

Jorge Eduardo Sánchez  
Mella

*Universidad Tecnológica  
Metropolitana*

María Alejandra

Tamayo Medina

*Universidad de Chile*

Humberto Cristian

Palza Cordero

*Universidad de Chile*

## **Diseño de aerogeles de grafeno producidos por síntesis hidrotérmica mediante la teoría DLVO**

Los aerogeles de grafeno han atraído enorme interés debido a sus propiedades sobresalientes promovidas por la organización de las nanoláminas tridimensionalmente. Comúnmente se sintetizan por el método sol-gel en condiciones hidrotérmicas, comenzando con la síntesis del precursor óxido de grafito (OGr), utilizando ácidos y oxidantes fuertes, para introducir grupos funcionales oxigenados en los bordes y el plano basal del grafeno apilado. Luego, el OGr es exfoliado en solución acuosa para formar una dispersión de nanoláminas de grafeno oxidado (GO), esto gracias a la polarización negativa de los grupos funcionales causando su mutua repulsión. Esta se introduce en un reactor hidrotérmico por un cierto tiempo para conseguir un hidrogel, el cual es congelado y liofilizado para obtener el aerogel. Se ha teorizado que la repulsión electrostática inicial del GO disminuye producto de la remoción de los grupos funcionales y restitución parcial de la estructura conjugada durante la reducción hidrotérmica (rGO). Estos procesos también favorecen su apilamiento por interacciones  $\pi$ - $\pi$  o hidrofóbicas, lo que induciría su entrecruzamiento para formar la red tridimensional porosa [1, 2]. Se ha demostrado que la carga superficial del GO/rGO depende fuertemente del pH polarizando sus grupos funcionales oxigenados y modulando a través de la fuerza iónica su apantallamiento, controlando la formación de los hidrogel [1-3]. Se ha propuesto que estas interacciones hidrofóbicas y de repulsión electrostática pueden analizarse mediante la teoría DLVO para predecir la estabilidad de dispersiones de GO/rGO a distintos pH y fuerzas iónicas [3]. Tomando en cuenta estos antecedentes, además de parámetros cinéticos de reducción [4] y fisicoquímicos del ambiente hidrotérmico [5], el objetivo de este trabajo es utilizar la teoría DLVO para evaluar los cambios en los potenciales de interacción que sufre dos láminas de GO paralelas a medida que estas se reducen en condiciones hidrotérmicas bajo distintas condiciones de pH y fuerza iónica. Se encontró que a todos los pH's y fuerzas iónicas las láminas tienen una barrera de potencial que disminuye mientras el proceso de reducción se completa, aumenta con el pH y disminuye con el aumento de la fuerza iónica para todos los grados de reducción. Estos resultados fueron validados experimentalmente estudiando diferentes barreras de potencial, observándose morfologías irregulares de los aerogeles a bajos y altos potenciales. De esta manera, se encontró un rango de barrera de potencial en función del aumento del grado de reducción donde los hidrogel se forman apropiadamente, asociándose a distintas condiciones de pH y fuerza iónica. Específicamente, a medida que el pH aumenta es necesario que la fuerza iónica sea mayor para que la barrera de potencia se encuentre en la banda. Esto permite por primera vez asociar un modelo numérico al proceso de formación propuesto de los hidrogel hidrotérmicos, relacionándolo variables de síntesis

claves.

### Agradecimientos

Agradecimiento al FONDECYT REGULAR 1200093.

### Referencias

- [1] Gudarzi M. et al. (2016), doi.org/10.1021/acs.langmuir.6b01012
- [2] Huang M. et al. (2019), doi.org/10.1016/j.diamond.2019.02.023
- [3] Sasikala S. et al. (2017), doi.org/10.1002/adma.201605473
- [4] Wasalathilake K. C et al. (2018), doi.org/10.1016/j.carbon.2018.05.036
- [5] Wojcik M. et al. (2017), doi.org/10.1021/jacs.7b00474