

Investigação das Propriedades Estruturais, Energéticas e Eletrônicas de $\text{La}_2\text{B}_2\text{O}_7$ (B= Ti, Zr, Ce) Nanoclusters Utilizando Teoria do Funcional da Densidade

Daniel da Silva de Sousa

João Paulo Almeida de Mendonça

Juarez L. F. Da Silva

Instituto de Química de São Carlos/USP

daniel.silva.sousa@usp.br

Objetivos

O presente trabalho tem como objetivo investigar as propriedades estruturais, eletrônicas e energéticas de *Nanoclusters* de $\text{La}_2\text{B}_2\text{O}_7$ (B= Ti, Zr, Ce)^[1] via cálculos de DFT (Teoria do Funcional da Densidade).

Métodos e Procedimentos

Para realização do estudo, primeiramente empregou-se o GOTNano para a geração das estruturas via potencial clássico utilizando o método de optimização global baseada em *basin-hopping Monte Carlo*.^[2] Em seguida as estruturas foram optimizadas utilizando DFT com emprego do pacote de software *FHI-aims*. Por fim, foram obtidas as propriedades fisico-químicas desejadas: Energia Total, Energia de ligação, autovalores de estado (HOMO, LUMO e gap), número de coordenação efetivo, comprimento de ligação, raio, volume e área superficial.

Resultados

Como principais resultados foram obtidas estruturas com morfologia indefinida, no entanto com um padrão de formação de camadas. As partículas mais estáveis (Figura 1) se apresentaram mais compactas com menor área superficial. Os sistemas $\text{La}_2\text{Ce}_2\text{O}_7$ se mostraram mais fracamente ligados perante aos sistemas com Ti e Zr, devido a energia de ligação mais baixa. Porém mais reativos devido ao menores valores de gap.

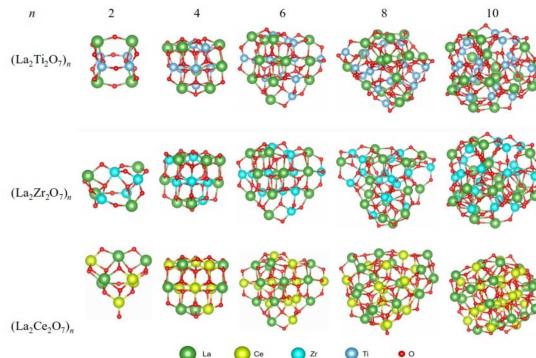


Figura 1: Estruturas de menor energia.

Conclusões

Todos os sistemas de $(\text{La}_2\text{B}_2\text{O}_7)_n$ estudados se mostraram promissores em termos estruturais, estabilidade e reatividade para uma aplicação em um sistema de catálise.

Referências Bibliográficas

- [1] XU, Junwei et al. Constructing $\text{La}_2\text{B}_2\text{O}_7$ (B= Ti, Zr, Ce) Compounds with Three Typical Crystalline Phases for the Oxidative Coupling of Methane: the Effect of Phase Structures, Superoxide Anions, and Alkalinity on the Reactivity. *ACS Catal.*, v. 9, n. 5, p. 4030-4045, 2019.
- [2] RONDINA, Gustavo G.; DA SILVA, Juarez LF. Revised Basin-hopping Monte Carlo Algorithm for Structure Optimization of Clusters and Nanoparticles. *J. Chem. Inf. Model.*, v. 53, n. 9, p. 2282-2298, 2013.