

Investigação *Ab Initio* das Propriedades Físico-Químicas e Estabilidade de Clusters de PtS₂

Leonardo S. Dalacqua¹, Naiel A. M. S. Caturello, Priscilla Felício-Sousa e Juarez L. F. Da Silva²

Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo

leonardo.dalacqua@usp.br¹, juarez_dasilva@iqsc.usp.br²

Objetivos

Dicalcogenetos de metais de transição (DMTs) tem atraído a atenção de diversos pesquisadores ao redor do mundo.¹ O estudo em nível atomístico da evolução de propriedades dos dicalcogenetos do grupo-6 já foi realizado pelo nosso grupo.^{2,3} Sabe-se que a síntese dos dicalcogenetos do grupo-10 é possível,⁴ entretanto, ainda não foi descrito na literatura como as propriedades eletrônicas, energéticas e estruturais desses sistemas evoluem em função do tamanho. Até o momento, estudamos as propriedades e estabilidade de clusters (PtS₂)_n, com $n = 1 - 6$.

Métodos e Procedimentos

O conjunto inicial de estruturas foi obtido através do algoritmo tree-growth combinado com a métrica Euclidiana modificada (TG-ESD).⁵ Nós realizamos um estudo *ab initio* aplicando a teoria do funcional da densidade (DFT), implementada no pacote FHI-aims,⁶ para investigar estas estruturas iniciais. Utilizamos também um algoritmo baseado no método de agrupamento K-mean para obter conjuntos representativos das configurações avaliadas inicialmente.⁷

Resultados

Encontramos clusters formados por anéis de 4, 5, 6, 7 e 8 membros, que se mostraram mais estáveis que os recortes estequiométricos dos politípos 1T (o mais estável no caso periódico do sistema PtS₂),¹ 2H, pirita e pentagonal. Observamos duas razões para a estabilização

das estruturas de menor energia, pGMCs: (1) formação de ligações S-S e de (2) interações Pt···Pt. Estes fatores também desempenham papel fundamental na evolução de propriedades estruturais, os resultados de ECN (número de coordenação efetivo) e d_{av} (distância média de ligação) exibem uma tendência de crescimento com o aumento do tamanho das estruturas.

Conclusões

A presença de ligações S-S nos pGMCs está relacionada com a morfologia enrugada de nossos pGMCs, que diferem dos recortes estequiométricos, enquanto que as interações Pt···Pt que estabilizam estas espécies estão principalmente relacionadas aos diversos tamanhos de anel das configurações. Este estudo foi financiado pela FAPESP, projeto nº 2018/14574 - 2.

Referências Bibliográficas

- [1] Manzeli, S. *et al.* Nat. Rev. Mater. **2017**, 2, 17033 - 17047.
- [2] Caturello, N. A. M. S. *et al.* J. Phys. Chem. C **2018**, 122, 27059–27069.
- [3] Besse, R. *et al.* J. Phys. Chem. C **2018**, 122, 20483 – 20488.
- [4] Zhou, J. *et al.* Nature **2018**, 556, 355-359.
- [5] Zibordi-Besse, L. *et al.* J. Phys. Chem. C **2018**, 122, 27702-27712.
- [6] Blum, V. *et al.* Comput. Phys. Commun. **2009**, 180, 2175 - 2196.
- [7] Jain, A. K. Pattern Recognit. Lett. **2010**, 31, 651–666.