

## Comparación de la eficiencia electrocatalítica de níquel sobre magnetita: átomo individual vs. macromoléculas

Laviani, Magalí<sup>1</sup>; Heredia, Romina María Agustina<sup>1</sup>; Heske, Clemens<sup>2,3,4</sup>; Weinhardt, Lothar<sup>2,3,4</sup>; Hauschild, Dirk<sup>2,3,4</sup>; Grumelli, Doris<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Universidad de La Plata (UNLP) – CONICET, Buenos Aires, Argentina

<sup>2</sup> Institute for Photon Science and Synchrotron Radiation, Karlsruhe Institute of Technology (KIT), Karlsruhe, Germany

<sup>3</sup> Institute for Chemical Technology and Polymer Chemistry, Karlsruhe Institute of Technology, Karlsruhe, Germany

<sup>4</sup> Department of Chemistry and Biochemistry, University of Nevada, Las Vegas (UNLV), Las Vegas, Nevada, USA

mlaviani@inifta.unlp.edu.ar

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

Las reacciones electroquímicas que involucran moléculas de la atmósfera, como la reacción de reducción de oxígeno (ORR, del inglés: *Oxygen Reduction Reaction*), se presentan como soluciones prometedoras para la creciente demanda de energía y el deterioro ambiental. Sin embargo, requieren catalizadores costosos para acelerar el proceso. Los catalizadores de átomos individuales (SAC, del inglés: *Single Atom Catalysts*) surgieron por ser más eficientes y económicos. Éstos se basan en la inmovilización de átomos metálicos individuales sobre soportes con baja o nula actividad catalítica, como los óxidos metálicos. No obstante, reducir el tamaño del catalizador puede afectar su estabilidad termodinámica, lo que lleva a la formación de clústeres menos activos. Por lo que, para mitigar este problema, se pueden utilizar sustratos que estabilizan los SACs, como las superficies monocristalinas de magnetita ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ), que, preparadas en condiciones de ultra alto vacío, mantienen una reconstrucción superficial estable para los SACs [1] aún bajo condiciones electroquímicas [2]. Otra estrategia estudiada para estabilizar y obtener SACs consiste en formar redes autoensambladas de porfirinas sobre la superficie soporte, aprovechando su capacidad para coordinar átomos metálicos individuales de manera ordenada [3].

El objetivo de nuestro trabajo es estudiar y comparar la respuesta electrocatalítica de dos sistemas de Ni-SACs soportados sobre una superficie monocristalina de  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  con orientación preferencial en la dirección 001 para la ORR en medio alcalino saturado con oxígeno. Para el primer sistema, mostraremos resultados en los que se depositaron Ni-SACs sobre la superficie reconstruida de  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  (001) mediante deposición en fase vapor en ultra alto vacío (UHV, del inglés: *Ultra High Vacuum*). Para el segundo sistema, la superficie monocristalina de magnetita fue, en principio, funcionalizada por evaporación en fase vapor de porfirinas vacías, con el fin de generar un entorno molecular específico para la coordinación de átomos individuales metálicos, y posteriormente se evaporó Ni sobre dicha capa orgánica, también en condiciones de UHV.

La presencia, cobertura y naturaleza química del Ni se verificaron mediante espectrometría de fotoelectrones emitidos por rayos X (XPS, del inglés: *X-ray Photoelectron Spectrometry*) y las propiedades cristalográficas de la superficie se analizaron con difracción de electrones de baja energía (LEED, del inglés: *Low-Energy Electron Diffraction*).

### REFERENCIAS

1. Bliem, R. *Science* 346 (2014), 1215-1218
2. Grumelli, D. *Angew. Chem. Int. Ed.* 59 (2020), 21904
3. Gottfried, J.M. *Surface Science Reports* 70(3) (2015), 259-379