

ANÁLISIS DE LA INFLUENCIA DE DIFERENTES “NO-IDEALIDADES” Y DE ESQUEMAS DE REACCIÓN COMPLEJOS EN LA RESPUESTA ELECTROQUÍMICA DE PROCESOS DE TRANSFERENCIA DE CARGA ENTRE ESPECIES CONFINADAS EN LA SUPERFICIE DEL ELECTRODO

Doctorando: José Alfonso Sequí Castellano

Tutor y director: D. Joaquín González Sánchez



ÍNDICE

2

1. Problemas a analizar
2. Técnicas
3. Objetivos
4. Planificación
5. Metodología
6. Resultados iniciales
7. Agradecimientos

1. Problemas a analizar

3

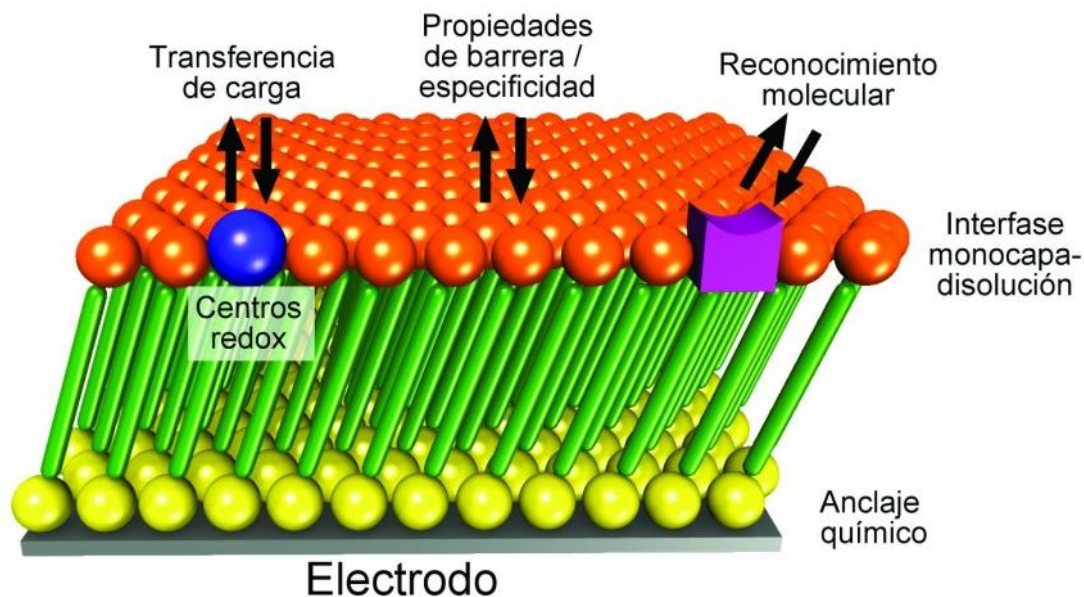
- Moléculas confinados en superficies conductoras (Monocapas)
 - Mimetizan el comportamiento de la molécula ligada a la superficie
 - Permiten controlar a nivel molecular la naturaleza y la topología de la molécula ligada a la superficie
 - Interfaces nanoestructurales



