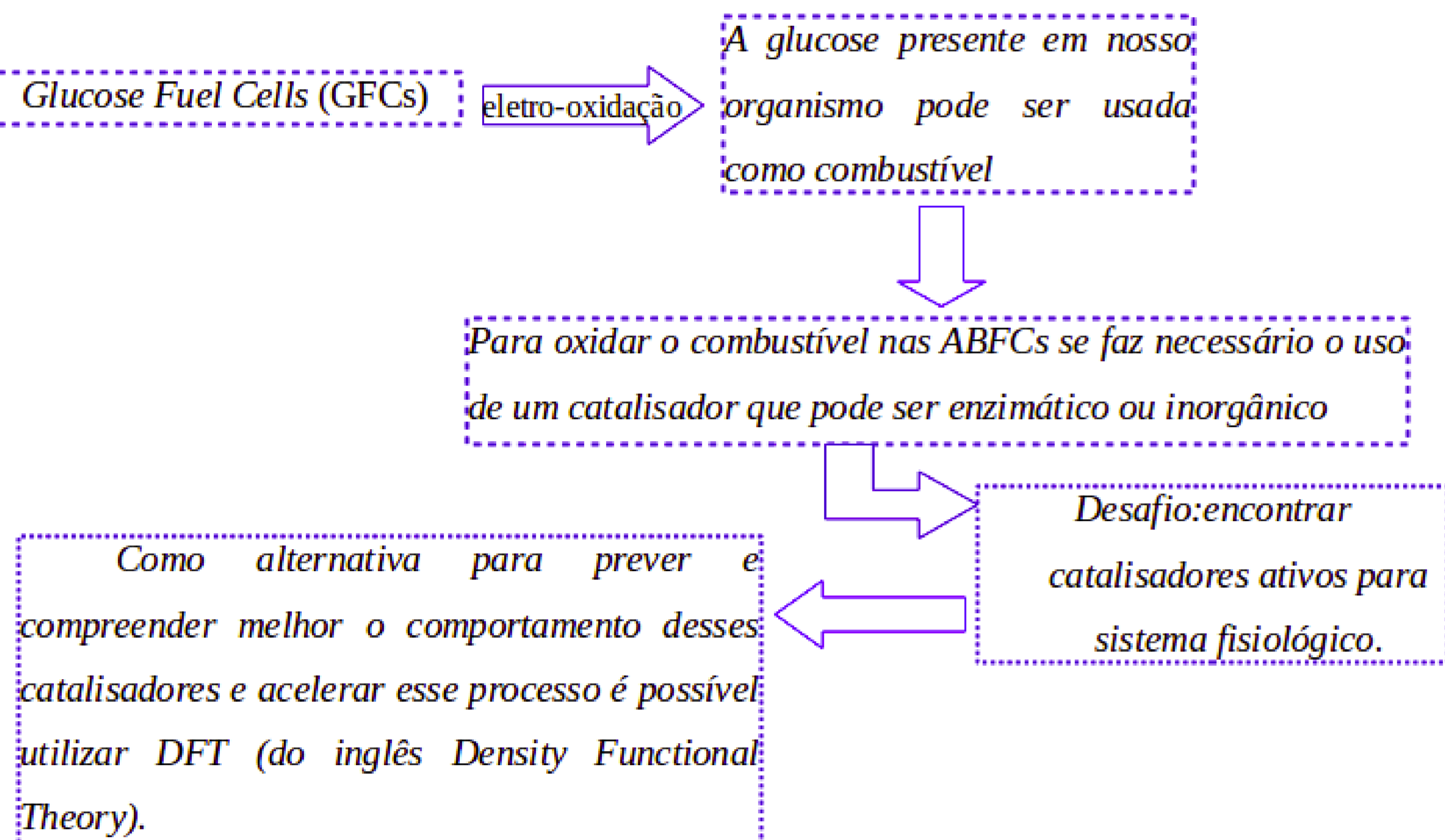


## UM ESTUDO DE DFT EM SUPERFÍCIES DE Pt DECORADAS COM AD-ÁTOMOS NA PRESENÇA DE GLUCOSE

FONSECA, Sarah<sup>1</sup> (sarah\_fsilva@hotmail.com) Bolsista PIBIT UFGD ; MARTINS, Cauê Alves<sup>2</sup> (cauealvesmartins@gmail.com) UFGD; PINTO, Leandro Moreira de Campos<sup>3</sup> (lmpcinto@gmail.com) UFMSO

