

Estudo teórico da interação da Co²⁺-porfirina com íon borato para aplicação em célula DBFC

Cleuton de Souza Silva¹ (PG)*, Elson A. Souza² (PG), Treyce R. M. Alves¹ (IC), Ádria V. Cortez¹ (IC), Raimundo R. Passos² (PQ), Kelson M. T. Oliveira² (PQ) *cleutonsouza@ufam.edu.br

1-Instituto de Ciências exatas e Tecnologia, Universidade Federal do Amazonas, Rua Nossa Senhora do Rosário, 3863, 69100-000, Itacoatiara-Am.

2-Departamento de Química, Universidade Federal do Amazonas, Av. Gen. Rodrigo Octávio Jordão Ramos, 3000, Campus Universitário, Bairro Coroado I. CEP 69077-000. Manaus/AM.

Palavras Chave: porfirina, DBFC, DFT

Introdução

A célula combustível do tipo DBFC (direct borohydride full cell) surgiu nos últimos anos como uma das mais promissoras células a combustível, isso se deve ao fato dela utiliza como combustível diretamente o boridreto para oxidação, mostrando uma boa eficiência. Porém estudos mostram que esse tipo de célula apresenta um problema com os íons boratos que atravessam o MEA (conjunto membrana eletrodo) e atinge o cátodo o que prejudica a reação de redução oxigênio.

Cheng and Scott concluíram que o uso de FeTMPP reduz os custos em célula DBFC¹. Porém não resultados com outras porfirinas². Essa pode utilizar um mecanismo com uma molécula de O₂ com 4 elétrons ou com duas moléculas de O₂ com 8 elétrons.

Resultados e Discussão

Tais cálculos serão realizados pelo método de cálculo DFT (*Density Functional Theory*), utilizou-se o programa Gaussian 2003, foi utilizado o funcional *b3lyp*, utilizamos a base *lan12dz* para o metal e as base 6-31G⁺ para os átomos de oxigênio e 6-31G para os átomos de carbono, Boro, nitrogênio e Hidrogênio, utilizado o método para simular o solvente (água) o método PCM com temperatura de 85 °C a pressão de 1 Atm condições de funcionamento de uma célula DBFC. Assim como mostra a figura 1.

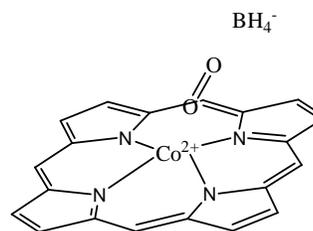


Figura 1 – Interação da Co²⁺-porfirina com O₂ e BH₄⁻ e Quatro elétrons.

Os resultados mostram que existe uma interação entre o metal de cobalto e a molécula de O₂. O valor encontrado da distância interatômica entre o O₂ e o átomo de cobalto é de 1,56 Å, e a distância entre os átomos de oxigênio 1,11 Å. Entre o BH₄⁻ e o O₂ tem o comprimento de ligação de 2,04 Å. Esses dados indicam que a molécula de O₂ fique próxima da porfirina, consequentemente o O₂ não reage com íon borato. Os dados de NBO (nature bond orbital) indicam que não nenhuma interação forte entre O₂ e o íon borato e que não nenhuma ligação entre O₂ e o íon borato.

Conclusões

Os resultados mostram que íon borato não interage com a molécula de O₂, isso se deve ao fato do porfirina interage fortemente com O₂. O que pode indicar que a Co²⁺-porfirina pode ser usada em células do tipo DBFC.

Agradecimentos

Fapeam, CNPq e CAPES

¹ Cheng, H.; Scott, K., *J. Electroanal. Chem.* **2006**, 596, 117.

² Kang, C.; Xie, Y.; Anson, F. C., *J. Electroanal. Chem.* **1996**, 413, 165.