

## Electrocatalizadores con átomo único de Zn derivados de guanina para la reducción eficiente de oxígeno

Escobar Martínez, Luis M.; Morales, Gustavo M.; Barbero, César A.; Balach, Juan

Instituto de Investigaciones en Tecnologías Energéticas y Materiales Avanzados (IITEMA)-CONICET, Dep. de Química, Facultad de Ciencias Exactas Físicoquímicas y Naturales, Universidad Nacional de Río Cuarto (UNRC), Ruta Nac. 36, Km. 601, Río Cuarto, Argentina.

jbalach@exa.unrc.edu.ar

Área temática: G. Aplicaciones de nanomateriales en ambiente, energía, agro, alimentos y catálisis

La creciente demanda energética mundial y las preocupaciones ambientales asociadas a los combustibles fósiles han impulsado la investigación en sistemas de conversión de energía limpios, como las pilas de combustible y las baterías metal-aire. La reacción de reducción de oxígeno (RRO) en el cátodo es un proceso crítico que, no obstante, presenta cinéticas lentas y etapas de reacción que pueden ir por vías de  $2 e^-$  menos eficientes. Aunque los catalizadores basados en platino constituyen el referente en esta área desarrollo, su elevado coste, escasez e inestabilidad restringen su uso generalizado [1].

En respuesta, han surgido catalizadores sin metales preciosos, en particular los catalizadores de átomo único con sitios M-N<sub>4</sub> incorporados en carbones dopados con nitrógeno. Las principales ventajas de estos materiales son su buena conductividad, resistencia a la corrosión, y la presencia de grupos funcionales con propiedades excepcionales.

Por otra parte, la guanina, una nucleobase con alta proporción N/C, puede pirolizarse para formar carbones dopados con nitrógeno. Sin embargo, los carbones resultantes suelen presentar baja área superficial. Para superar esta limitación, el uso de sales fundidas (por ejemplo, mezclas ZnCl<sub>2</sub>/NaCl) favorece la obtención de estructuras carbonosas porosas con abundantes sitios activos Zn-N<sub>4</sub> en un único paso de carbonización. La generación de los sitios de Zn-N<sub>4</sub> en la estructura carbonosa suele influir de manera significativa en la eficiencia catalítica y en la estabilidad.

En este estudio, se sintetizaron electrocatalizadores de átomo único de Zn mediante la carbonización de guanina y mezclas de sales ZnCl<sub>2</sub>/NaCl (1:1) a 800 °C [2]. Las caracterizaciones de los materiales sintetizados mostraron la formación de nanopartículas de carbono de unos 35 nm, alta área superficial específica ( $\approx 2000 \text{ m}^2/\text{g}$ ), y la generación de grupos funcionales tetrapirrólicos y tetrapiridínicos del tipo Zn-N<sub>4</sub>. La presencia de los sitios activos Zn-N<sub>4</sub> revelaron una notable afinidad del material catalítico hacia la RRO y un rendimiento electroquímico superior al del catalizador de Pt/C comercial. Estos electrocatalizadores destacan como una opción eficiente y sostenible en aplicaciones electroquímicas, especialmente en baterías basadas en oxígeno y en celdas de combustible [3].

### REFERENCIAS

1. Nie, Y.; Li, Y.; Wei, Z.; *Chem. Soc. Rev.* 44 (2015) 2168-2201
2. Escobar Martínez, L.; Toncón-Leal, C.F.; Sapag, K.; Cometto, F.P.; Giovanetti, L.J.; Cappellari, P.S.; Morales, G.; Barbero, C.; Balach, J.; *J. Power Sources* 656 (2025) 238102
3. Chen, Y.; Ji, S.; Chen, C.; Peng, Q.; Wang, D.; Li, Y.; *Joule* 2 (2018) 1242-1264