



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE TUCUMÁN

naifq

ASOCIACIÓN ARGENTINA DE
INVESTIGADORES EN FÍSICOQUÍMICA
PERSONERÍA JURÍDICA 2058

XXI CONGRESO ARGENTINO DE FÍSICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA

LIBRO DE RESÚMENES



TUCUMÁN
ARGENTINA



COMPLEJOS DE RENIO PARA REDUCCIÓN DE CO₂ INMOVILIZADOS EN SUPERFICIES DE ORO. PROPIEDADES FÍSICOQUÍMICAS, ESPECTROSCOPIA SFG Y SIMULACION COMPUTACIONAL

Mauricio Cattaneo^a, Laura Kiefer^b, Gebre Sara^b, Aimin Ge^b, Liu Qiliang^b, Facheng Guo^c, Harvey Kelly^c, Pablo Videla^c, Tianquan Lian^b and Victor S. Batista^c

^aINQUINOVA-UNT-CONICET, Instituto de Química Física, Fac. Bioquímica, Química y Farmacia, Universidad Nacional de Tucumán, Ayacucho 471, T4000INI San Miguel de Tucumán, Argentina.

^bDepartment of Chemistry, Emory University, 1515 Dickey Drive, Northeast, Atlanta, Georgia 30322, United States.

^cDepartment of Chemistry and Energy Sciences Institute, Yale University, 225 Prospect Street, New Haven, Connecticut 06520, United States.

mcattaneo@fbqf.unt.edu.ar

La reducción electroquímica de CO₂ impulsada por fuentes de energías renovables, como eólica y solar, es un prometedor camino para la conversión en combustibles o precursores químicos. Los complejos de renio están entre los más eficientes catalizadores homogéneos para convertir CO₂ a CO con alta actividad electrocatalítica.¹ Una estrategia para la reducción electrocatalítica de CO₂ es la funcionalización de electrodos, que combina la estabilidad de sistemas heterogéneos con la alta selectividad de catalizadores moleculares. En este contexto, efectos estructurales y electrónicos en el catalizador en condiciones de trabajo pueden revelar importantes parámetros para el diseño y optimización de materiales catalíticos.²

Reportamos la síntesis y caracterización de nuevos complejos de renio en condiciones homogéneas y heterogéneas. [Re(CO)₃(L)Cl] con L = 3,3'-ditio-bipiridina y 3,3'-tio-bipiridina fueron obtenidos y caracterizados por análisis electroquímicos, espectroscopía SFG (espectroscopía de generación de suma de frecuencias) y modelado computacional, obteniéndose detalles fundamentales de la estructura electrónica, actividad catalítica y orientación del anclaje sobre la superficie del electrodo de oro, reguladas por el diseño del ligando.

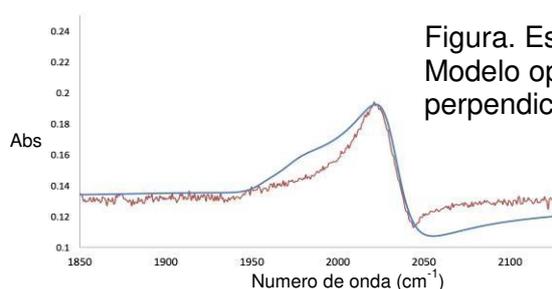
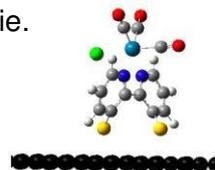


Figura. Espectroscopía SFG para [Re(SS-bpy)(CO)₃Cl]. Modelo optimizado DFT en electrodo metálico perpendicular a la superficie.



Referencias

- 1) Clark, M.L., Cheung, P.L., Lessio, M., Carter, E.A., Kubiak, C.P. *ACS Catal.* **2018**, 8, 2021.
- 2) a) Clark, M.L., Ge, A., Videla, P.E., Rudshiteyn, B., Miller, C.J., Song, J., Batista, V.S., Lian, T., Kubiak, C.P. *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, 140, 17643-55. b) Zhanaidarova, A., Osterichter, A.L., Miller, C.J., Jones, S.C., Kubiak, C.P. *Organometallics*, **2019**, Article ASAP, DOI: 10.1021/acs.organomet.8b00547.