



Contribution ID : 89

Type : posters

## ESTUDIO TEÓRICO DE ADSORCIÓN Y OXIDACION DE INDOL SOBRE GRAFENO

*Saturday, 18 December 2021 08:45 (15)*

La detección de indol resulta de interés clínico y ambiental [1-2]. Se emplean (bio)sensores de base carbonosa para su detección. Por eso es necesario que el indol se adsorba sobre la superficie del electrodo y se oxide. Mediante cálculo teórico empleando Quantum ESPRESSO con pseudopotenciales UltraSoft e interacciones de van der Waals, se estudió: adsorción y oxidación de indol (ROI) sobre grafeno. La celda unidad es hexagonal de  $12.33 \text{ \AA} \times 12.33 \text{ \AA} \times 15 \text{ \AA}$  con condiciones periódicas de contorno. La lámina de grafeno consta de 50 átomos de C.

El indol se adsorbe en posición paralela a la superficie con una energía de adsorción preferencial de  $-0.97 \text{ eV}$ . Se analizó el cubrimiento de la superficie en función de la concentración en solución ( $0.1$  a  $100 \mu\text{M}$ ) mediante una isoterma de adsorción de Langmuir, encontrando cubrimientos mayores al  $0.90$ .

Se analizaron diferentes mecanismos para la ROI, se optimizaron los caminos de mínima energía y se determinaron las energías de activación. La primera etapa presentó barreras de  $1.446 \text{ eV}$  y  $0.00122 \text{ eV}$  sin y sobre grafeno, mientras la segunda etapa resultó espontánea. Finalmente, en la aproximación de campo medio se simuló el voltograma correspondiente al pico de oxidación.

**Primary author(s) :** Ms VILLCA CENTELLAS, Danna (Universidad Mayor de San Andres); Dr VELASCO, Jorge (Universidad Mayor de San Andres); Dr ROJAS, Mariana (Universidad Nacional de Cordoba)

**Presenter(s) :** Ms VILLCA CENTELLAS, Danna (Universidad Mayor de San Andres)

**Session Classification :** Posters

**Track Classification :** Materials Science and Nanotechnology