

Adsorción de surfactantes sobre electrodos con superficie bien definida y su relación con la forma final de nanopartículas metálicas en síntesis coloidales

Doctorado en Electroquímica.
Ciencia y Tecnología

Defensa del proyecto de tesis doctoral

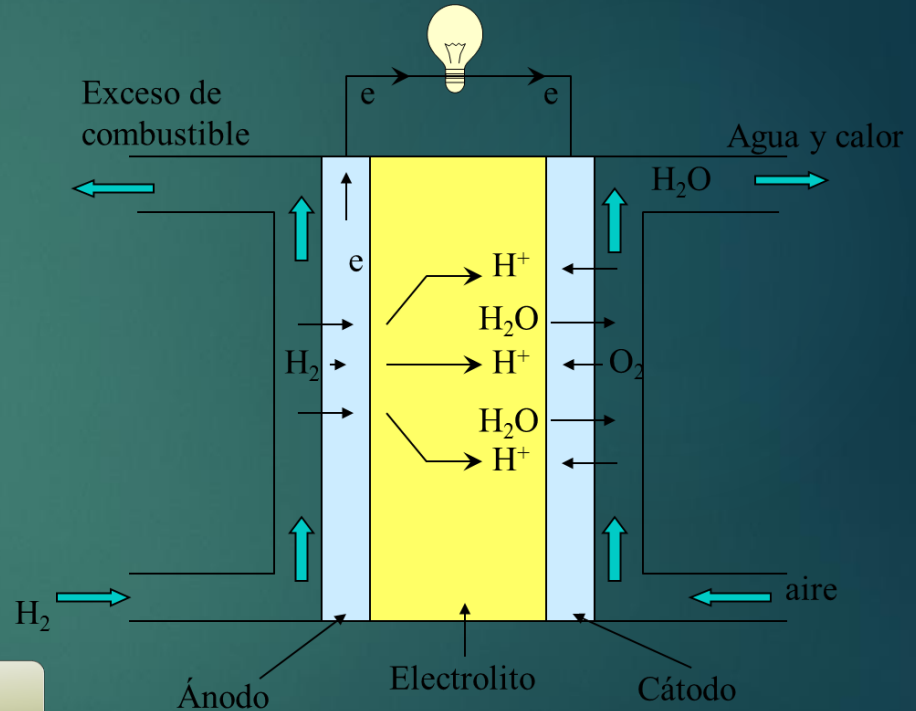
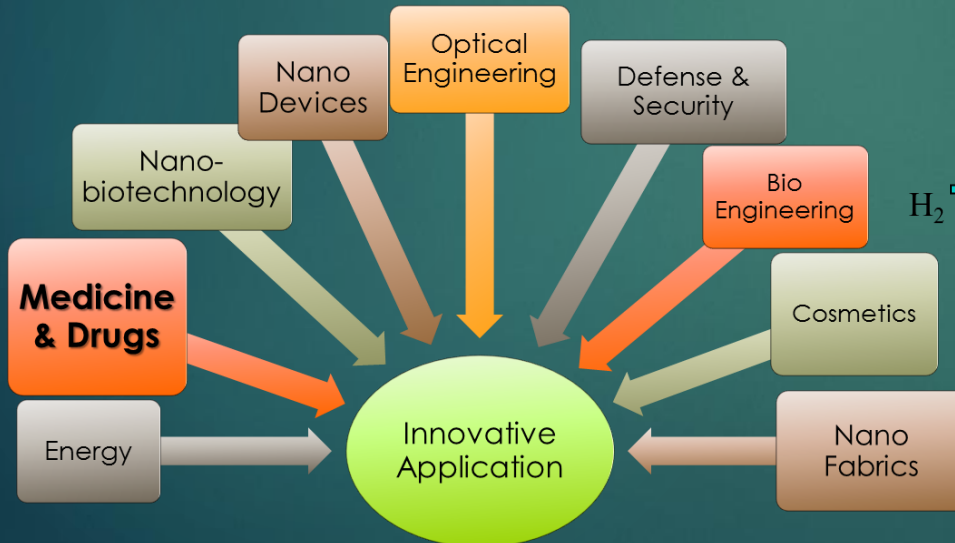
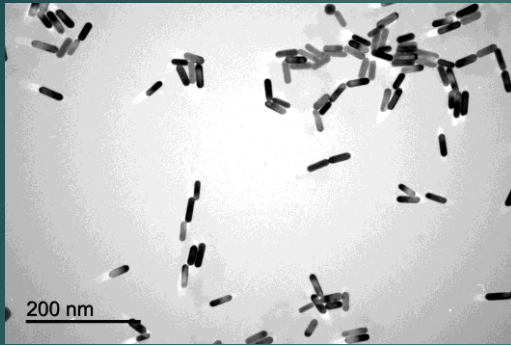
Director de tesis: Enrique Herrero Rodríguez