### INTRODUÇÃO



### METODOLOGIA



### RESULTADOS E DISCUSSÃO

#### Otimização do bulk

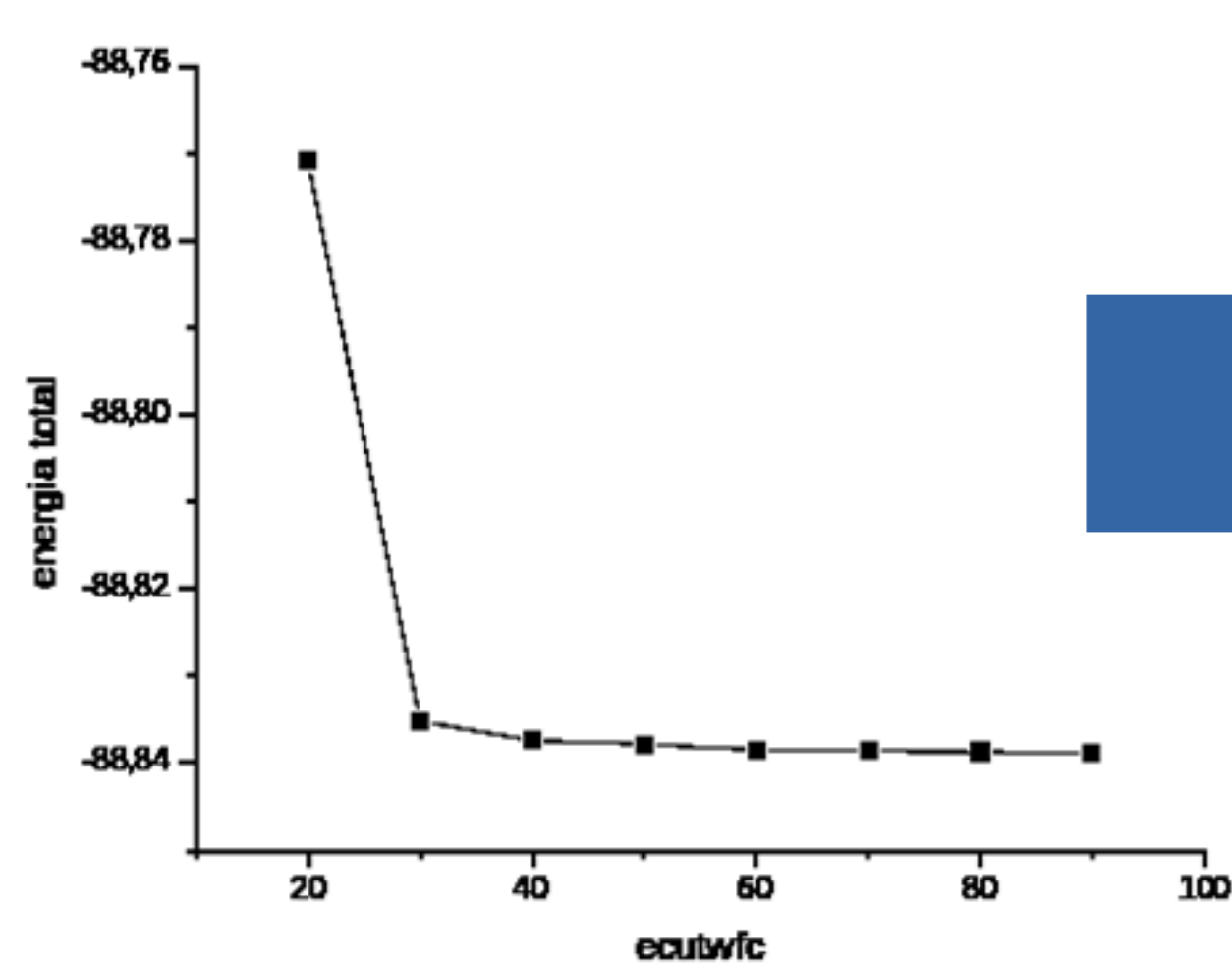


Figura 1. Variação da energia total em função da variação do parâmetro de rede ecutwfc.

