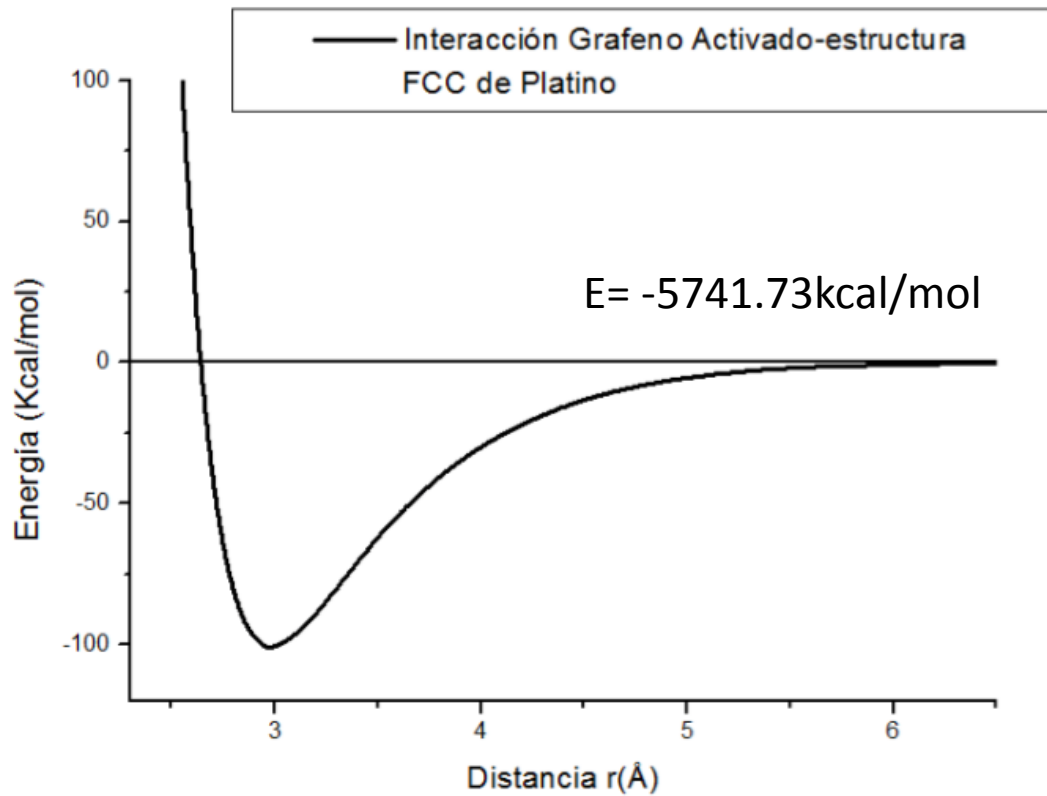
a)

Ouput



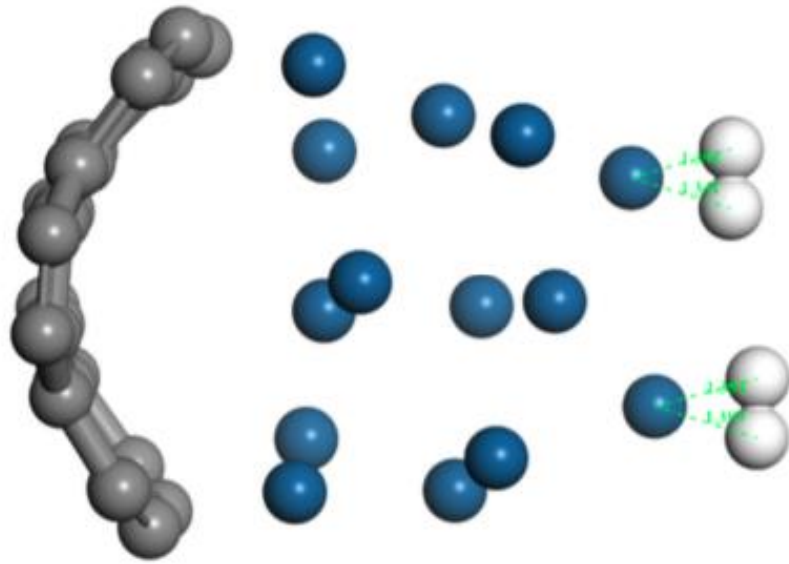
b)