José María Gisbert González
Madrid, 3 de julio de 2018



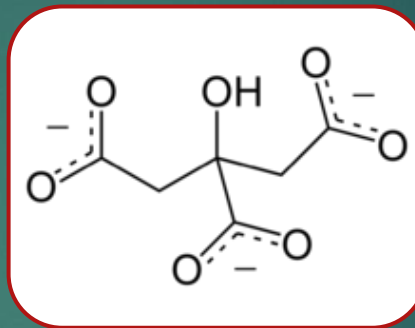
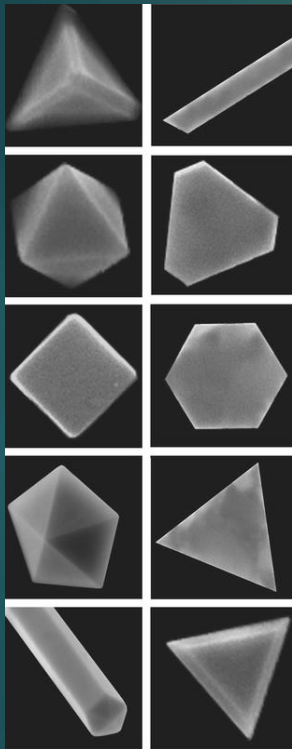
Introducción

Nanopartículas y electroquímica

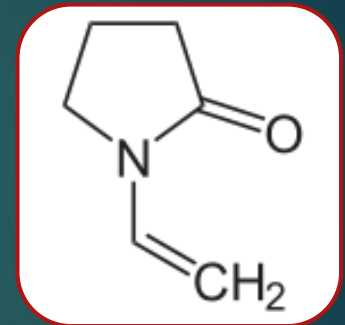


Introducción

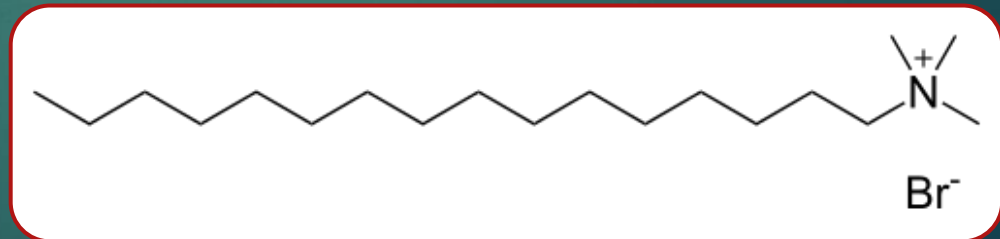
Nanopartículas y electroquímica



Citrato



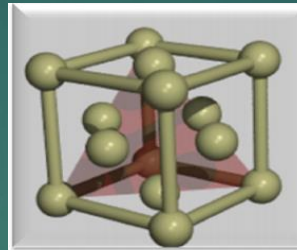
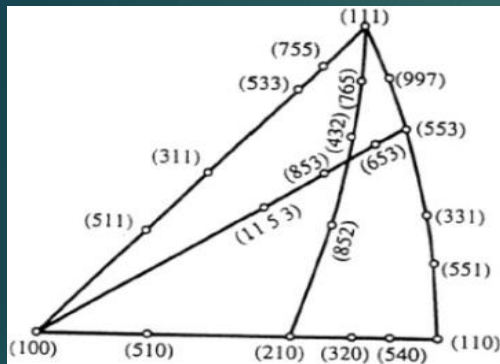
Polivinilpirrolidona (PVP)