1. Problemas a analizar

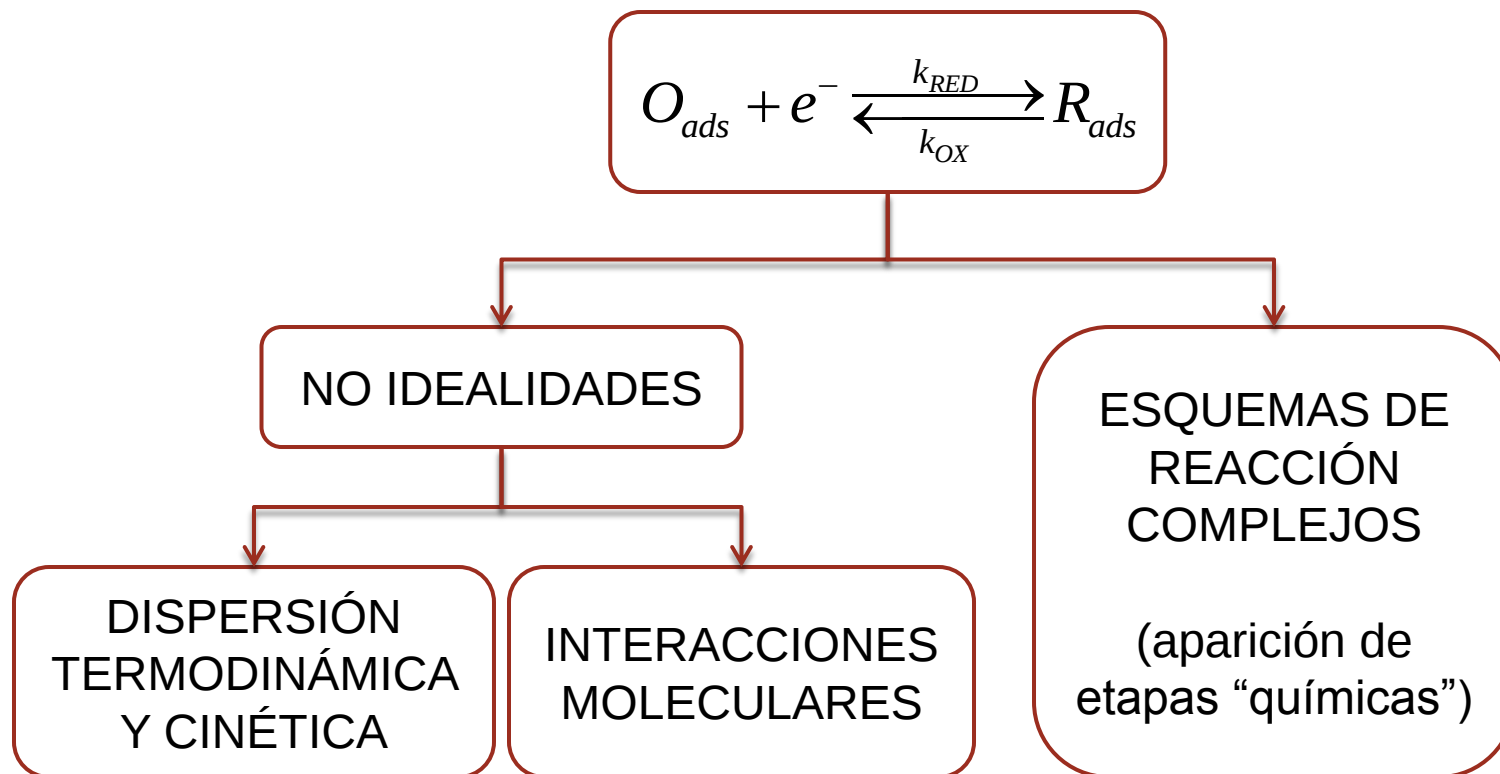
4

□ Monocapa ideal



1. Problemas a analizar

5

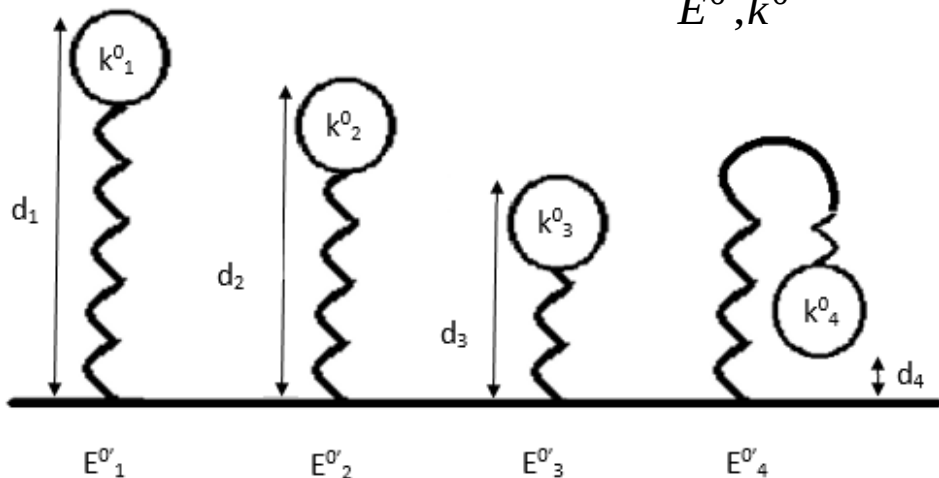


1. Problemas a analizar

6

- Dispersión termodinámica y cinética de los centros redox

$$\bar{I} = \iint_{E^0, k^0} p(E^0, k^0) I_{E^0, k^0}(E) dE^0 dk^0$$

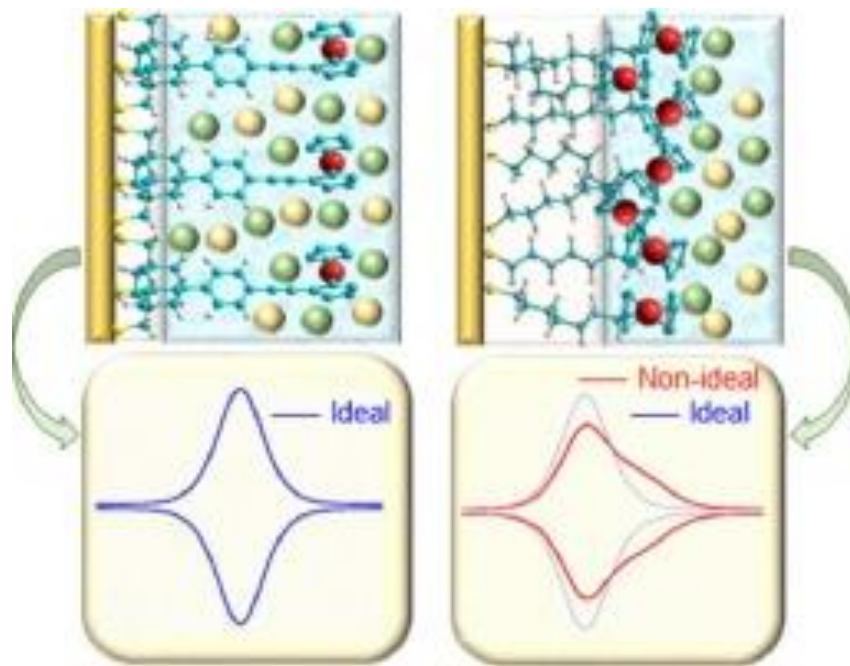


