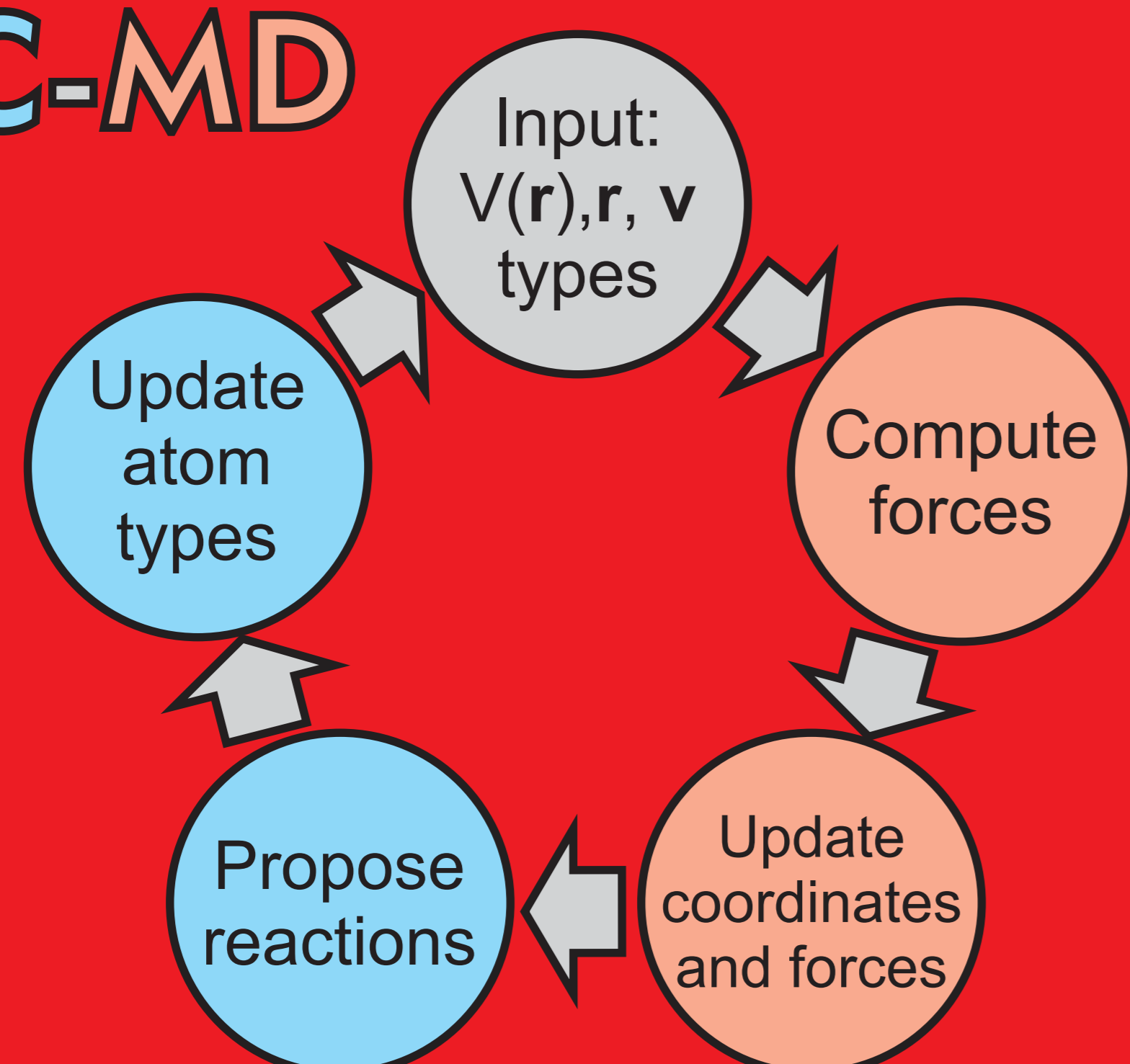


El estudio de burbujas superficiales utilizando electrodos nanométricos ha permitido la producción electroquímica de nanoburbujas individuales de H₂, O₂ y N₂ sobre nanodiscos de platino. Una vez nucleada la burbuja el sistema alcanza un equilibrio dinámico donde la corriente residual no depende del voltaje aplicado. La producción electroquímica de gas alimenta la nanoburbuja, compensando la pérdida de gas por difusión. Utilizando simulaciones híbridas de dinámica molecular con Monte Carlo cinético (kMC-MD) y un modelado cinético analítico analizamos como el equilibrio dinámico de difusión limita la corriente, resultando en la insensibilidad de la respuesta corriente-potencial a lo largo de múltiples geometrías y tamaños.