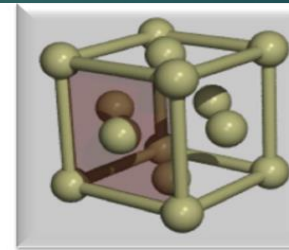
Bromuro de hexadeciltrimetilamonio (CTAB)



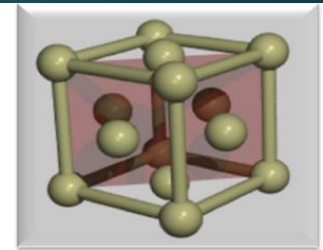
Introducción



Pt(111)



Pt(100)



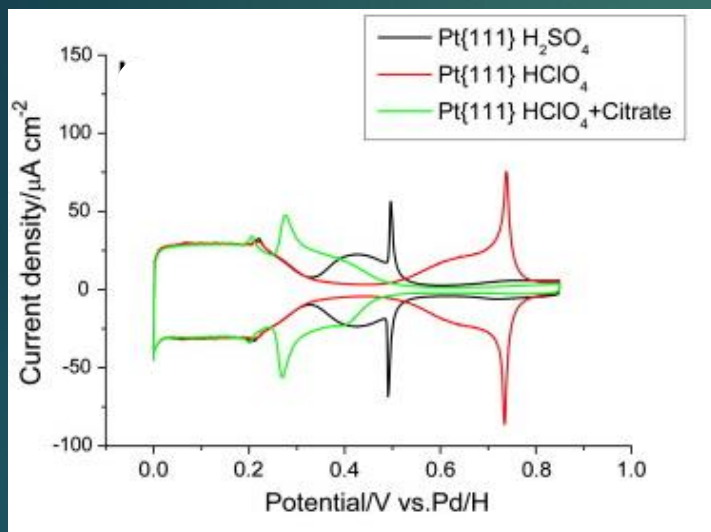
Pt(110)

3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
44.95591 21 Sc Scandium	47.867 22 Ti Titanium	50.9415 23 V Vanadium	51.9962 24 Cr Chromium	54.93804 25 Mn Manganese	55.845 26 Fe Iron	58.93319 27 Co Cobalt	58.9334 28 Ni Nickel	63.546 29 Cu Copper	65.38 30 Zn Zinc
88.90583 39 Y Yttrium	91.224 40 Zr Zirconium	92.90638 41 Nb Niobium	95.94 42 Mo Molybdenum	98 43 Tc Technetium	101.07 44 Ru Ruthenium	102.9055 45 Rh Rhodium	106.42 46 Pd Palladium	107.8682 47 Ag Silver	112.411 48 Cd Cadmium
174.967 71 Lu Lutetium	178.49 72 Hf Hafnium	180.9479 73 Ta Tantalum	183.84 74 W Tungsten	186.207 75 Re Rhenium	186.21 76 Os Osmium	190.2317 77 Ir Iridium	195.084 78 Pt Platinum	196.9665 79 Au Gold	200.59 80 Hg Mercury
260.103 103 Lr Lawrencium	261 104 Rf Rutherfordium	262 105 Db Dubnium	263 106 Sg Seaborgium	264 107 Bh Bohrium	271 108 Hs Hassium	277 109 Mt Meitnerium	278 110 Ds Darmstadtium	285 111 Rg Roentgenium	289 112 Cn Copernicium



