

MIRASOL; Janlucca Bruneri¹, FIRMINO; Rafael Claro², GRAVES; David Alexandro³, GONÇALVES; Emerson Sarmiento⁴, ALMEIDA; Dalva Alves de Lima⁵, UENO; Leonardo Tsuyoshi⁶

RESUMO

Desenvolvimento de materiais promissores para eletrodos de célula de Deionização capacitiva. **Introdução** A falta de água potável é eminente no planeta Terra, a costa oeste dos Estados Unidos, a Índia, a China e alguns países da África já vivenciam a escassez de água. Cerca de 4 bilhões de pessoas enfrentam dificuldade com a falta deste recurso, e os números tendem a aumentar, tendo em vista o crescimento populacional. Com isso, há grande interesse no estudo das células de deionização capacitiva, que consiste basicamente na presença de dois eletrodos porosos e uma água de alimentação que flui entre ou através os eletrodos. Os eletrodos são carregados, assim os sais presentes na água de alimentação são atraídos para os eletrodos carregados, removendo, portando, os sais da água de alimentação (processo conhecido como eletrossorção) e transformando-a em água dessalinizada. **Objetivo** A escolha do material do eletrodo influencia diretamente na performance dos dispositivos de deionização capacitiva, sendo a polianilina o polímero selecionado. A Polianilina (PANI) é reconhecida por sua porosidade e boa condutividade, além facilidade de síntese, elevada estabilidade ambiental. Comparado com outros eletrodos de materiais provenientes do carbono, a PANI teve um desempenho muito melhor em termos de dessalinização e eletrossorção. Nesse contexto, a fim de dar continuidade a um trabalho anterior, realizado pela deposição da polianilina em fibra de carbono, este tem por objetivo, por meio de métodos da química computacional, verificar a viabilidade e efetividade desta mesma deposição, porém realizada em grafeno.

Métodos A análise teórica fora feita por meio da otimização de fragmentos das estruturas moleculares da polianilina e do grafeno, visto que se tratam de estruturas contínuas. Os cálculos foram realizados utilizando o cluster de computadores localizado no Laboratório ETER (Estudos Teóricos de Estrutura Eletrônica e Reatividade) do Departamento de Química do ITA, a partir dos softwares: Avogadro, para visualização, Gaussian09 para otimização, análise de energia e estabilidade da interação, bem como Orca e Vesta para estudo do caráter radicalar. **Resultados** Tendo em vista o objetivo do trabalho, inicialmente fora necessário caracterizar a estrutura do fragmento das moléculas em análise. Para o grafeno, utilizou-se o ovaleno, um composto plano de dez anéis benzênicos, já para a polianilina, optou-se por um conjunto de três anéis benzênicos terminados com aminas primárias nas extremidades. Entretanto, a geometria da estrutura é imprescindível para o cálculo desta, sendo que, em uma primeira tentativa, definiu-se uma estrutura plana, o que resultou em um baixo gap HOMO-LUMO e alto índice de NFOD, inferindo à molécula, um caráter radicalar acentuado. Dessa forma, tanto a estrutura otimizada não é estável como a interação desta com o ovaleno não fora observada, visto que o cálculo de adsorção não convergiu. **Conclusão** Portanto, em um estudo preliminar, infere-se que a estrutura inicialmente pretendida para a PANI não é a ideal, uma vez que a substância apresenta elevada estabilidade, comprovada experimentalmente. Assim, observa-se a necessidade de novos ensaios relacionados à geometria da polianilina, desta vez levando em conta torções angulares e uma geometria tridimensional.

PALAVRAS-CHAVE: Eletrodo; Grafeno; PANI; Polímero; Quântica

¹ Universidade do Vale do Paraíba, janbruneri@hotmail.com

² Universidade do Vale do Paraíba, rafa.firmino@hotmail.com

³ Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, dvdagraves@gmail.com

⁴ Instituto Tecnológico de Aeronáutica, emerson0goncalves@gmail.com

⁵ Instituto Tecnológico de Aeronáutica, dalva.dri@gmail.com

⁶ Instituto Tecnológico de Aeronáutica, leonardo_ueno@hotmail.com

¹ Universidade do Vale do Paraíba, janbruneri@hotmail.com
² Universidade do Vale do Paraíba, rafa.firmino@hotmail.com
³ Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, dvdagraves@gmail.com
⁴ Instituto Tecnológico de Aeronáutica, emerson0goncalves@gmail.com
⁵ Instituto Tecnológico de Aeronáutica, dalva.dri@gmail.com
⁶ Instituto Tecnológico de Aeronáutica, leonardo_ueno@hotmail.com