

XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

UN ESTUDIO DFT SOBRE LA ADSORCIÓN Y DISOCIACIÓN DE N-NITROSODIMETILAMINA SOBRE UN NANOCLUSTER DE Ni₈

Moreno Yalet Nahuel, Ranea Víctor y Dammig Quiña Pablo

¹ Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

nahuel.morenoyalet@ing.unlp.edu.ar

Introducción. La N-nitrosodimetilamina (NDMA, ONN(CH₃)₂) es un carcinógeno muy potente investigado por las autoridades sanitarias de algunos países. Dicho compuesto aparece principalmente como subproducto en el tratamiento de aguas residuales [1]. En este trabajo se aplica la teoría funcional de la densidad (DFT) para estudiar la adsorción molecular y disociativa de NDMA en un nanocluster de Ni₈.

Resultados. Se realizaron cálculos de energía total utilizando la teoría del funcional de la densidad (DFT) con el funcional Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE). Los resultados revelan que la adsorción molecular de NDMA sobre Ni₈ es dos veces más fuerte que la adsorción molecular de NDMA sobre una superficie de Ni{111} (-1.625 eV vs -0.8 eV) [2][3]. A su vez, la adsorción disociativa de NDMA es 1 eV más estable (-2.653 eV) que la adsorción molecular sobre Ni₈. Para disociar la molécula de NDMA en fragmentos O y NN(CH₃)₂, se necesita una energía de activación de 0,954 y 0,810 eV a partir de las dos configuraciones moleculares más estables encontradas. Sin embargo, para disociar la molécula de NDMA en fragmentos ON y N(CH₃)₂, se necesita una energía de activación menor, 0,654 eV. Con la inclusión de las fuerzas de dispersión de London (funcional optB88-dW), las interacciones moleculares son un poco más fuertes (-1.821 eV y -2.686 eV para la adsorción molecular y disociativa respectivamente). Sin embargo, las energías de activación son ligeramente menores. También aplicando el funcional SCAN Meta-GGA se obtuvieron energías de adsorción -2.092 eV y -2.799 eV para la adsorción molecular y disociativa respectivamente. La inclusión del modelo de "implicit solvation" muestra una interacción más débil de NDMA con el nanocluster de Ni₈. La adsorción disociativa es más estable que la adsorción molecular, pero la diferencia de energía es un poco menor, 0,850 eV.[3]

Conclusiones. Los resultados actuales muestran que los nanoclusters de Ni₈ son catalizadores prometedores para la eliminación de NDMA del agua. Cabe señalar que el nanocluster Ni₈ muestra un momento magnético. Dicha característica podría usarse para separar y eliminar el nanocluster de Ni₈ del agua con la molécula de NDMA adsorbida en él en forma molecular o disociativa.

Referencias

- 1) Elif Pehlivanoglu-Mantas. *Water Research*, **2006**, 40(2):341–347,.
- 2) Ranea V. A., *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*, **2014**, 392, 157-163.
- 3) Moreno Yalet N., *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, **2023**, 108578