Introducción

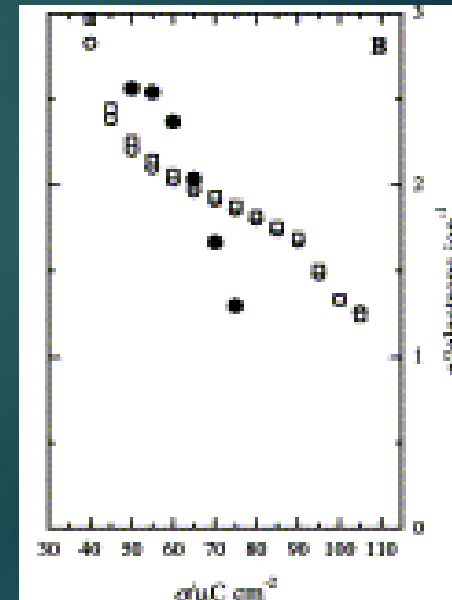
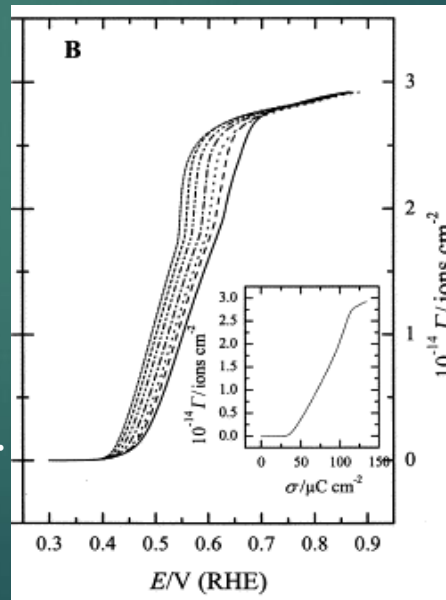
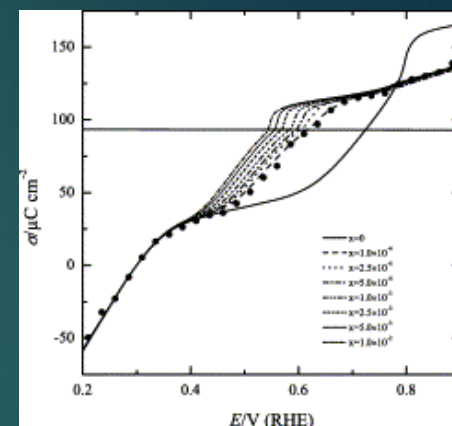
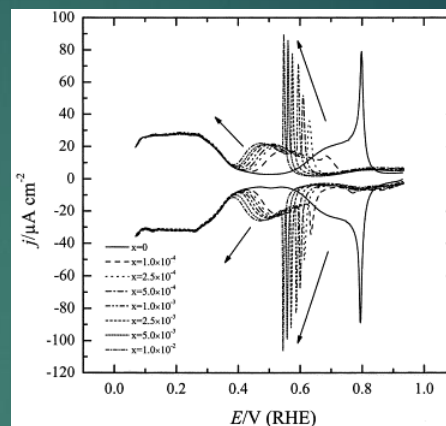
Pt(111) – Diferentes procesos de adsorción



Attard, G. A. et al. *J. Electroanal. Chem.* **688**, 249–256 (2013).

Herrero, E., Mostany, J., Feliu, J. M. & Lipkowski, J. *J. Electroanal. Chem.* **534**, 79–89 (2002).

Pt(111) – Adsorción de (bi)sulfato



Objetivos

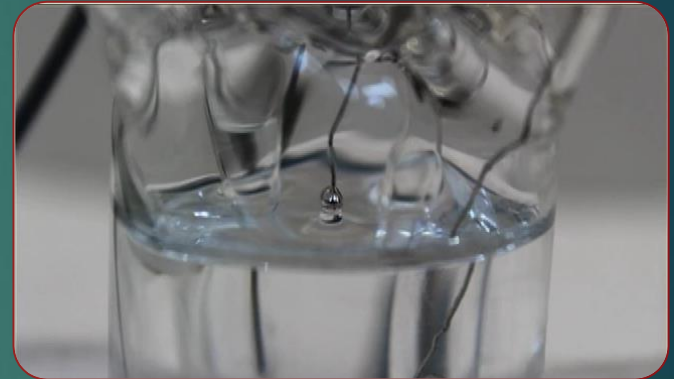
- Determinación del exceso de Gibbs y del número de carga.
- Empleo de técnicas FTIR para determinar información adicional de la especie.
- Uso de cálculos DFT para determinar el tipo de adsorción más estable.