kMC-MD

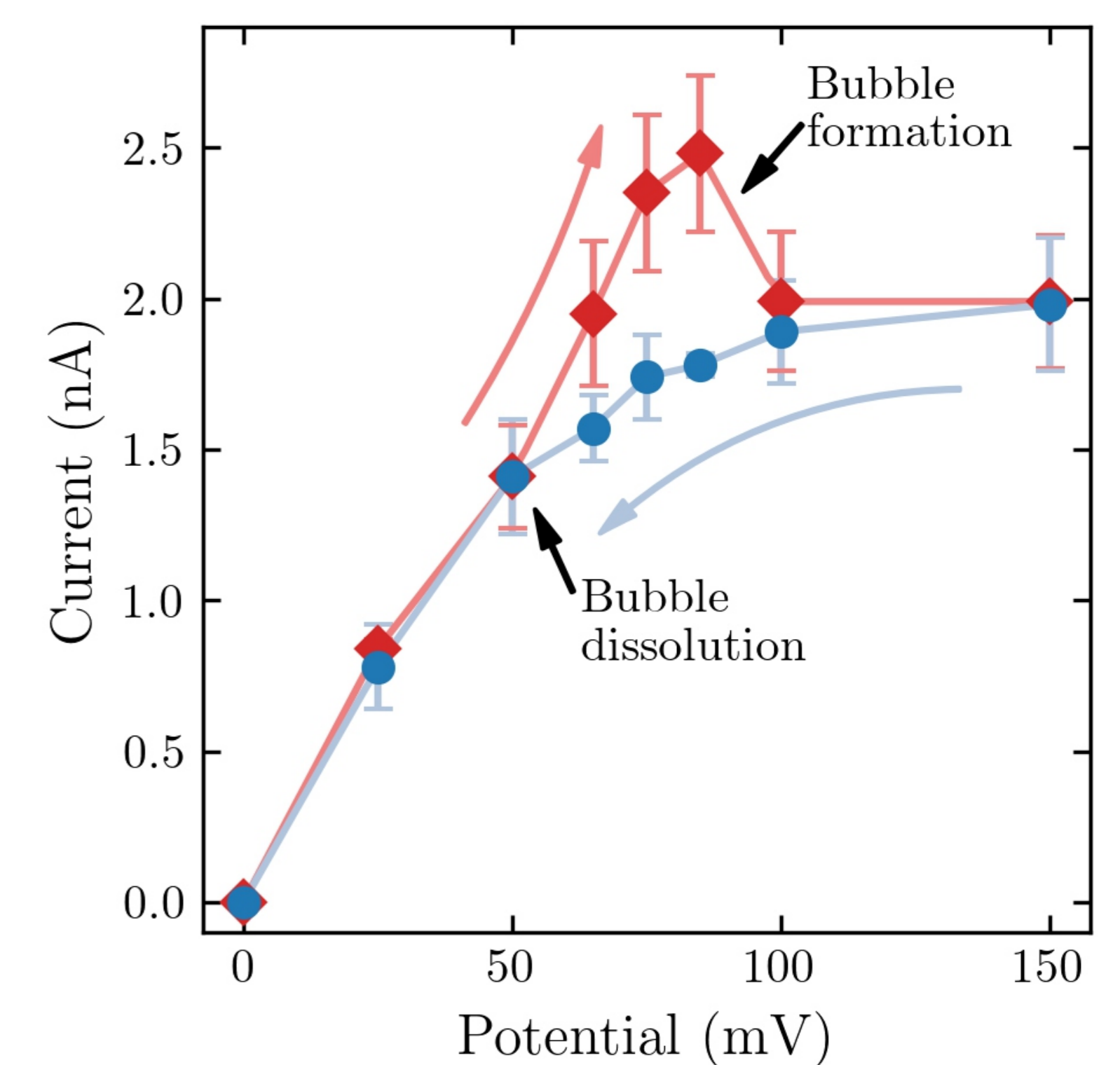


Nuestras simulaciones utilizan potenciales de grano grueso para describir el solvente y las partículas de gas.

