

## **Estabilidad electroquímica de superficies reconstruidas de Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> 001**

**Dra. Doris Grumelli**

Laboratorio de NanoElectroCatálisis – INIFTA - UNLP

Lunes 15 de junio, 13 horas - Aula virtual 1 (<https://zoom.us/my/qi.aula01>)

### Resumen:

La superficie de monocristales de magnetita con la orientación 001 (Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> 001) revisten gran importancia dado a que la reconstrucción de dicha superficie permite alojar átomos individuales los cuales se mantienen aislados incluso luego de exponer la superficie a altas temperaturas.<sup>1,2</sup> Esto convierte a Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> (001) en una superficie modelo en si misma y como soporte para alojar catalizadores formados por átomos individuales<sup>2</sup>. Sin embargo tanto la estabilidad de Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> (001) y de átomos únicos sobre ella, han sido estudiadas en fase gaseosa<sup>3</sup> y pocos experimentos han sido ejecutados en condiciones experimentales cercanas a las cuales funcionan los electrocatalizadores reales, por ejemplo, en soluciones acuosas u orgánicas.

En este trabajo se mostrará la estabilidad electroquímica de la reconstrucción superficial ( $\sqrt{2}\times\sqrt{2}$ )R45° de monocristales de Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> (001) en condiciones operando mediante difracción de rayos X superficial (SXRD)<sup>4</sup>. Los experimentos fueron llevados a cabo en el la línea ID03 del acelerador de partículas de European Synchrotron Research Facilities (ESRF). Mediante dichas mediciones hemos podido demostrar que es posible no solo transferir muestras Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> (001) - ( $\sqrt{2}\times\sqrt{2}$ )R45° desde ultra alto vacío (UHV) al setup experimental electroquímico sin pérdida de la reconstrucción, si no que la misma es estable por horas en contacto con soluciones alcalinas. También ha sido posible evaluar la estabilidad de la reconstrucción al variar el potencial electroquímico de la interface, demostrando que la superficie mantiene su reconstrucción superficial a potenciales anódicos donde ocurre la reacción de evolución de oxígeno (OER) con densidades de corriente que alcanzan 10 mA/cm<sup>2</sup>. Sin embargo, a potenciales más negativos donde comienza la reducción de la superficie, la reconstrucción es completamente destruída. La estabilidad estructural observada en la región de OER permite el uso de esta superficie tanto como sistema modelo para catálisis como para su futuro uso como sustrato para alojar átomos únicos.

1. M. W. Louie and A. T. Bell, Phys. Rev. B, 2015, 92, 075440.

2. R. Bliem, J. van der Hoeven, A. Zavodny, O. Gamba, J. Pavelec, P.E. de Jongh, Mi. Schmid, U. Diebold, and G. S. Parkinson, Angew. Chem. Int. Ed. 2015, 54, 13999.

3. B. Arndt, R. Bliem, O. Gamba, J. van der Hoeven, H. Noei, U. Diebold, G. S. Parkinson, A. Stierle. Surface Science, 2016, 653, 76.

4. D. Grumelli T. Wiegmann, S. Barja, F. Reikowski, F. Maroun, P. Allongue, J. Balajka, G. Parkinson, U. Diebold, K. Kern, O. M. Magnussen "submitted".