Posibles estructuras no uniformes en una monocapa de alquiltios funcionalizados con un centro redox.

1. Problemas a analizar

7

- Interacciones moleculares:
debidas a
 - ▣ Solvatación no uniforme de los centros redox
 - ▣ Apantallamiento electrostático ineficaz de los centros redox

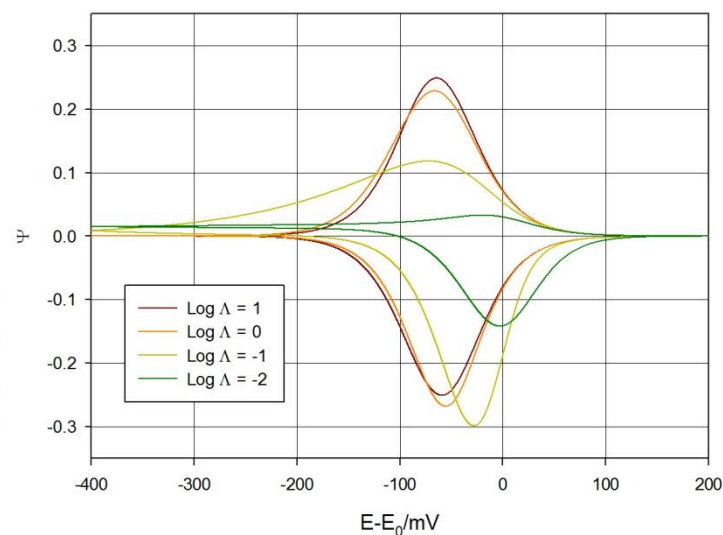
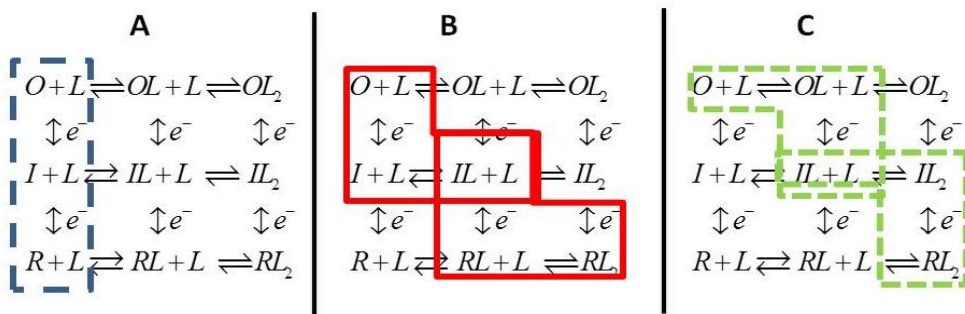