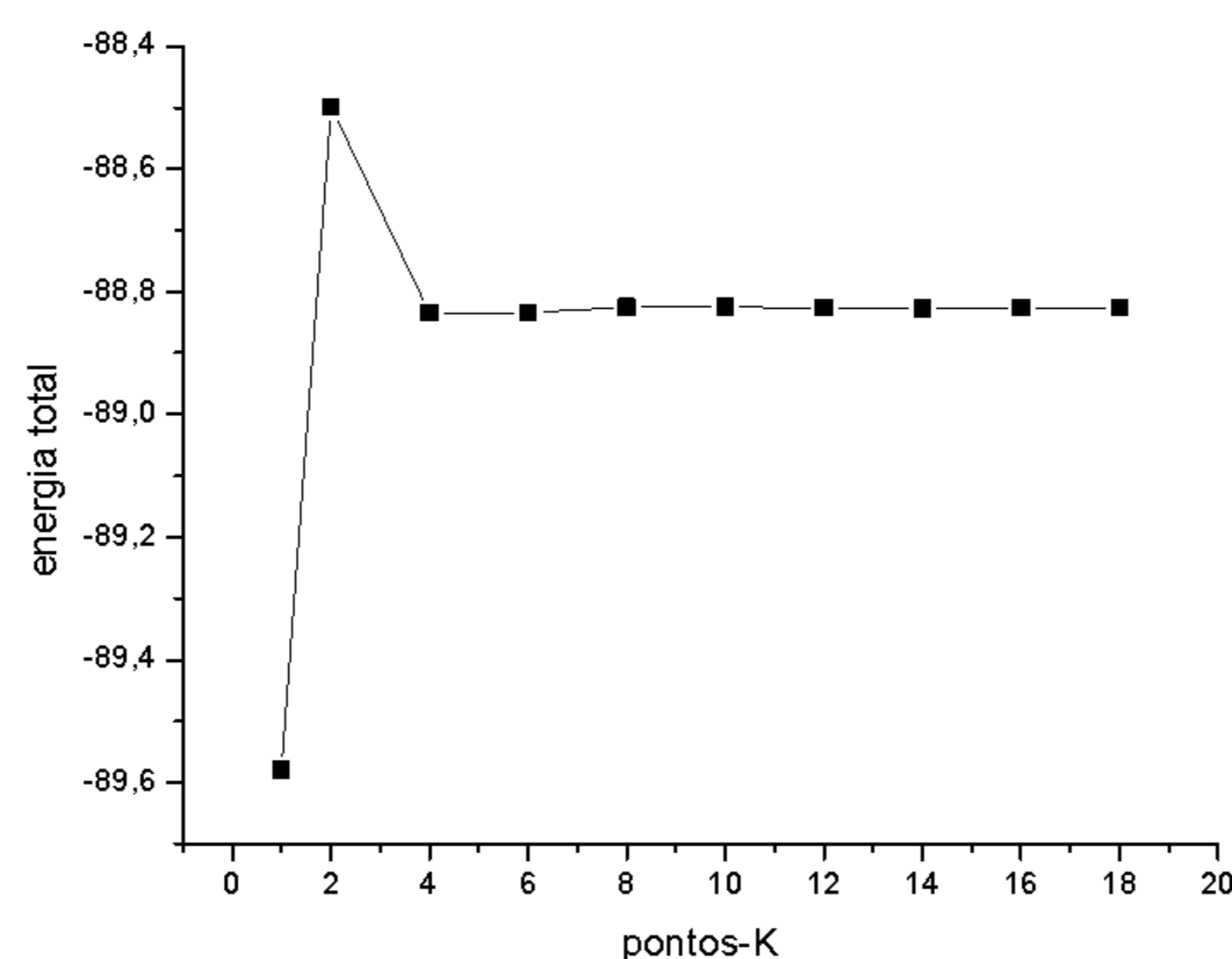


Figura 2. Variação da energia total em função dos valores de pontos k.