Metodología

- Obtención de exceso de Gibbs y Coef. De Esin-Markov.
- ❑ Elección de electrodo (metal) y surfactante.

- 
- Caracterización Voltamétrica
 - Obtención de Exceso de Carga y presión superficial
 - Cálculo de Exceso de Gibbs
 - Obtención del número de carga



$$\Phi = - \int_0^{\sigma} (E_{\theta} - E_{\theta=0}) d\sigma$$

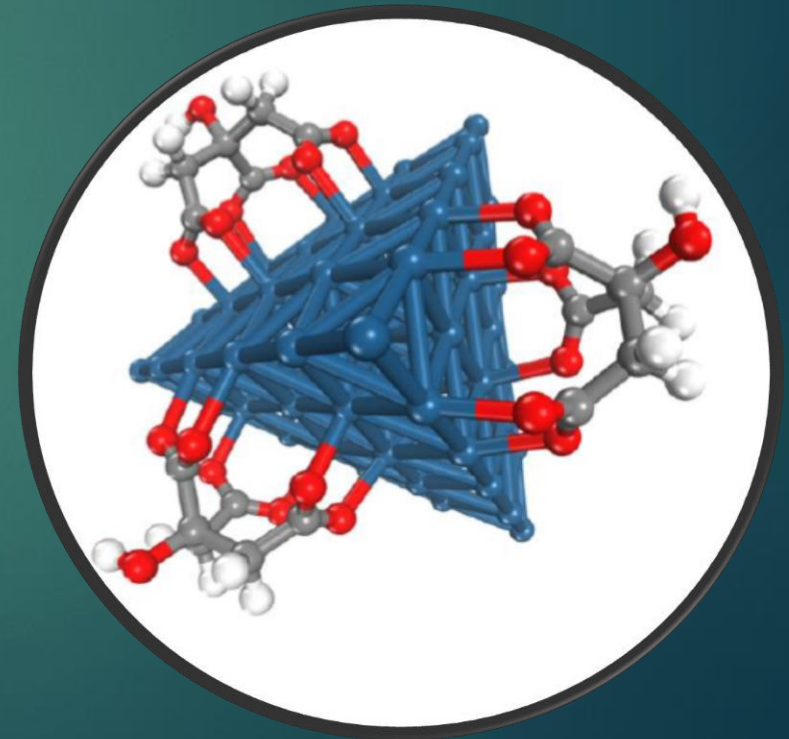
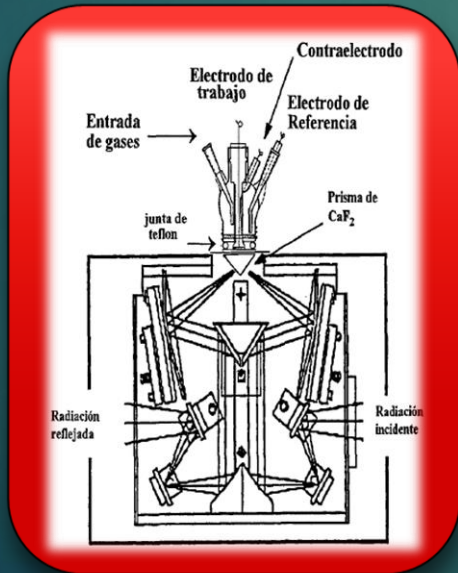
$$\Gamma = - \left(\frac{\partial \Phi}{RT \partial \ln c} \right)_{\sigma}$$

$$l' = \frac{1}{F} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial \Gamma} \right)_E$$

$$n' = \frac{1}{F} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial \Gamma} \right)_{c_{\text{citrate}}}$$

Metodología

- FTIR
 - ❑ Detectar modos de vibración (Banda IR).
 - ❑ Uso de luz polarizada s y p.
- DFT
 - ❑ Cálculo de configuraciones estables para cada PCE.

