



**Congreso Argentino de Fisicoquímica y
Química Inorgánica - La Plata 2021**



XXII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA LA PLATA 2021

ADSORCIÓN DE DIFERENTES ESPECIES DE DOPAMINA SOBRE ÓXIDO DE GRAFENO

Domancich Nicolás¹, Meier Lorena¹, Rossi F. Ana², Fuente Silvia¹ y Castellani Norberto¹

¹Instituto de Física del Sur, Av. Alem 1253, (8000) Bahía Blanca

²Instituto de Química del Sur, Av. Alem 1253, (8000) Bahía Blanca

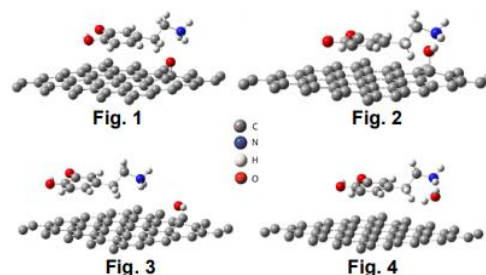
syn811@hotmail.com

Introducción: Uno de los métodos más utilizados para producir láminas de grafeno se basa en la reducción química de óxido de grafeno (GO), en cuya superficie predominan grupos epoxi e hidroxilo¹. Entre los reductores utilizados, se demostró que la dopamina actúa menos severamente que otros como la hidracina o NaBH₄². En el presente trabajo se estudia la adsorción de diferentes formas de la dopamina (DA) sobre la superficie de GO.

Resultados: Los presentes cálculos se basan en la teoría DFT y fueron implementados con el código VASP. La energía de adsorción fue calculada como: $E_{ads} = E_{ato/sto} - E_{sto} - E_{ato}$, donde $E_{ato/sto}$, E_{sto} y E_{ato} son las energías totales para el sistema adsorbato/substrato, el substrato y el adsorbato en fase gas, respectivamente. Las cargas atómicas se calcularon según el método DDEC06. Se consideró la adsorción disociativa y no disociativa de las especies neutra (NDA), zwitteriónica (ZDA), protonada (PDA) y desprotonada (DPDA) de DA sobre un substrato de GO con un epoxi (GO1) o un hidroxilo (G(OH)1). En las fig. 1-4 se observan las geometrías más favorables de ZDA aproximándose a la superficie por el grupo amino. Los valores de E_{ads} para las cuatro especies adsorbidas, con una aproximación similar entre adsorbato y substrato, están resumidos en la Tabla 1.

Tabla 1. E_{ads} en eV para los casos de adsorción asociativa (A) y disociativa (D)

Sitio/Tipo de adsorción	Especie			
	DPDA	NDA	ZDA	PDA
GO1/A (F.1)	-0.343	-0.418	-0.671	-0.661
GO1/D (F.2)	1.121	1.072	-2.791	-3.730
G(OH)1/A (F.3)	-0.273	-0.464	-0.816	-0.539
G(OH)1/D (F.4)	-0.298	0.258	-3.584	-4.564



Conclusiones: Se observan adsorciones tanto asociativas como disociativas para las cuatro especies. La adsorción disociativa sobre GO1 implica la formación de un grupo hidroxilo, mientras que aquella sobre G(OH)1, la eliminación del grupo hidroxilo. Las especies ZDA y PDA, tanto en forma asociativa como disociativa, poseen más actividad adsorptiva que DPDA y NDA. Esta actividad se puede relacionar con una mayor transferencia de carga electrónica hacia el substrato.

Referencias:

- 1) S. Eigler, A. Hirsch, *Angew. Chem. Int.*, 2014, 53, 2.
- 2) H.J. Shin, K.K. Kim, *Adv. Funct. Mater.*, 2009, 19, 19.

Dezalay	Jordan	239
Dganit	Danino	10
Di Donato	Andrés	142
Di Salvo	Florencia	77, 90, 602
Di Tocco	Aylén	159, 376
Diaz	Carolina	33, 343
Diaz	Florencia	362
Diaz	Jorge	66
Diaz	Liliana	365, 366, 412
Diaz	Ma. Soledad	422
Diaz	Mario	222, 469
Diaz	Narciso	385
Diaz	Sonia	29, 55
Diaz Coello	Sergio	377
Diaz Compañy	Andrés	522
Diaz Durán	Ana	173
Diaz Vázquez	Daniela	201
Dib	Nahir	293
Diez	Alejandra	308
Diguilio	Eliana	335
Dinamarca	Angela	627
Dionisi	Carla	378
Disalvo	Edgardo	28, 49
Dittler	María	149
Dittrich	Thoms	136
Diz	Virginia	54, 114, 158, 289
Doctorovich	Fabio	24, 57, 69, 77
Dodero	Gabriela	504
Domancich	Nicolás	470
Dominguez	Cecilia	379
Domínguez	Sofía	75
Dominguez-Alfaro	Antonio	599
Donadelli	Jorge	160
Dong.-Hui	Chen	543
dos Santos Ferreira	Cristina	243
Drajlin	Sebastián	128
Duarte	Darío	498
Duchowicz	Pablo	450, 471, 517, 527, 529, 530
Duque	Melina	161
Durán Alvarez	Carlos	480
Durantini	Andrés	265, 544, 631
Durantini	Edgardo	124, 136, 244, 309, 572, 631
Durantini	Javier	136, 244, 309, 572, 624
Duré	Andrea	30

Libro de Actas : XXII Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica : XXII CAFQI / Robert Marc... [et al.] ; compilado por María Paula Badenes... [et al.]. - 1a ed. - La Plata : Universidad Nacional de La Plata. Facultad de Ingeniería, 2021.

Libro digital, PDF

Archivo Digital: descarga y online

ISBN 978-950-34-1999-1

1. Química Inorgánica. I. Marc, Robert. II. Badenes, María Paula, comp.

CDD 546.071