



# VII Encuentro Argentino de Materia Blanda

## Selectividad de spin inducida por quiralidad: efecto en la selectividad de la oxidación de agua

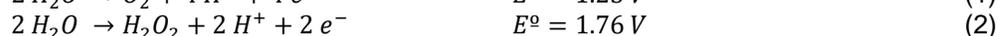
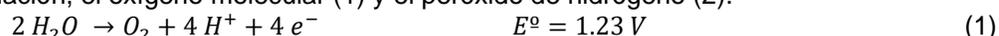
Vensaus Priscila<sup>1,2,\*</sup>, Liang Yunchang<sup>2</sup>, Soler Illia Galo J. A. A.<sup>1</sup>, Lingenfelder Magalí<sup>2</sup>.

<sup>1</sup> Instituto de Nanosistemas, Universidad Nacional de San Martín, Av. 25 de Mayo 1021, 1650 San Martín, Argentina.

<sup>2</sup> Max Planck-EPFL Laboratory for Molecular Nanoscience and Technology and IPHYS, École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), 1015 Lausanne, Switzerland

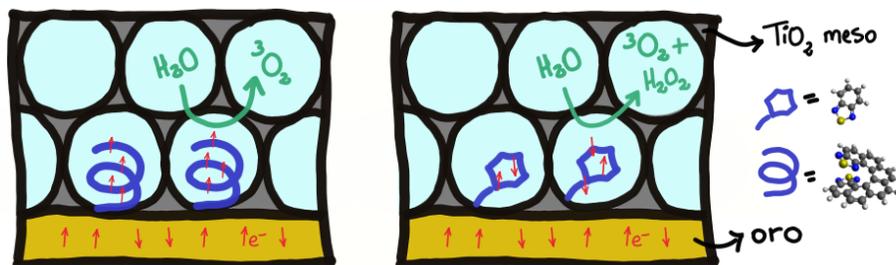
\* [pvensaus@unsam.edu.ar](mailto:pvensaus@unsam.edu.ar)

La oxidación de agua es una reacción de alto interés científico y económico, dado que es una parte fundamental en los procesos de fotosíntesis artificial, a partir de los cuales se obtiene un combustible mediante la reducción electroquímica de especies de interés. Por ejemplo, mediante reducción de dióxido de carbono para formar hidrocarburos, o bien reducción de agua para dar hidrógeno. Típicamente, la oxidación del agua provee los electrones necesarios para que ocurra el proceso. Hay dos productos posibles de esta oxidación, el oxígeno molecular (1) y el peróxido de hidrógeno (2).



A partir de estudios teóricos, se ha propuesto que parte del alto sobrepotencial necesario para la formación de oxígeno se debe a las restricciones de spin necesarias para la formación del oxígeno en su estado fundamental de triplete.[1] A su vez, recientemente se ha demostrado que la transmisión de electrones a través de moléculas quirales es dependiente del spin [2], en un efecto denominado selectividad de spin inducida por quiralidad (*chiral-induced spin selectivity, CISS*). En el caso de fotoánodos recubiertos con moléculas quirales, se vio que se reduce significativamente el sobrepotencial requerido para la evolución de oxígeno [3], lo cual se atribuye a este efecto.

En este trabajo, se buscó estudiar el efecto CISS en mayor profundidad, analizando la influencia de la estructura molecular superficial en la reacción de oxidación de agua confinada en mesoporos. Se utilizaron electrodos de dióxido de titanio mesoporoso depositados sobre oro, que fueron modificados con una molécula quiral ([8]-heliceno) y un análogo no-quiral (benzoditiazol). Se comparó la producción de oxígeno respecto de la formación de agua oxigenada en ambas muestras, para verificar el efecto de la selectividad de spin. Se observó que las películas tratadas con la molécula quiral disminuyen la proporción de agua oxigenada formada, favoreciendo la evolución de oxígeno.



[1] Chrétien, Steeve, and Horia Metiu. *The Journal of chemical physics*, **2008**, 129(7), 074705

[2] Naaman, Ron, Yossi Paltiel, and David H. Waldeck. *Accounts of Chemical Research*, **2020**, 53(11), 2659-2667.

[3] Mtangi, Wilbert, et al. 2015, 6(24), 4916-4922.