El algoritmo procede intercalando pasos de dinámica molecular y Monte Carlo cinético.

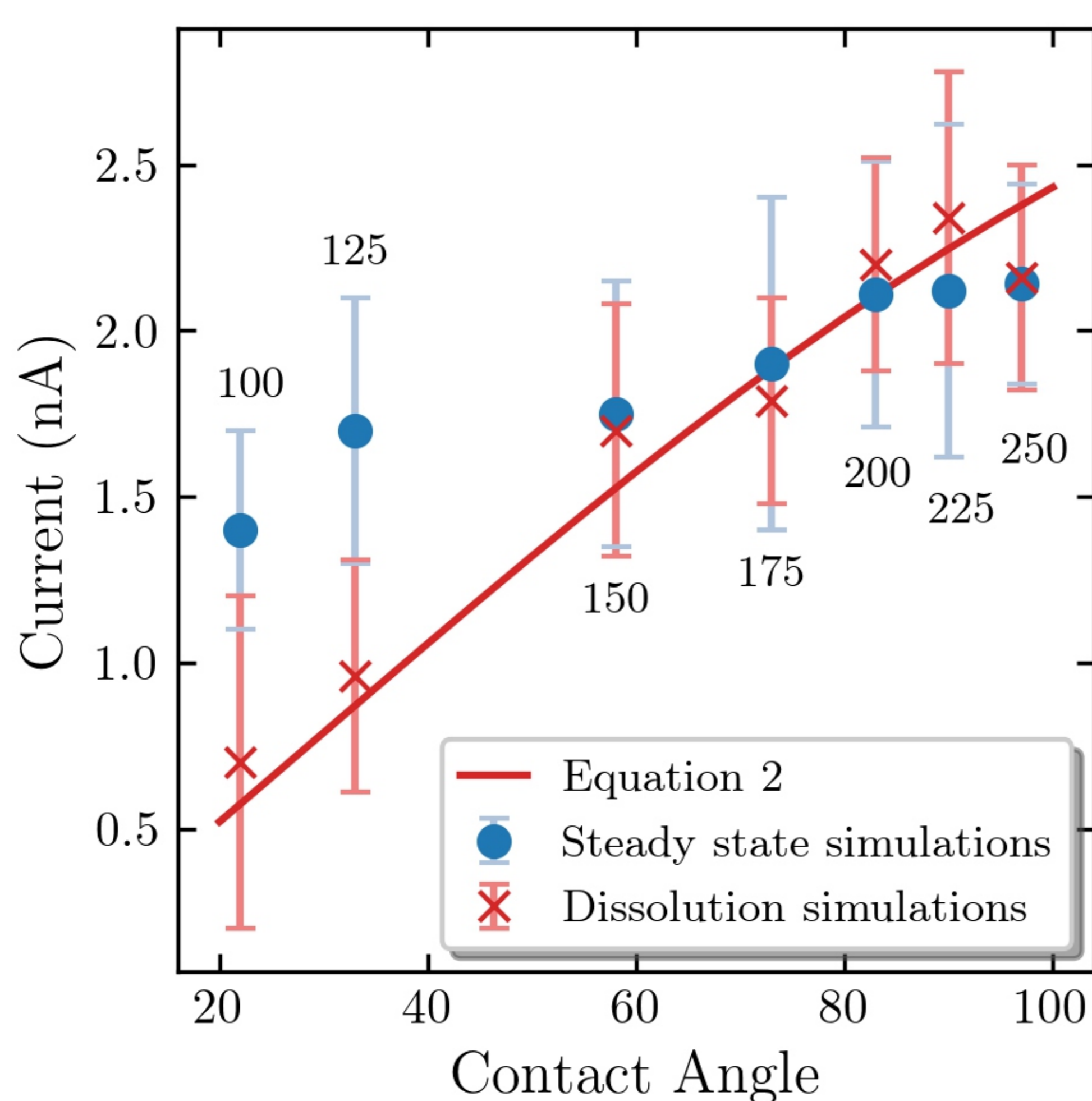
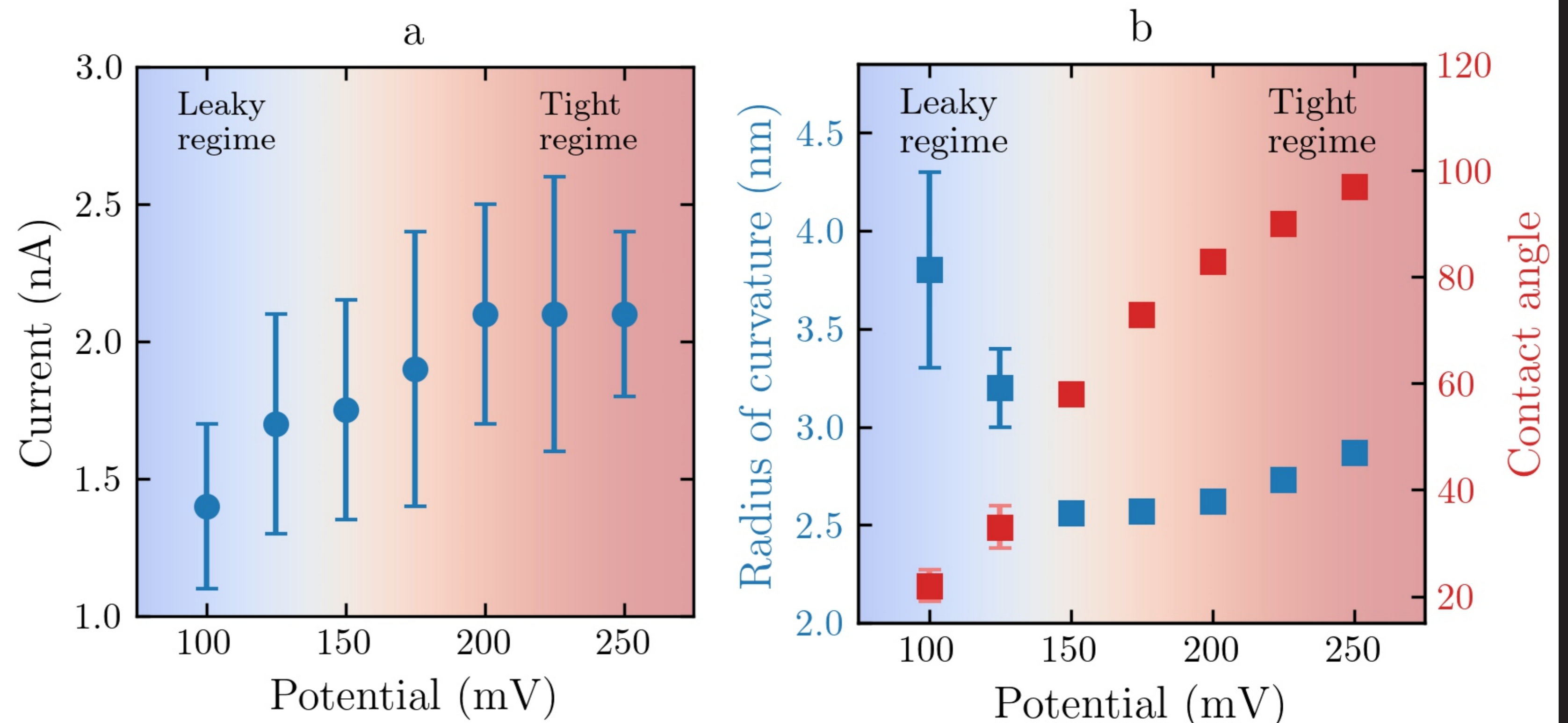