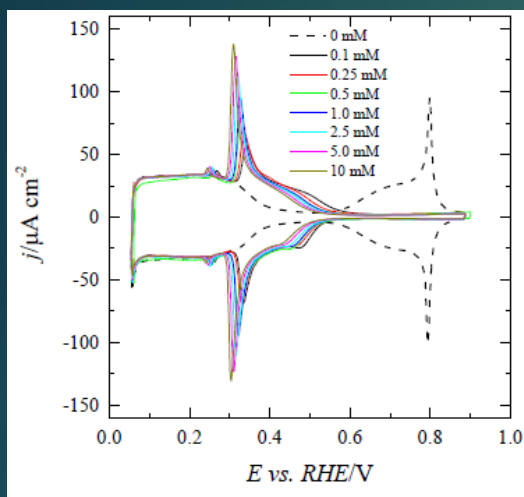


Plan de trabajo

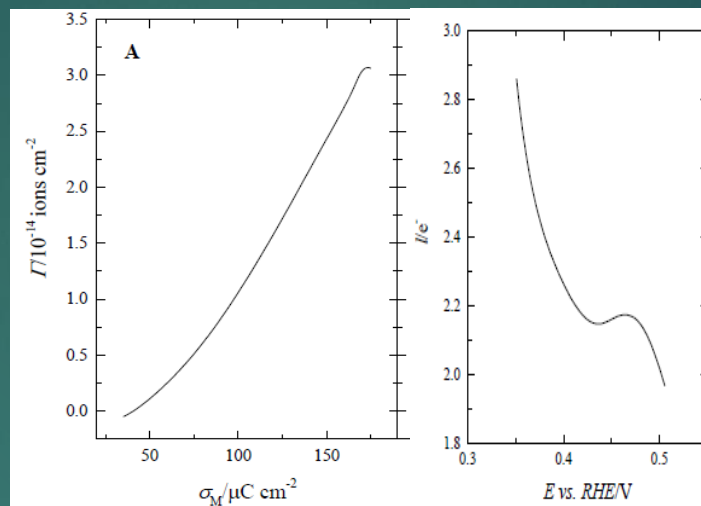
	Semestre					
	1	2	3	4	5	6
Búsqueda bibliográfica						
Objetivo 1						
Objetivo 2						
Objetivo 3						
Redacción de la tesis						

Resultados iniciales

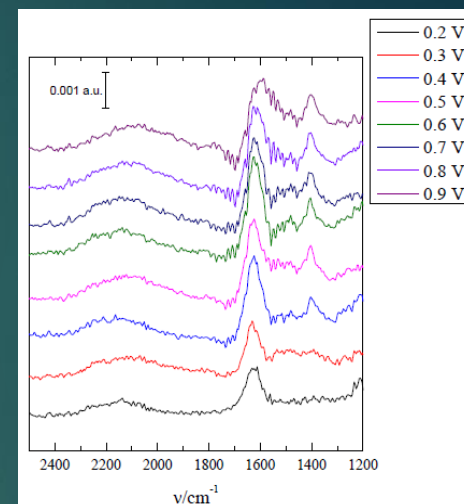
- Estudio de adsorción de citrato en platino.



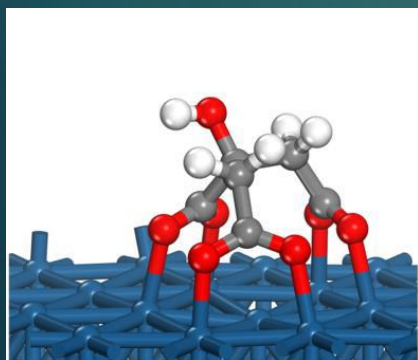
Voltametrías de citrato en Pt(111) 0,1 M HClO_4 , $50 \text{ mV} \cdot \text{s}^{-1}$



Exceso de Gibbs (izq) y número de carga (dcha)