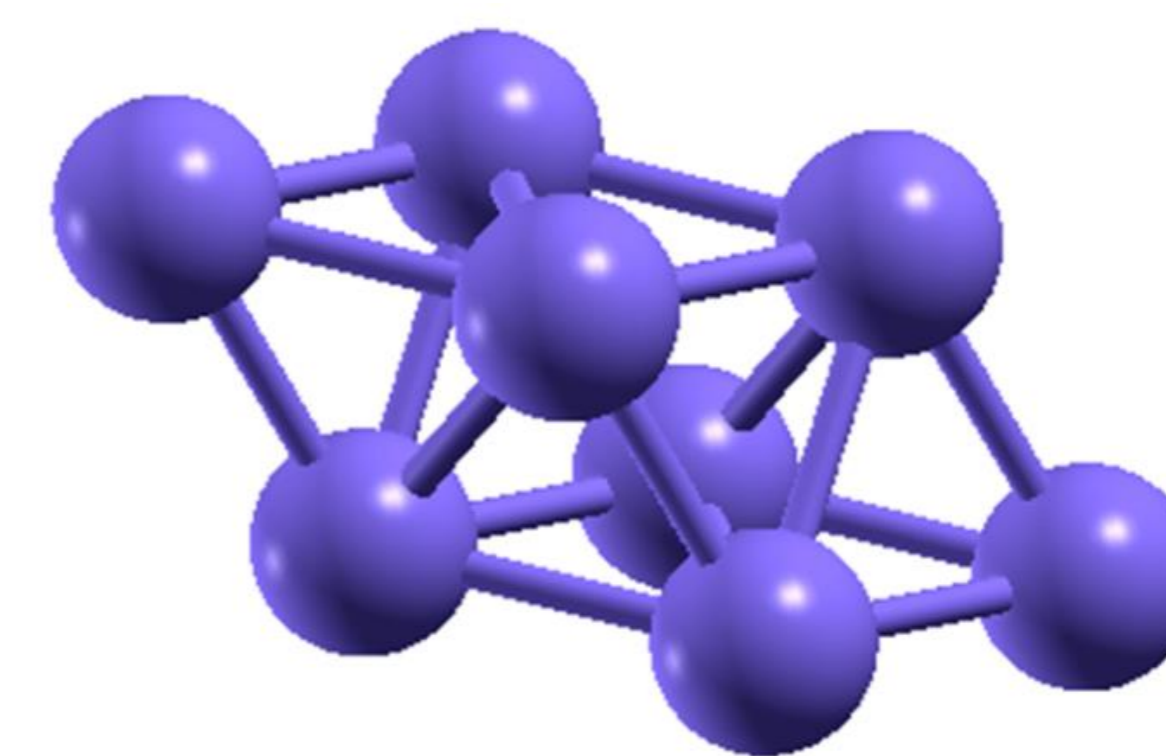


Figura 3. bulk de platina otimizado por cálculos de DFT visto utilizando o pacote computacional xcrsden.

