

## FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS

### CARACTERIZACIÓN Y FUNCIONALIZACIÓN DE SUPERFICIES DE MAGNETITA CON MOLÉCULAS DE PORFIRINAS METÁLICAS PARA SU EMPLEO EN ELECTROCATÁLISIS

Heredia, Romina María Agustina

Grumelli, Doris (Dir.)

Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA)

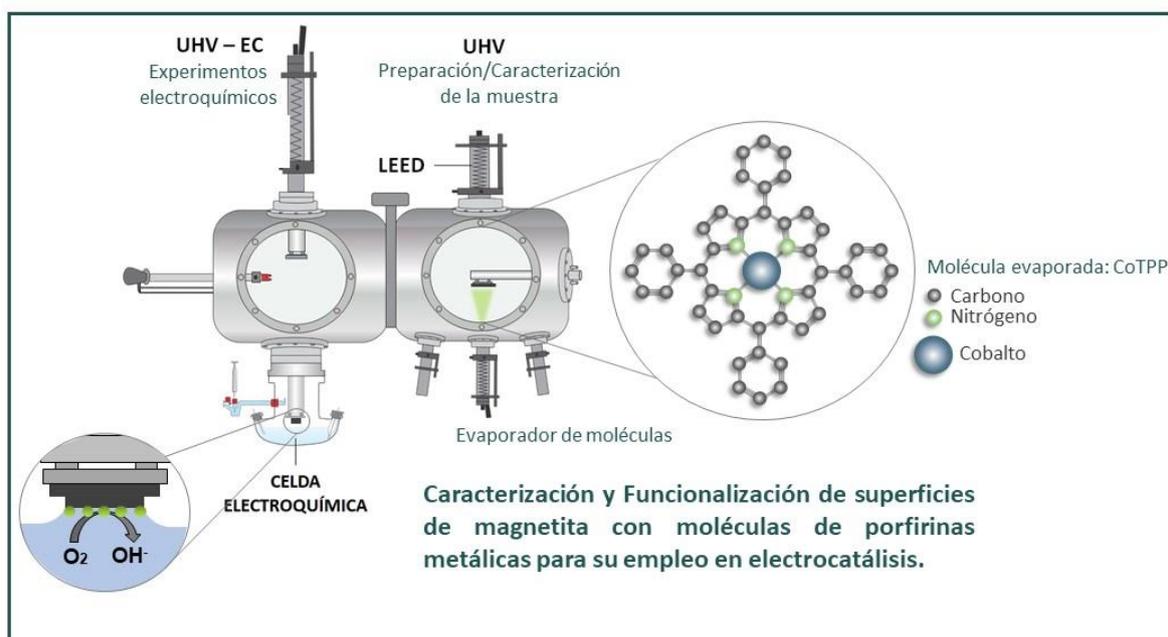
aheredia@inifta.unlp.edu.ar

**PALABRAS CLAVE:** ultra alto vacío, electroquímica, magnetita, porfirinas.

### CHARACTERISATION AND FUNCTIONALISATION OF MAGNETITE SURFACES WITH METAL PORPHYRIN MOLECULES FOR USE IN ELECTROCATALYSIS

**KEYWORDS:** ultra-high vacuum, electrochemistry, magnetite, porphyrins

#### Resumen gráfico



## Resumen

El plan de tesis se centrará en estudiar las propiedades catalíticas de porfirinas metálicas (Fe, Co, Ni, etc.) inmovilizadas por diferentes métodos, sobre superficies de magnetita ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ) para explorar la mejora en la actividad electrocatalítica de las reacciones de evolución y reducción de oxígeno (OER y ORR, respectivamente). Los métodos de inmovilización de porfirinas a superficies de  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  serán: i) evaporación desde fase vapor (del inglés organic molecule beam evaporation OMBE) y ii) electrografting de la correspondiente sal de diazonio de la porfirina. Por medio de OMBE se obtendrán autoensamblados donde las moléculas de porfirina se acuestan sobre el sustrato, siendo las fuerzas de Van der Waals lo que mantiene unidas las porfirinas al sustrato. El electrografting consiste en la electrorreducción del grupo diazonio de la sal de porfirina formando un radical arilo que se une covalentemente a la superficie generando una unión C- $\text{Fe}_3\text{O}_4$ , adquiriendo de esta manera las porfirinas una orientación perpendicular respecto al sustrato. El método de OMBE se aplica sobre diferentes superficies de  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ : superficies policristalinas ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ poli), superficies reconstruidas de monocristales de  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  con orientación preferencial 001 ( $\text{Fe}_3\text{O}_4(001)$  rec) y sobre superficies

monocristalinas no reconstruidas ( $\text{Fe}_3\text{O}_4(001)$  unrec). El método de electrografting se empleará solo sobre muestras  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ poli. Los diferentes sistemas formados estarán caracterizados por técnicas de superficie tales como microscopía de efecto túnel (STM), difracción de electrones de baja energía (LEED), microscopía de fuerza atómica (AFM), espectroscopía fotoelectrónica de rayos X (XPS), espectroscopía raman e infrarroja (IR), combinados con técnicas de sincrotrón como estructura fina en la región cercana al borde de absorción de rayos X (XANES) y estructura fina en la región extendida del borde de absorción de rayos X (EXAFS). Se realizarán experimentos electroquímicos convencionales para determinar la actividad electrocatalítica en cada caso y poder comparar el rendimiento de cada sistema porfirina/  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  como así también obtener información sobre la mecánica de ambas reacciones de interés ORR y OER, utilizando principalmente voltametría cíclica (CV), voltametría de barrido lineal (LSV) y electrodo de disco rotante (RDE), combinadas con técnicas de sincrotrón como estructura fina en la región cercana al borde de absorción de rayos X (XANES) y estructura fina en la región extendida del borde de absorción de rayos X (EXAFS).