$d = 2.956 \text{ \AA}$



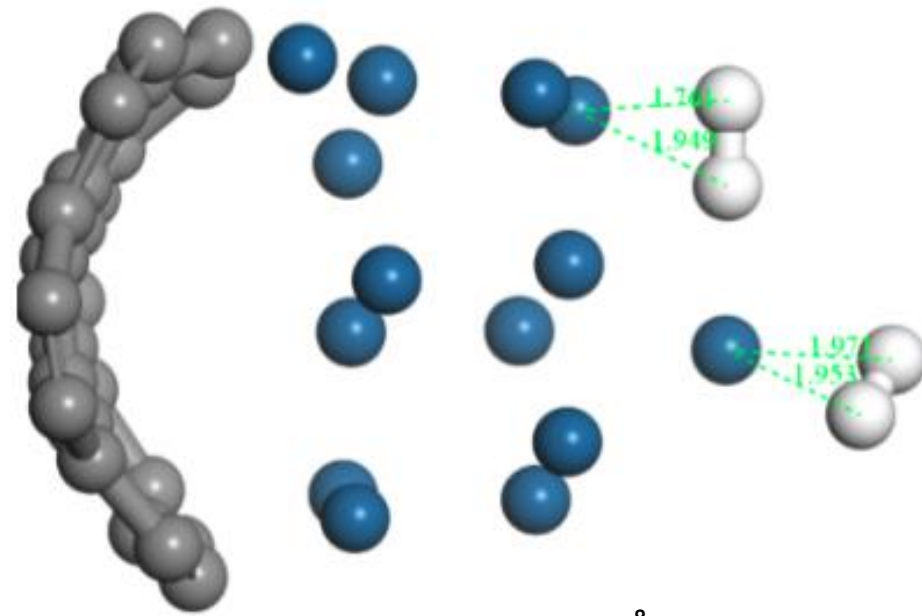
$E_e = -101.181 \text{ kcal/mol}$

Interacción grafeno-estructura fcc platino y dos moléculas de hidrógeno



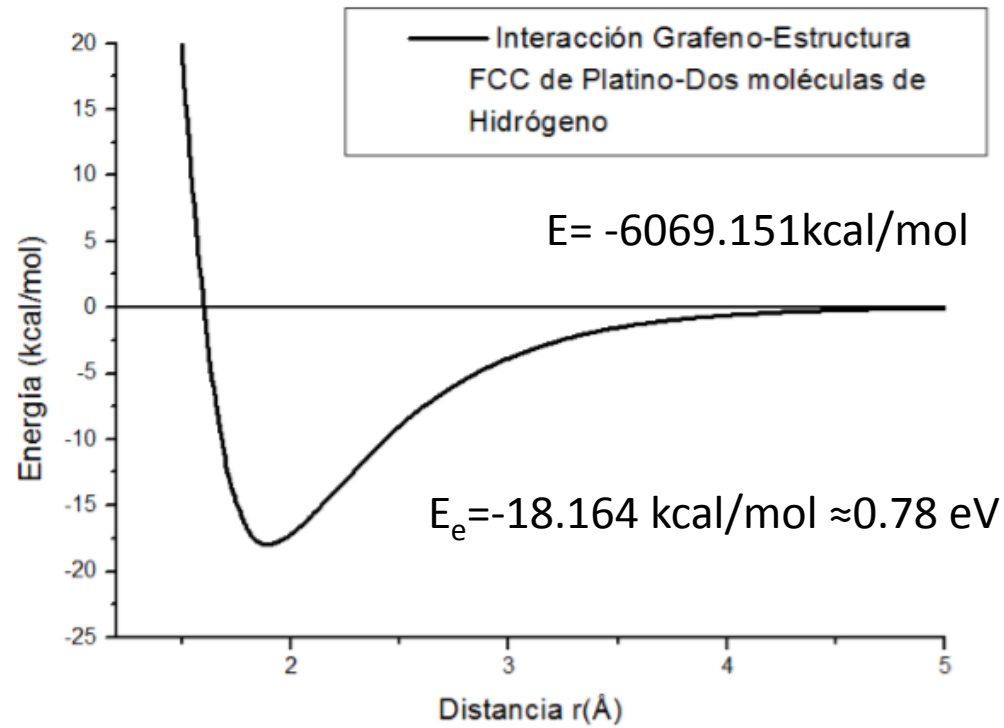
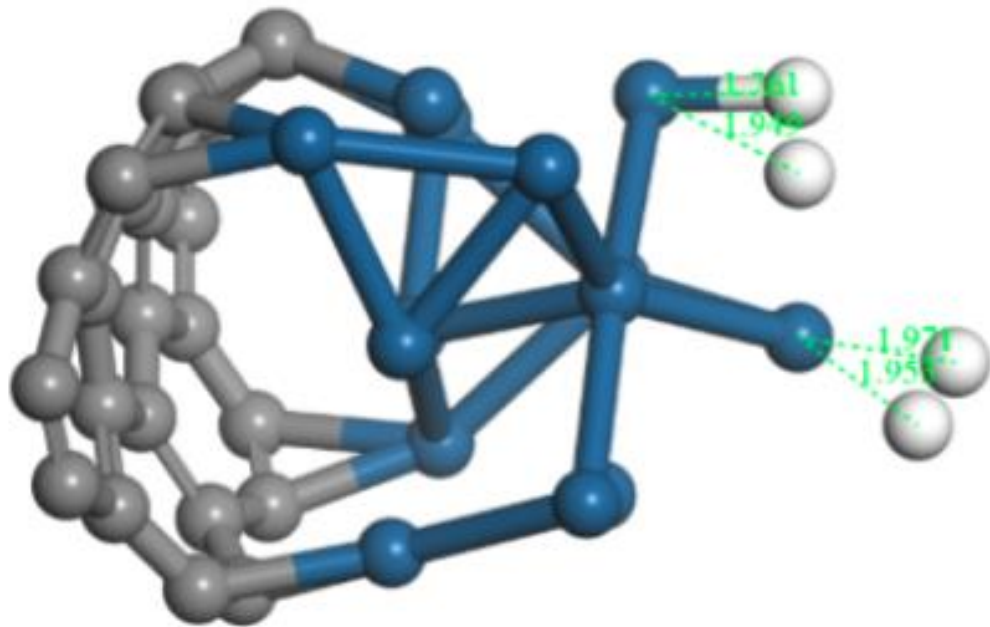
$d_{\text{Pt-H}} = 1.341 \text{ \AA}$ y 1.393 \AA

Input



$d_{\text{Pt-H}} = 1.874 \text{ \AA}$

Ouput



$E_{\text{exp}} = -18.45$ kcal/mol ≈ 0.8 eV
 mono celda de combustible de hidrogeno [15]

Conclusions

El sistema C_6Pt con una magnitud de -25.182 kcal/mol que corresponde al tamaño de pozo de energía potencial, tiende a una quimisorción.

El sistema C_6APt que tiene una magnitud de -19.511 kcal/mol de tamaño de pozo de energía potencial tiende a una fisisorción.

Los materiales carbonosos C_6 , C_6A , grafeno y grafeno activado, influyen poco sobre la reacción PtH_2 ya que las magnitudes del tamaño de pozo de energía potencial son casi iguales.

Al quitar un electrón al sistema PtH_2 produce que la magnitud del tamaño de pozo se reduzca en un 55%, así mismo la magnitud del enlace H-H aumente en un 18%, por lo que se dice que es un sistema repulsivo.

Las estructuras de grafeno y grafeno activado como soportes de estructuras fcc de platino, ambas corresponden a una quimisorción por tender a valores mayores a 50 kcal/mol [72]. Las estructuras de grafeno activado no sufren modificaciones estructurales al soportar al platino en cambio el grafeno sufre un encurvamiento cóncavo hacia el platino.

En la estructura fcc de platino soportado en grafeno se obtuvo que los valores de la simulación son cercanos a un 97.5 % a los datos experimentales, ya que DFT se obtuvo -18.164 Kcal/mol equivalente a 0.78 eV mientras que el experimental es 0.8 eV [15].