Current Op Electrochem 1(2017)22-26

1. Problemas a analizar

8

□ Esquemas de reacción complejos



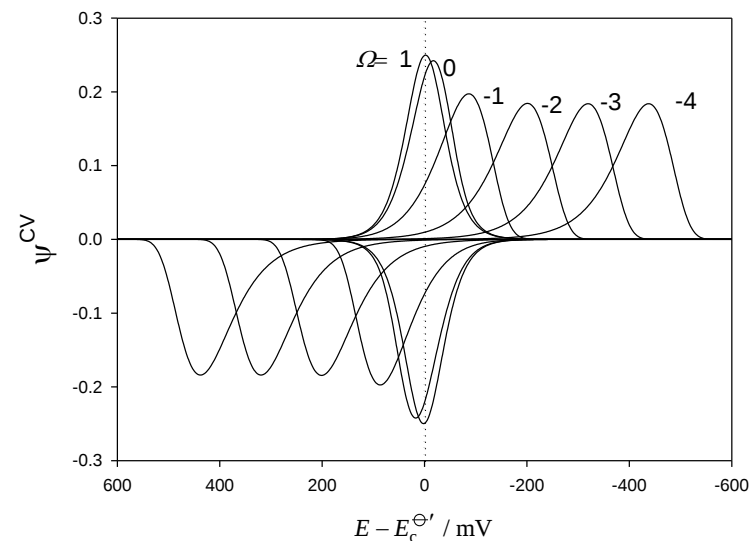
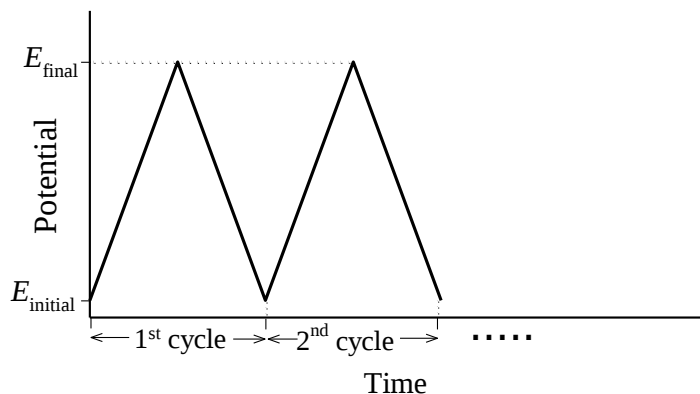
Mecanismo CE

$$k_0 = 1 \quad \bar{k} = k_2/k_1' = 10$$

2. Técnicas

9

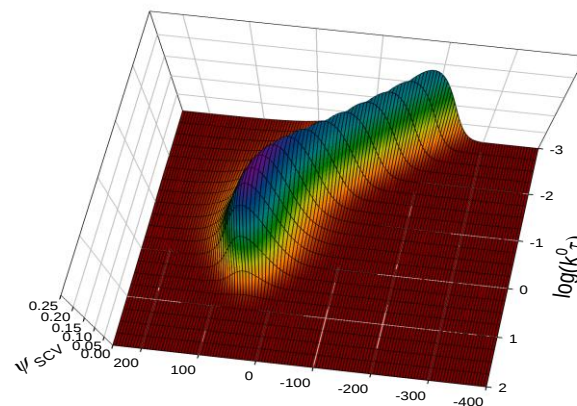
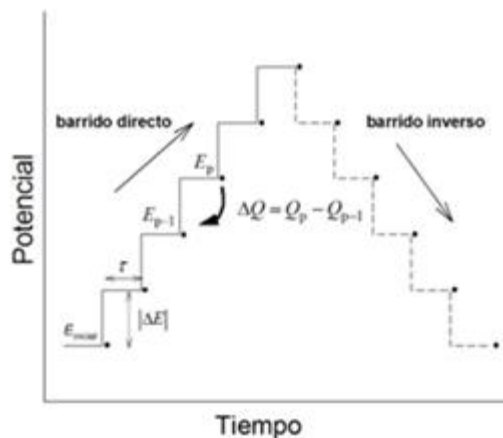
- Voltametría Cíclica (CV)
 - ▣ Más extendida interdisciplinarmente
 - ▣ Extensa bibliografía experimental



