



Plan de Gestión de Datos

INFORMACIÓN SOBRE EL PROYECTO

1. – Datos del Proyecto

- Título del Proyecto (en castellano)

Enfoques novedosos para el desarrollo de nuevos electrodos y medios de reacción de interés en celdas de combustible de baja temperatura

- Título del Proyecto (en inglés)

Novel approaches to the development of new electrodes and reaction media of interest in low temperature fuel cells

- Descripción del Proyecto (en castellano) Resumen

El presente proyecto busca efectuar aportes al conocimiento fundamental y al desarrollo tecnológico de las celdas de combustible de baja temperatura (LTFCs) para avanzar hacia una mejora sustantiva de la performance de estos dispositivos. A través de enfoques novedosos se abordará el estudio de tres aspectos que al presente son factores limitantes del rendimiento de las LTFCs, como son los electrocatalizadores usados en el ánodo y el cátodo, la configuración de estos electrodos, y el medio de reacción. Por una parte, se efectuarán estudios cinéticos mecanísticos de las reacciones anódicas (oxidación de hidrógeno, de alcoholes y de ácido fórmico) y catódica (reducción de oxígeno) sobre electrodos bimetálicos modelo conformados por un metal noble (Pt, Pd, Rh) y un metal oxofílico estable (W, Mo, Ti) obtenidos por electrodeposición desde soluciones en eutécticos binarios de baja temperatura. Estos estudios apuntarán a brindar evidencias sobre el funcionamiento de sitios bifuncionales en las etapas elementales y de sus efectos en los comportamientos sinérgicos que estos electrodos evidencien. También se estudiará la reducción de oxígeno sobre electrodos no metálicos basados en polímeros de coordinación de metales de transición, como un primer intento de aproximarse a un diseño no convencional de electrocatalizador inspirado en los sitios activos de enzimas (en este caso reductoras de oxígeno). Por otra parte, se desarrollará una configuración de electrodo novedosa basada en el uso de membrana nanoporosa con potencial aplicación como electrodo y difusor de gases en LTFCs, que en contacto con el electrolito optimice tanto el acceso de reactivos a la superficie electrocatalítica como la evacuación o transporte de productos electrogenerados en la misma. Estas membranas soportarán el material electroactivo en contacto con el electrolito en una de sus caras, y permitirán el ingreso del reactivo y evacuación de productos desde la cara opuesta a través de los poros. De este modo, el transporte del reactivo disuelto en el electrolito y el producto hasta/desde el electrocatalizador debería pasar a tener un efecto despreciable por la baja extensión del recorrido. Finalmente, se estudiará la performance de líquidos iónicos próticos (LIPs) como solventes electroquímicos potencialmente útiles en LTFCs. Más precisamente, se analizará la conducta de electrodos metálicos frente a las reacciones del electrodo de hidrógeno y de reducción de oxígeno en LIPs de bases amónica e imidazólica con cationes de ácidos fuertes, apuntando a detectar efectos configuracionales (sustituyentes del catión, tipo de anión) y fisicoquímicos (equilibrios ácido-base, hidrofobicidad) de los mismos sobre los mecanismos de estas reacciones.

- Descripción del Proyecto (en inglés) Resumen

This project seeks to contribute to the fundamental knowledge and technological development of low temperature fuel cells (LTFCs) to move towards a substantial improvement in the performance of these devices. Through novel approaches the study of three aspects that at present are limiting factors of the performance of LTFCs, such as the electrocatalysts used in the anode and cathode, the configuration of these electrodes, and the reaction medium will be addressed. On the one hand, mechanistic kinetic studies of the anodic (oxidation of hydrogen, alcohols and formic acid) and cathodic (oxygen reduction) reactions will be carried out on model bimetallic electrodes formed by a noble metal (Pt, Pd, Rh) and a stable oxophilic metal (W, Mo, Ti) obtained by electrodeposition from solutions in deep eutectic solvents. These studies will aim to provide evidences on the functioning of bifunctional sites in the elementary stages and their effects on the synergistic behaviors that these electrodes show. The reduction of oxygen on non-metallic electrodes based on transition metal coordination polymers will also be



studied, as a first attempt to approach an unconventional electrocatalyst design inspired by active enzyme sites (in this case oxygen reducing enzymes). On the other hand, a novel electrode configuration will be developed based on the use of nanoporous membranes with potential application as gas diffusion electrodes in LTFCs, which in contact with the electrolyte optimizes both the reagent access to the electrocatalytic surface and the evacuation or transport of electrogenerated products. These membranes will support the electroactive material in contact with the electrolyte on one of their faces, and will allow the reagent to enter and evacuate products from the opposite side through the pores. Thus, the transport of the dissolved reagent in the electrolyte and the product to/from the electrocatalyst surface should have a negligible effect due to the short diffusion path. Finally, the performance of protic ionic liquids (PILs) as electrochemical solvents potentially useful in LTFCs will be studied. More precisely, the behavior of metal electrodes against the hydrogen electrode and oxygen reduction reactions in PILs based on ammonium and imidazolate cations with anions from strong acid will be analyzed, aiming to detect configurational (cation substituents, anion type) and physicochemical (acid-base balances, hydrophobicity) effects on the mechanisms of these reactions.

- Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en castellano)

Materiales anódicos y catódicos, electrodos bimetálicos, polímeros de coordinación, líquidos iónicos, electrodos difusores de gases

- Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en inglés)

Anodic and cathodic materials, bimetallic electrodes, coordination polymers, ionic liquids, gas diffusion electrodes

2 – Datos del Director/ar del Proyecto

- Nombre y Apellido

José Luis Fernández

- Unidad Académica

Instituto de Química Aplicada del Litoral (IQAL, CONICET - UNL)

- Teléfono oficial de contacto

(0342) 4571164 int. 2519

-Teléfono móvil de contacto

342 154389082

-E-mail del Director/a del Proyecto

jlfernan@fq.unl.edu.ar

DATOS RESULTANTES DE LA EJECUCIÓN DEL PROYECTO

-Describe la toma de muestras / datos a realizar

Los datos a recabar abarcarán mayormente los siguientes grupos:

- Datos relacionados con condiciones óptimas de obtención de electrodos bimetálicos: Los mismos consistirán en una recopilación de información composicional (datos espectroscópicos obtenidos con difractómetros y espectrómetros), morfológica (micrografías obtenidas empleando microscopías) y electroquímica (condiciones de electrodeposición, curvas corriente-potencial, y voltamperogramas obtenidos empleando potenciostatos e instrumentos relacionados) que apunten a identificar parámetros de fabricación óptimos para la obtención de los electrodos buscados. Serán obtenidos en el laboratorio de Electroquímica del IQAL.

- Técnicas operatorias para la síntesis de electrodos no metálicos (complejos de coordinación), electrodos difusores de gases (membranas porosas), y electrolitos basados en líquidos iónicos: Estos datos consistirán en un listado de condiciones experimentales ordenadas que hayan resultado luego de las sucesivas experiencias para lograr obtener los componentes indicados previamente que cumplan los requisitos requeridos en el proyecto. Serán obtenidos en los laboratorios de Electroquímica y de Química Orgánica del IQAL.

- Datos de performance de los materiales desarrollados como electrodos y electrolitos: Se efectuará mayormente a través de la toma de datos de densidad de corriente en función del potencial y del tiempo, obtenidos empleando variadas técnicas electroquímicas mediante el uso de potenciostatos e instrumentos electroquímicos relacionados. Serán obtenidos en el laboratorio de Electroquímica del IQAL.

- Modelos teóricos para la simulación de estructuras moleculares, de mecanismos de reacción, y de transporte de masa: Estos datos serán obtenidos mediante simulaciones digitales efectuadas en diferentes plataformas computacionales específicas para cada caso, en los laboratorios de Electroquímica y de Química Orgánica del IQAL.



<p>– Datos: ¿Existe alguna razón por la cual los datos declarados no deban ser puestos a disposición de la comunidad/ser de acceso público? (marque X)</p>	
X	NO
	SI. Elija una de las opciones:
	a) Se encuentra en evaluación de protección por medio de patentes
	b) No se inició el proceso de evaluación de patentabilidad, pero podría ser protegible
	c) Existe un contrato con un tercero que impide la divulgación
	d) Otro. Justifique.
<p>– Período de Confidencialidad: Es el período durante el cual los datos no deberían ser publicados, contado a partir del momento de la toma de los mismos. El período máximo para la no publicación es de 5 (CINCO) años posteriores a su obtención. Luego de este periodo, los datos estarán disponibles para la comunidad/serán de acceso público. Si Ud. considera que este tiempo es insuficiente, y necesita prorrogar el período de confidencialidad, indique sus motivos y la cantidad de años adicionales que consideran necesarios. Marque su opción con "X".</p>	
X	1 (UN) año
	2 (DOS) años
	3 (TRES) años
	4 (CUATRO) año
	5 (CINCO) años
	Otro.
	Motivos: Se requiere un periodo prudencial de no más de 1 año antes de hacer pública la información obtenida para alcanzar una adecuada maduración de la interpretación de la misma.

Fernández, José Luis