Por último se determina que el carbón activado muestra una mejor superficie para la dispersión (adsorción) del platino con menor energía de disociación, pero aún es elevada para que se realice en condiciones de temperatura ambiente. Así mismo se llega a concluir que el carbón activado como soporte de catalizadores influye en las reacciones electroquímicas que suceden en las celdas de combustible tipo PEM.

References

- [1] Appleby, A. J. (1996). *Fuel Cell Technology: Status and Future Prospects*. Energy. V. 21, n. 7/8, p. 521-653.
- [2] EG&G Services Parsons, Inc. Science Applications International Corporation. (2000). *"Fuel Cell Handbook"*. U.S. Department of Energy Office of Fossil Energy National Energy Technology Laboratory. Pág. 1.1, 1.3, 1.4, 1.9, 1.10, 1.11, 1.12, 1.13
- [3] Barreras F. y Lozano A. (2012). *Hidrogeno. Pilas de combustible tipo PEM*. Universidad de Zaragoza. Zaragoza, España.
- [4] Chu, D., Jiang, R.(1999). *Performance of polymer electrolyte membrane fuel cell PEMFC stacks - Part I. Evaluation and simulation of an air-breathing PEMFC stack*. Journal of Power Sources. V. 83, p. 128-133
- [5] Finol D., Choren E., Arteaga A., Sánchez J. y Arteaga G.(1992). *Caracterización de catalizadores de platino soportado por reducción a temperatura programada (TPR)*.Universidad del Zulia, apartado 526.Venezuela.
- [6] Stoeckli F. (1990). *"Microporous carbons and their characterization: The present state of the art"* Carbon 28,1-6.
- [7] Ian Wood, (2004). *"The elements Platinum*.Estados Unidos de America. Marshall Cavedish Corporation, (p.6).
- [8] Choren E. A, (1985). *Propiedades y actividad de catalizadores de platino soportado sobre alúminas transicionales*. Universidad de buenos aires, Argentina.
- [9] Shackelford J.F.(2005). *Introducción a la ciencia de materiales para ingenieros*. Sexta edición. Editorial Prentice Hall. Madrid, España. 872 pag.
- [10] Robert G. Parr, Weitao Yang. (1989). *"Density-Functional Theory of Atoms and Molecules"*. Published by Oxford University Press. New York. Pg.333
- [11] Atkins P.,Friedman R.(2005). *Molecular Quantum Mechanics*. Fourth Edition. Oxford University Press. New York. Unisted States. 573 pp.
- [12] Atkins P.W. (1999). *Química-física*. Edición Omega, S.A. Universidad de Barcelona. Barcelona España.1018 pp.
- [13] Rivas C.S.F., Pacheco S.J.H. (2016). *Modelación del carbón activado mediante KOH e identificación de la estructura molecular en anillos*. Enviado a publicación.
- [14] J. H. Pacheco-Sanchez, I. P. Zaragoza-Rivera and A. A. Bravo-Ortega, (2016). *Interaction of small carbon molecules and zinc dichloride DFT study*. Enviado a publicación.
- [15] J.H. Pacheco, L.A. García, I.P. Zaragoza, and A. Bravo, (2005). *Fuel Cells Project Research in develop*e. Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores Monterrey–Campus Estado de México.



ECORFAN®

© ECORFAN-Mexico, S.C.

No part of this document covered by the Federal Copyright Law may be reproduced, transmitted or used in any form or medium, whether graphic, electronic or mechanical, including but not limited to the following: Citations in articles and comments Bibliographical, compilation of radio or electronic journalistic data. For the effects of articles 13, 162,163 fraction I, 164 fraction I, 168, 169,209 fraction III and other relative of the Federal Law of Copyright. Violations: Be forced to prosecute under Mexican copyright law. The use of general descriptive names, registered names, trademarks, in this publication do not imply, uniformly in the absence of a specific statement, that such names are exempt from the relevant protector in laws and regulations of Mexico and therefore free for General use of the international scientific community. BCIERMMI is part of the media of ECORFAN-Mexico, S.C., E: 94-443.F: 008- (www.ecorfan.org/ booklets)