2. Técnicas

10

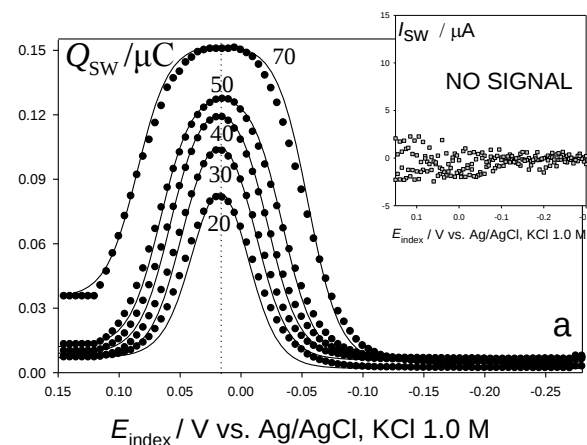
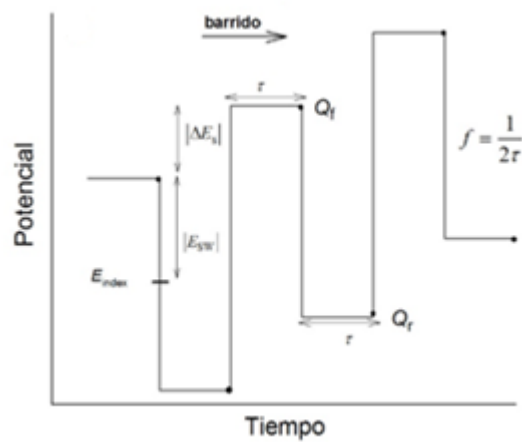
- Voltaculometría de Escalera Diferencial (SCV)
 - ▣ En determinadas condiciones, equivalente a CV
 - ▣ Multipulso, amortigua efectos de doble capa



2. Técnicas

11

- Voltaculometría de Onda Cuadrada (SWV)
 - Multipulso, amortigua efectos de doble capa
 - Permite desacoplar señales
 - Un parámetro controlable más (amplitud, E_{SW})





3. Objetivos

12

- ❑ Deducción de soluciones analíticas
- ❑ Evaluación de la aplicabilidad de tratamientos teóricos aproximados
- ❑ Implementación de las soluciones analíticas en programas de ordenador
- ❑ Verificación y aplicación experimental de los resultados teóricos
- ❑ Difusión de los resultados obtenidos



4. Planificación

13

- Tesis con matrícula parcial
- Metodología de trabajo semipresencial:
 - ▣ Trabajo de forma remota
 - ▣ Reuniones semanales con el director de la tesis
- Plan de trabajo se definirá progresivamente



4. Planificación

14

- Plan de trabajo para los primeros 3 años
 - Estudio de dos sistemas por año
 - Difusión de resultados a final del curso lectivo
 - Asistencia a congresos

5. Metodología

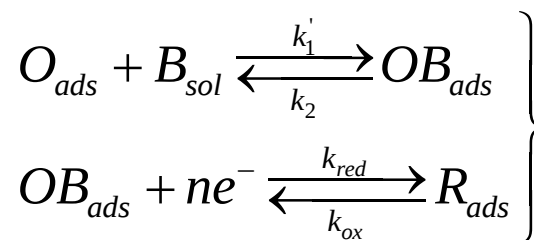
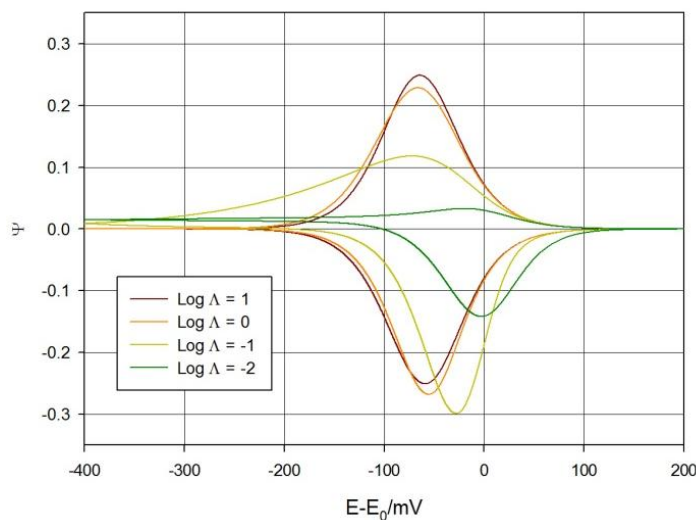
15



6. Resultados iniciales

16

□ Mecanismo CE superficial



$$k_0 = 1 \quad \bar{k} = k_2 / k'_1 = 10$$

□ Interacciones moleculares

- ▣ Comunicación a congreso con resultados preliminares (viernes 7 de julio, 11:45)



7. Agradecimientos

17



European Regional
Development Fund
Investing in your future



f SéNeCa⁽⁺⁾

Agencia de Ciencia y Tecnología
Región de Murcia