

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### CONTROL DE LAS PROPIEDADES OPTOELECTRÓNICAS DE GRAFENO E HÍBRIDOS PARA BIO-APLICACIONES

Ventre Josefina, Bellino Martin y Ibañez Francisco.

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

[josefina.ventre@ing.unlp.edu.ar](mailto:josefina.ventre@ing.unlp.edu.ar)

#### Introducción

Durante los últimos años, la investigación sobre nanomateriales híbridos basados en grafeno se intensificó debido a que presentan propiedades ópticas, electrónicas y catalíticas sobresalientes. Se ha reportado que el ensamble de materiales basados en Au y C mejora sus propiedades para aplicaciones relacionadas con la optoelectrónica, los bio-sensores o el sensado de moléculas como, por ej., glucosa, entre otras [1–2].

#### Resultados y conclusiones

La mezcla de  $\text{HAuCl}_4$  con puntos cuánticos de grafeno (GQDs) a temperatura ambiente y pH 6-7 conlleva a la formación espontánea de Nanohíbridos (NHs) de tipo core-shell. El producto obtenido fue caracterizado por microscopía de transmisión de alta resolución (HRTEM) donde se observaron nanopartículas de Au recubiertas por un cascarón de grafeno de 1 nm (3-4 capas), con un tamaño medio de 8.6 nm, monodispersas y sin aglomeraciones. La composición química del núcleo y la coraza fue determinada a través de espectroscopía de pérdida de energía de electrones (EELS). También se realizaron caracterizaciones de sus propiedades ópticas por espectroscopía UV-vis, donde se observó la presencia de la resonancia plasmónica superficial típica de nanopartículas de Au alrededor de 520 nm y las transiciones características  $\pi$ - $\pi^*$  de los GQDs. Para confirmar el rol de los GQDs en la síntesis, se bloquearon los grupos funcionales carbonilos y epóxidos bajando el pH entre 1 y 3, con lo cual no se observó la formación de NHs. Además, se estudiaron diferentes condiciones experimentales modificando temperatura, tiempo de reacción y relación entre concentraciones de  $\text{Au}^{+3}$  y GQDs para la obtención de NHs Au/grafeno, estables, de diferentes tamaños y geometrías. También se realizaron experimentos electroquímicos con moléculas patrón a fin determinar el rol del grafeno situado en la coraza de las NPs como agente protector y/o catalítico. Para un mejor estudio de las propiedades superficiales del sistema, se comenzó con el estudio de un modelo simple de estos NHs: una superficie de Au(111) con grafeno pristino y monocapa superpuesto, formando una superred  $(3 \times 3)$ -R30°, es decir, el grafeno rotado 30° respecto a la superficie de Au (111) con una periodicidad de  $(3 \times 3)$ , geometría que ha sido demostrada en un trabajo previo, tener el menor parámetro de discrepancia de la celda cristalina.[3] Una vez optimizada esta estructura, se procedió a adsorber una molécula de interés y realizar varios tipos de cálculos electrónicos como: densidad de estados, mapas de densidad de carga y función trabajo, así como también las energías de adsorción.

#### Referencias

- 1) Ruiyi et al. *Sens. Actuators B Chem.* **2015**, 208, 421–428.
- 2) Luo et al. *Chem. Phys. Lett.* **2015**, 641, 29–32.
- 3) Yortanlı et al. *J. Chem. Phys.* **2019**, 151(21), 214701