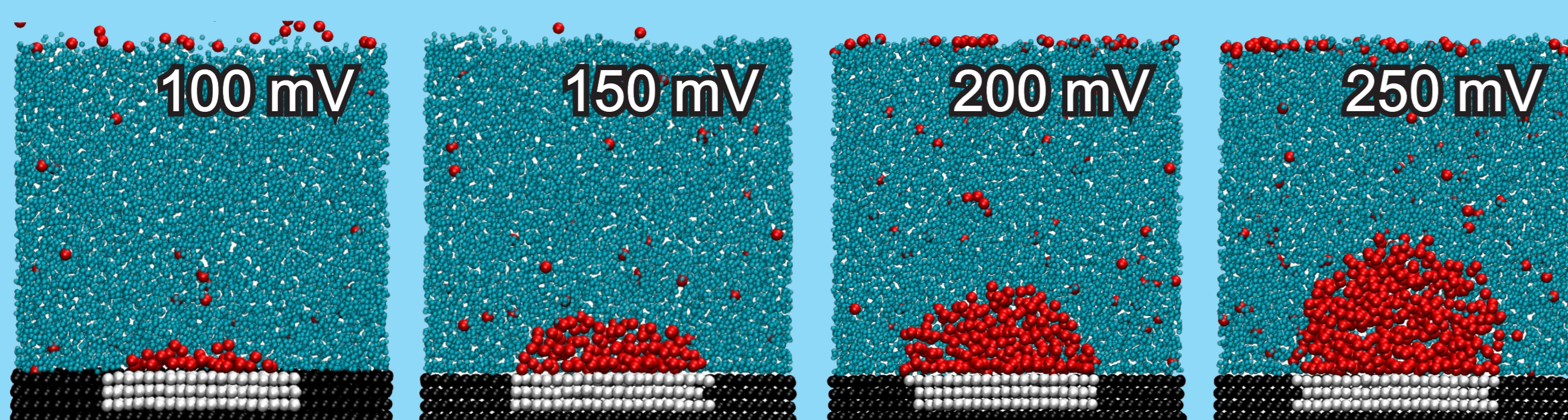
El paso de dinámica molecular actualiza las posiciones y velocidades de las partículas.

