

## Propuesta de Trabajo para Laboratorio Avanzado 2021

### Caracterización de la estructura electrónica de NP`s formadas por aleaciones PtCuRu, PtCu, PtIrCu y PtIr por XPS y UPS

Silvina Bengió ([silvina.bengio@cab.cnea.gov.ar](mailto:silvina.bengio@cab.cnea.gov.ar))

Esta propuesta de trabajo consiste en caracterizar la estructura electrónica de catalizadores de PtCuRu, PtCu, PtIrCu y PtIr por Espectroscopía de Fotoelectrones excitados con Rayos X (XPS) y Espectroscopía de Fotoelectrones excitados con radiación ultravioleta (UPS). Estas aleaciones se utilizan en los catalizadores para la producción de energía en una celda de combustible, a partir de la oxidación total de amoníaco a  $N_2$ . En el ánodo la molécula de amoníaco se adsorbe siendo el rol de Pt romper los enlaces N-H de la molécula, mientras que los cocatalizadores facilitan y completan la reacción de remoción de los venenos catalíticos tipo  $N$  a  $N_2$ .

La caracterización de la composición química superficial junto al estado químico de los elementos que componen el material catalítico constituye uno de los aspectos básicos para el entendimiento de las propiedades catalíticas de estos sistemas, y la misma se realizará mediante XPS. Además, se analizará la estructura electrónica de la banda de valencia de estos sistemas mediante UPS y XPS, lo cual nos brindará información de la densidad de estados superficial y de volumen.

La perspectiva a futuro de este estudio es dosificar amoníaco a temperatura ambiente sobre estos sistemas e ir registrando cambios en los estados moleculares del amoníaco y en la densidad de estados asociado a la banda de valencia a medida que se aumenta la temperatura. Se buscará evaluar y correlacionar el rol de la aleación con la actividad catalítica a través de identificar los estados moleculares correspondientes a la molécula de amoníaco y sus derivados junto a la evolución de la densidad de estados superficial de la banda de valencia para poder identificar los mecanismos de reacción en esta aleación.

Estas actividades se realizarán en estrecha colaboración con el Dr. Mariano Asteazarán, profesor e investigador de la UTN-FRLP, quien sintetizará las muestras y las caracterizará electroquímicamente.