



Estudio teórico de adsorción de colorantes contaminantes por grafeno

Sara Paola Castillo Navarro¹, Gregorio Guzmán Ramírez¹, Iran F. Hernández Ahuactzi¹

¹ Centro Universitario de Tonalá, Universidad de Guadalajara, Av. Nuevo Periférico 555, Ejido San José Tatepozco, Tonalá 48525, Jalisco, México.

I.Fernando.Hernández@cutonala.udg.mx

La búsqueda de la disminución de colorantes contaminantes en los cuerpos de agua del planeta ha provocado el interés de muchos grupos de investigación en lograr el diseño y preparación de nuevos materiales que sean capaces de llevar a cabo el proceso de adsorción, degradación y desorción de los productos resultantes en condiciones suaves de presión y temperatura.¹⁻³

Debido a lo anterior en el grupo de investigación nos hemos interesado en realizar el estudio teórico de la adsorción de colorantes del tipo catiónico (azul de metileno, rodamina B y rojo neutral) y aniónico (anaranjado de metilo y azul ácido de cromo K) sobre un fragmento de grafeno (PAH). En el presente trabajo se discutirán los resultados obtenidos de la capacidad del PAH para almacenar las moléculas de colorantes, la energía de adsorción [$E_{\text{ads}} = E_{(\text{PAH-Colorante})} - (E_{\text{PAH}} + E_{\text{colorante}})$]⁴ y el tipo de interacciones involucradas. Todas las especies fueron optimizadas utilizando el funcional de Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE0) en combinación con el conjunto base 6-31G(d) utilizando el programa Gaussian 09.

1. Chen Q., He Q., Lv M., Xu Y., Yang H., Liu X., Wei F., *Appl. Surf. Sci.*, **2015**, 327, 77.
2. Hasan Z., Jhung S. H., *J. Hazard Mater.*, **2015**, 283, 329.
3. Ahmed I., Jhung S. H., *J. Hazard Mater.*, **2015**, 283, 544.
4. Nojini Z. B., Samiee S., *J. Phys. Chem. C*. **2011**, 115, 12054.