#### Otimização da superfície

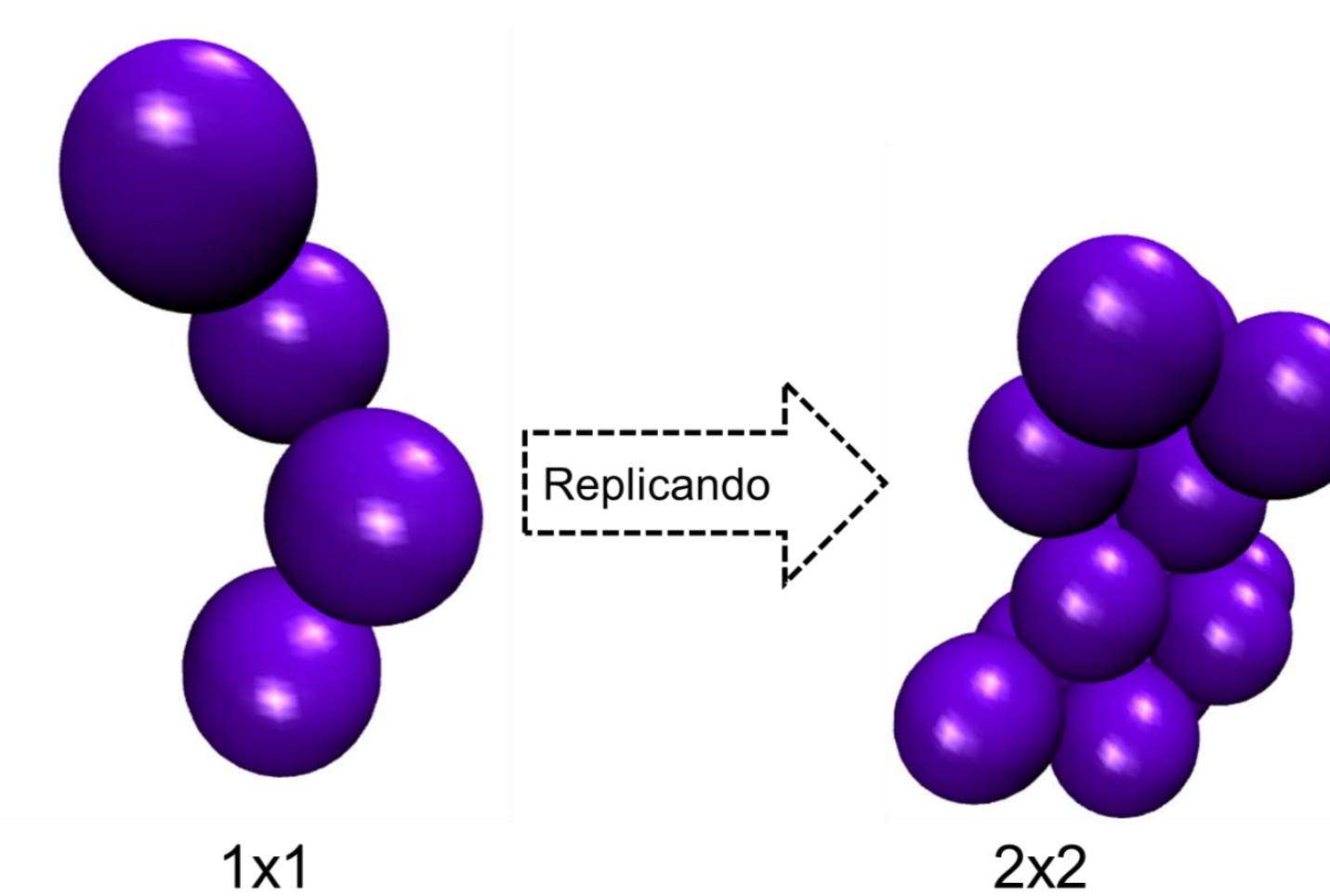


Figura 4. Replicação da célula unitária 1x1 inicialmente com 4 átomos para a célula 2x2 com 16 átomos.