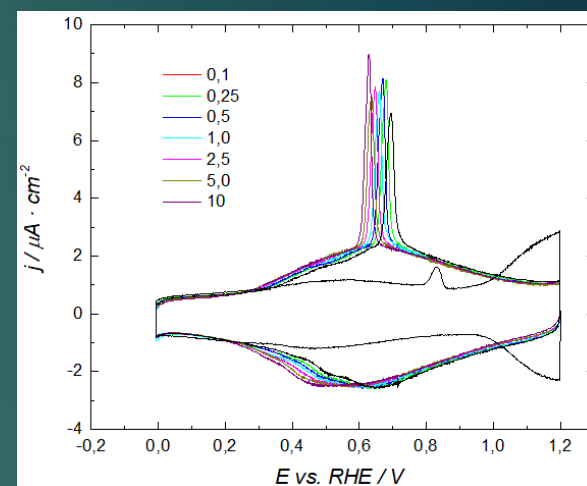
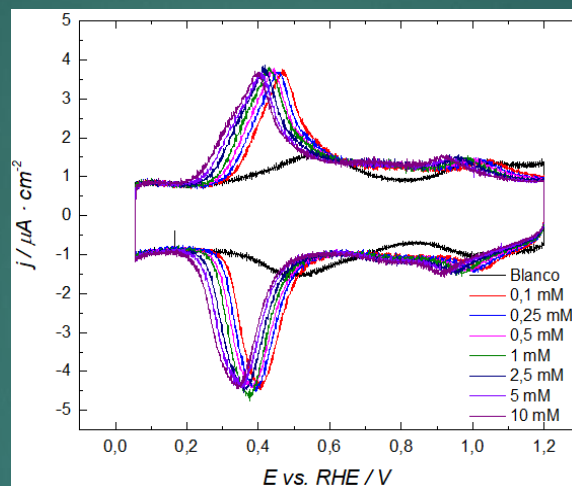
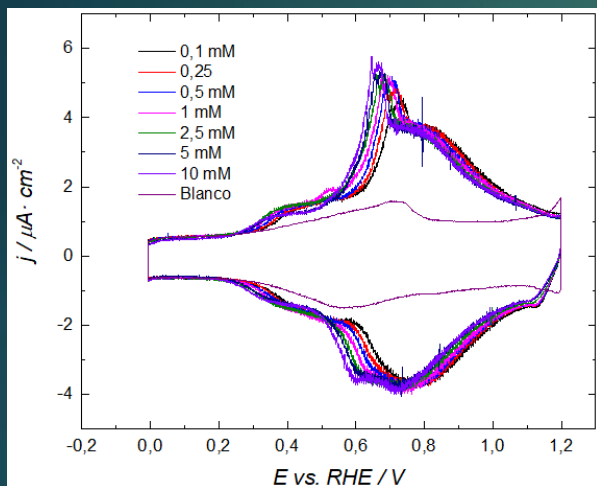
FTIR de citrato 1 mM adsorbido en Pt(111) 0,1 M HClO_4 a diferente potencial



Citrato adsorbido en Pt(111) en la configuración más estable calculada para el número máximo de grupos carboxilos enlazados a la superficie de manera bidentada

