

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN Y POSIBLES PROYECTOS.

Prof. Ricardo Hernández

1. **Electrocatalisis.**
2. **Electroquímica Fundamental y Modelaje Molecular**
3. **Electroanálisis**

Electrocatalisis.

Los objetivos de esta área de la electroquímica incluyen la búsqueda o diseño y estudio de catalizadores (electrocatalizadores) con capacidad de sufrir reversiblemente procesos redox, que induzcan un proceso de transformación catalítica de un sustrato de interés, o que faciliten alguna etapa del proceso redox de una especie electroactiva.

Estos electrocatalizadores tienen aplicación en las áreas de *electrosíntesis* y de *generación electroquímica de energía*.

Electrocatalizadores

Entre los posibles electrocatalizadores se encuentran:

Catalizadores en fase heterogénea:

- ✓ Depósitos metálicos y bimetálicos sobre electrodos de carbón.
- ✓ Depósitos metálicos sobre electrodos metálicos.
- ✓ Depósitos metálicos o bimetálicos sobre matriz polimérica.

Catalizadores en fase homogénea:

- ✓ Complejos organometálicos sintéticos con actividad electrocatalítica.
- ✓ Complejos organometálicos naturales con actividad electrocatalítica. (P. Ej., metaloporfirinas, phtalocianinas).

Interés actual

En la actualidad se efectúan estudios en la búsqueda de catalizadores que permitan la electroreducción de CO_2 a productos de mayor valor agregado.

Otros estudios relacionados incluyen la reducción/ oxidación de moléculas pequeñas tales como CO y MeOH, de posible uso en celdas de combustibles, empleando electrocatalizadores.

Electroquímica Fundamental y Modelaje Molecular.

La interacción de las especies electroactivas, solvente y electrolito de soporte con la superficie de los electrodos puede ser modelada empleando modelos de correlación de estructura electrónica.

1. Semiempíricos
2. Teoría del Funcional de Densidad
3. Métodos ab-initio.

Interés actual.

Estos modelajes deben correlacionarse:

- ✓ Datos obtenidos experimentalmente
- ✓ Técnicas de análisis químico disponible.

En nuestro caso, el énfasis se hará en las técnicas electroquímicas puras o acopladas.

Interés actual.

Se centra en la simulación de interacción de especies como CO sobre superficies metálicas, con el objeto de correlacionar los resultados teóricos con la evidencia obtenida a partir de experimentos adsorción y actividad redox de las especies estudiadas.

Electroanálisis

2) **Electroanálisis y Espectroelectroquímica.**

Detección por vía electroquímica de diversas especies de importancia biológica y contaminantes es cada día más importante para nuestra sociedad.

El desarrollo de nuevos sensores selectivos y/ o métodos de análisis electroquímicos constituye una rama en expansión debido a la simplicidad y economía inherente de los instrumentos y métodos de análisis electroquímico.

El acoplamiento de las técnicas electroquímicas con técnicas espectroscópicas incrementa el ámbito de aplicabilidad de ambas técnicas, permitiendo realizar estudios fundamentales en electroquímica.

Interés actual.

- ✓ Se han realizado estudios preliminares en el diseño de Sensores para la detección potenciométrica de CO₂ atmosférico.
- ✓ Se plantea la posibilidad de desarrollo de membranas para su uso en otros sensores tales como los sensores selectivos a alcohol (alcoholímetros).
- ✓ Actualmente se adelantan estudios en la especiación, mediante técnicas electroanalíticas, de mezclas de Sb(III) y Sb(V).
- ✓ En paralelo, se adelantan el diseño y construcción de un detector electroquímico para ser acoplado a un cromatógrafo (HPLC) y que posteriormente sera empleado para la detección de contaminantes – MTBE, por ejemplo.

Habilidades a ser adquiridas

El desarrollo de gran parte de los proyectos de investigación electroquímica son de corte interdisciplinario; es decir, se involucran diferentes ramas de la ciencia y sus técnicas y metodologías.

Por esta razón, es posible que el desarrollo de algunos de los proyectos propuestos se efectúen en colaboración con otros grupos de investigación; por ejemplo, Inorgánica, Fisicoquímica teórica y espectroscopía.

Habilidades a ser adquiridas

Para realizar estos estudios se podrá requerir el empleo de:

- ✓ técnicas electroquímicas en general
- ✓ cromatografía de gases y líquida,
- ✓ RMN,
- ✓ infrarrojo,
- ✓ UV-visible,
- ✓ Espectrometría de masas,
- ✓ Microscopía óptica y microscopía electrónica con análisis elemental.
- ✓ Además, se deberán adquirir habilidades en síntesis química y separaciones.