El paso de Monte Carlo cinético es el responsable de simular los eventos reactivos donde el solvente se interconvierte con el gas.



Resultados

La respuesta del sistema permite distinguir dos regímenes:
 A bajos potenciales el gas puede escapar directamente hacia la solución.
 A potenciales altos toda la producción de gas alimenta a la burbuja.



Expresión analítica para la corriente residual

La expresión para el flujo masico de gas que escapa de la burbuja (dW/dt) en el límite cuasi-estático es

$$\frac{dW}{dt} = -\pi DR(C_R - C_\infty)f(\theta) \quad (1)$$

Sabiendo que el flujo de gas se encuentra balanceado con la producción electroquímica es posible encontrar una expresión para la corriente. Para ello asumimos que la presión interna de la burbuja está gobernada por la presión de Laplace y que la ley de Henry se cumple para este sistema y obtenemos

$$\frac{dW}{dt} = -2\pi D\sigma K_H f(\theta) \quad (2)$$

Utilizando la ley de Fick para la conversión electroquímica de esta masa de gas es posible predecir las tendencias de las corrientes observadas en las simulaciones

Referencias

- ¹Langmuir, 2013, 29 (35), pp 11169–11175
- ²J. Phys. Chem. B, 2009, 113 (13), pp 4008–4016
- ³Langmuir, 2008, 24 (6), pp 2850–2855

Conclusiones

El tamaño de la burbuja se ajusta hasta alcanzar el equilibrio dinámico con la generación de gas.

La velocidad de escape del gas es insensible al radio de curvatura, lo cual origina los valores robustos de corriente residual observados experimentalmente.

Nuestro modelo predice la dependencia de la corriente con el ángulo de contacto, sin embargo la funcionalidad del ángulo de contacto con el potencial aplicado sigue siendo desconocida