Resultados iniciales

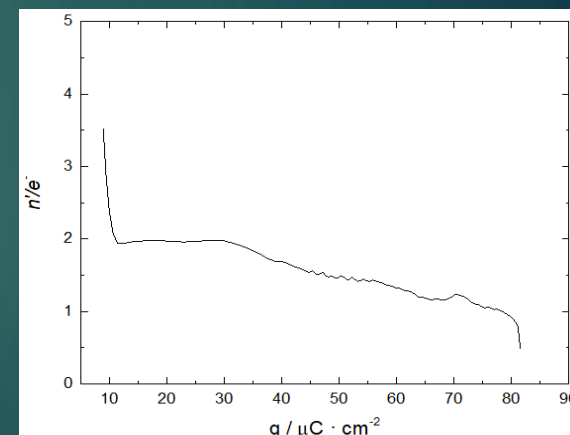
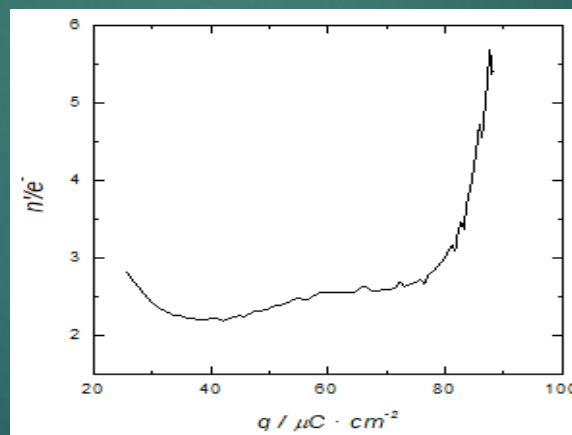
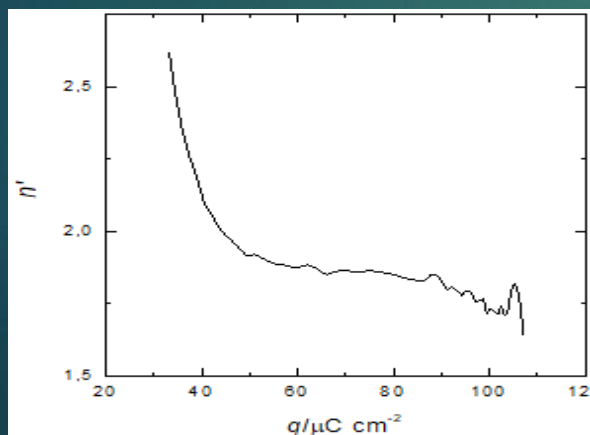
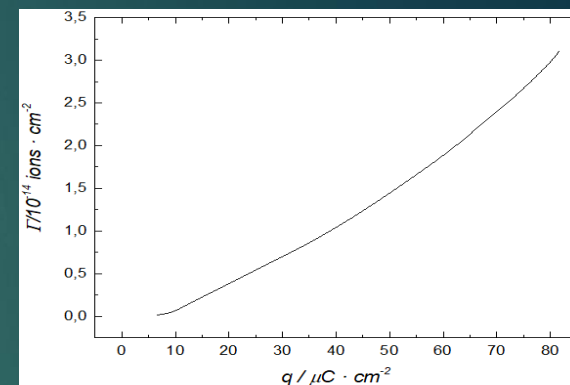
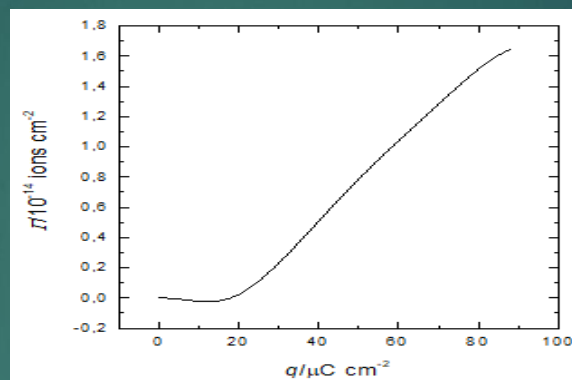
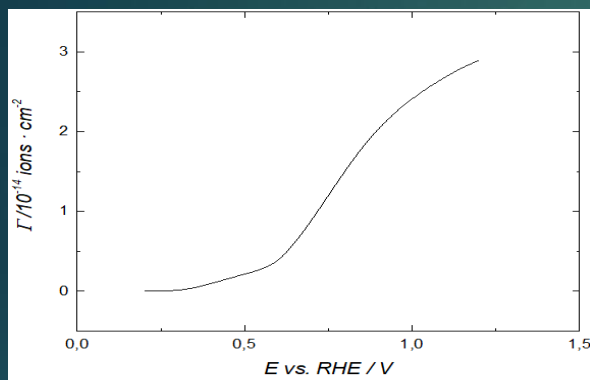
- Estudio de adsorción de citrato en oro.



Voltametrías de citrato en, de derecha a izquierda, Au(111), Au(100) y Au(110) en 0,1 M HClO_4 , $20 \text{ mV} \cdot \text{s}^{-1}$

Resultados iniciales

- Estudio de adsorción de citrato en platino.



Exceso de Gibbs (arriba) y número de carga (abajo) de citrato en, de derecha a izquierda, Au(111), Au(100) y Au(110) en 0,1 M HClO_4 .

Agradecimientos

- Generalitat Valenciana

- ❖ prometeoII/2014/013

- ❖ DOGV 7943, 23.12.2016