#### Otimização da molécula

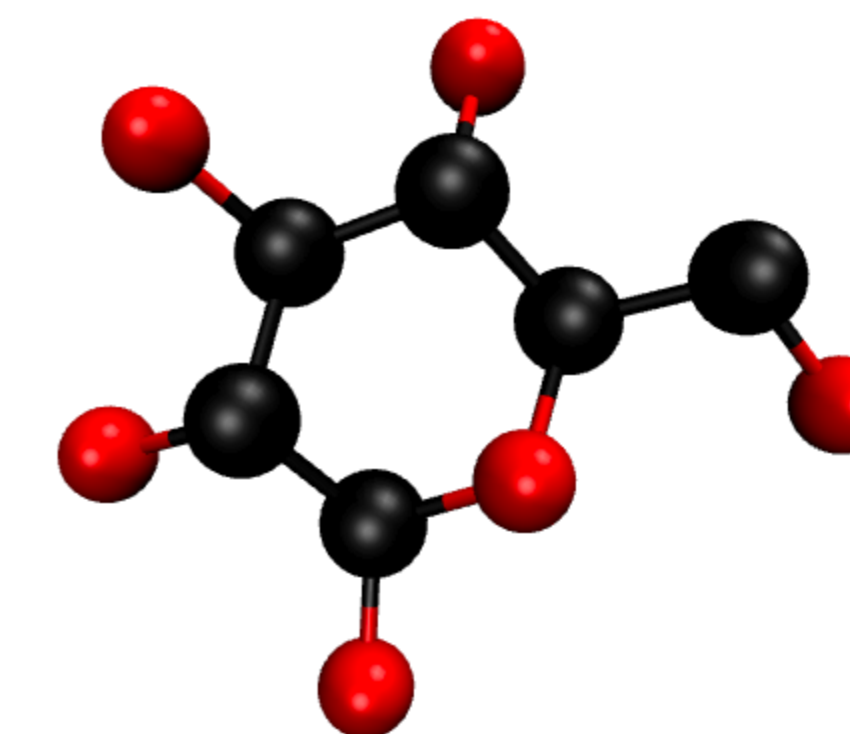
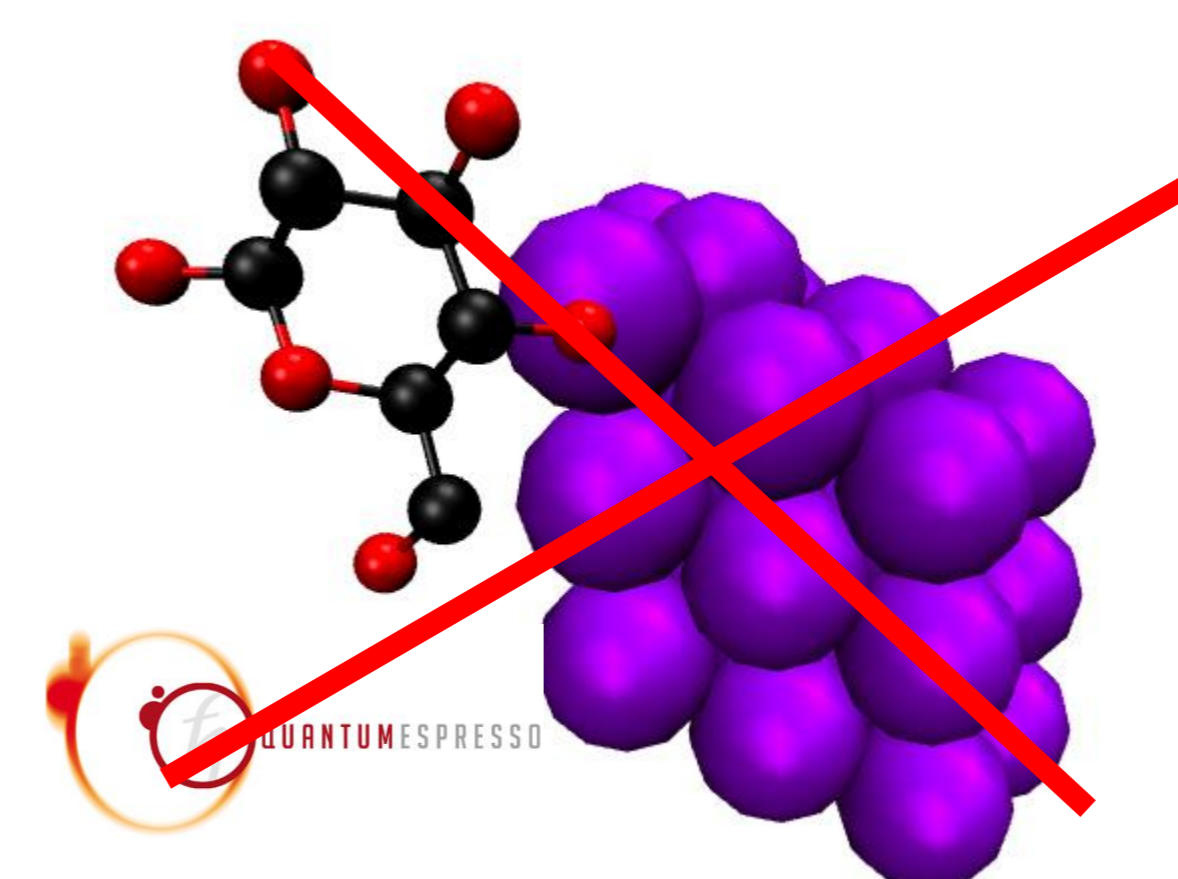


Figura 5. Molécula vista utilizando o pacote computacional VMD.

### CONCLUSÃO



Devido ao número de átomos no sistema o cálculo não atinge a convergência



Realização:

**UFGD**  
Universidade Federal  
da Grande Dourados

**UEMS**  
Universidade Estadual  
de Mato Grosso do Sul

Parceiros:

**CAPES**

**CNPq**  
Conselho Nacional de Desenvolvimento  
Científico e Tecnológico