

Directora: Yamila Perez Sirkin; yperezsirkin@qi.fcen.uba.ar

Co-Director: Mario Tagliazucchi; mario@qi.fcen.uba.ar

Laboratorio: Materiales Blanda

Lugar de trabajo: Instituto de Química Física de los Materiales, Medio Ambiente y Energía (INQUIMAE) – Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

TRANSPORTE DE CARGA EN POLÍMEROS REDOX

Los polímeros redox tienen una cadena principal polimérica y no conductora con sustituyentes con propiedades redox. Estos grupos poseen más de un estado de oxidación accesible y pueden ser complejos de coordinación (por ejemplo de osmio o de hierro) o especies orgánicas. En este sistema pueden ocurrir procesos de transferencia electrónica entre dos sitios redox de un mismo o distintos polímeros (siempre que los grupos redox involucrados posean estados de oxidación diferentes) o bien entre un grupo redox y un electrodo (ver Figura 1) [1].

El estudio de estos sistemas ha despertado gran interés en los últimos años. Una de las primeras aplicaciones fue como mediador en biosensores de glucosa. Luego, fue aplicado en bio-celdas de combustible y, recientemente, como anolito/catolito en baterías de flujo redox. En particular, en las bio-celdas de combustible se suelen utilizar polímeros redox adsorbidos en el electrodo para mediar la transferencia electrónica entre el sitio activo de una enzima con el electrodo, donde la distancia entre los sitios redox y la flexibilidad del esqueleto juegan un rol fundamental para optimizar su función [2]. Numerosos trabajos experimentales intentan establecer relaciones entre la estructura del polímero y su eficiencia para el transporte de carga, por ejemplo, una discusión recurrente e inconclusa es el efecto de la flexibilidad del conector entre el grupo redox y el polímero [3].

En este proyecto, se estudiará mediante simulaciones computacionales el efecto de la arquitectura del polímero, por ejemplo, largo de cadena, distancia entre grupos redox, concentración, arquitectura molecular en el transporte electrónico. El trabajo propuesto involucra el desarrollo o modificación de códigos computacionales para realizar las simulaciones y análisis de datos (Python y c++).

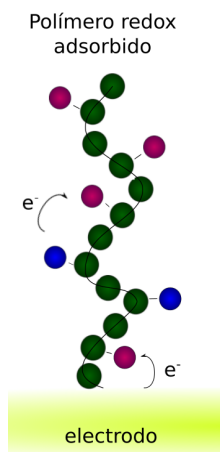


Figura 1: Representación esquemática de las posibles transferencias de electrones en polímero redox adsorbidos. Por un lado, puede haber transferencia entre el electrodo y un grupo redox del polímero cercano al mismo y, por otro lado, entre los grupos redox con distintos estados de oxidación dentro del polímero. Las partículas verdes representan la cadena principal del polímero. Mientras que las azules y rojas, los grupos redox en distintos estados de oxidación.

Citas:

[1] Mengwei Yuan and Shelley D Minter. Redox polymers in electrochemical systems: From methods of mediation to energy storage. *Current Opinion in Electrochemistry*, 2019.

[2] Piyanut Pinyou, Vincent Blay, Liana Maria Muresan, and Thierry Noguer. Enzyme-modified electrodes for biosensors and biofuel cells. *Mater. Horiz.*, 6(7):1336–1358, 2019.

[3] Elena C Montoto, Yu Cao, Kenneth Hernández-Burgos, Christo S Sevov, Miles N Braten, Brett A Helms, Jeffrey S Moore, and Joaquín Rodríguez-López. Effect of the backbone tether on the electrochemical properties of soluble cyclopropenium redox-active polymers. *Macromolecules*, 51(10):3539–3546, 2018.