

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

CARACTERIZACIÓN Y FUNCIONALIZACIÓN DE SUPERFICIES MONOCRISTALINAS DE MAGNETITA CON METALES INDIVIDUALES Y CLÚSTERS: DESDE SISTEMAS MODELOS A ELECTROCATALIZADORES EN TECNOLOGÍAS DE ENERGÍAS RENOVABLES

Laviani, Magalí

Grumelli, Doris (Dir.)

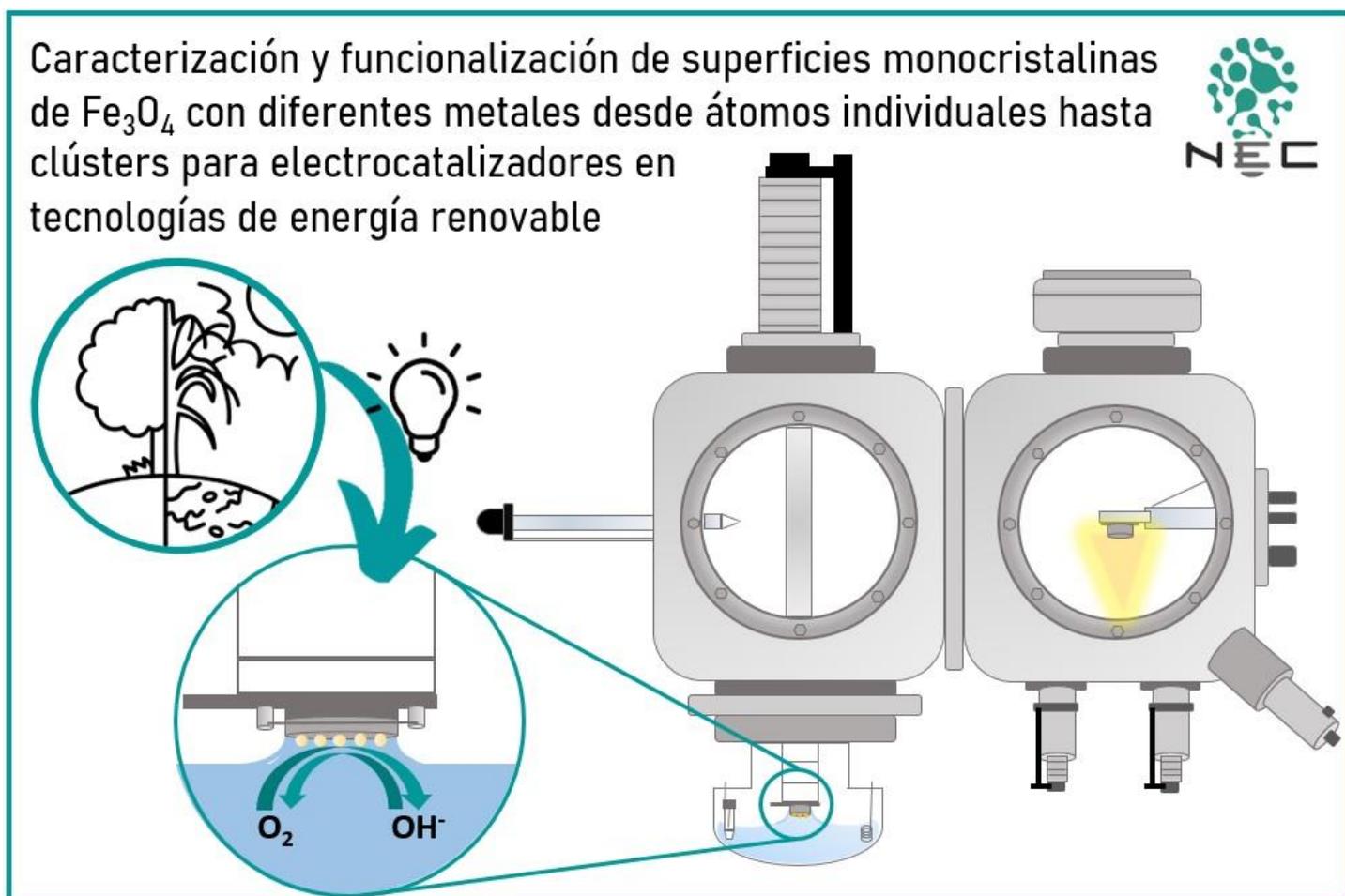
Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA)
mlaviani@inifta.unlp.edu.ar

PALABRAS CLAVE: magnetita, átomos individuales, reacción de evolución de oxígeno

CHARACTERIZATION AND FUNCTIONALIZATION OF MAGNETITE SINGLE CRYSTALS WITH SINGLE ATOMS AND CLUSTERS: FROM MODEL SYSTEMS TO ELECTROCATALYSTS IN RENEWABLE ENERGY TECHNOLOGIES

KEYWORDS: magnetite, single metal catalysts, oxygen evolution reaction

Resumen gráfico



Resumen

El plan de investigación tiene como objetivo general utilizar superficies monocristalinas de magnetita como materiales de electrodo para inmovilizar metales: átomos individuales y clústers, que tengan alta actividad catalítica para las reacciones de interés como la reducción y evolución de oxígeno (OER y ORR, respectivamente); reacciones involucradas en tecnologías de energías renovables como celdas de combustible, baterías de litio-aire y ruptura de la molécula de agua.

Se utilizarán superficies monocristalinas de magnetita con orientación preferencial en la dirección 001, que serán preparadas y caracterizadas en condiciones de ultra alto vacío (UHV, del inglés: ultra high vacuum). Cuando éstas muestras de magnetita 001 son preparadas adecuadamente, los átomos de la superficie se ordenan a partir del proceso conocido como reconstrucción superficial. Este arreglo convierte a la superficie de magnetita 001 en un sustrato ideal para alojar una gran variedad de átomos individuales y clústers de manera estable, y poder así estudiar la respuesta electrocatalítica de los mismos para OER y ORR. Átomos individuales (comenzando por Pt) y clústers (del mismo metal) serán preparados desde la fase vapor en UHV y su morfología será

caracterizada por microscopía de efecto túnel (STM), difracción de electrones de baja energía (LEED) y microscopía de fuerza atómica (AFM), mientras que la naturaleza química será determinada por otras técnicas de superficie como espectroscopía de absorción de rayos X (XPS), espectroscopía Raman e infrarroja (IR) combinadas con técnicas de sincrotrón como estructura fina en la región cercana al borde de absorción de rayos X (XANES) y en la región extendida del borde de absorción de rayos X (EXAFS). Aspectos estructurales serán estudiados por difracción de rayos X superficial con control de potencial. Una vez que los sistemas han sido caracterizados de manera completa y exhausta, se realizarán experimentos electroquímicos empleando principalmente voltametría cíclica (CV) y voltametría de barrido lineal (LSV) para determinar la actividad electrocatalítica de las reacciones de ORR y OER. Por otro lado se empleará electrodo de disco rotante (RDE) para obtener información sobre los mecanismos de estas reacciones. Finalmente se comparará las performances electrocatalíticas alcanzadas para cada par átomo individual/clúster y entre diferentes metales individuales entre sí.