



Application Note AN-DV-001

Soluciones DropView para el tratamiento de resultados electroquímicos y ópticos

Cuatro herramientas de software clave para el procesamiento y análisis de datos de curvas

La electroquímica, la espectroscopía y la espectroelectroquímica (SEC) son técnicas muy utilizadas en muchos campos. Sin embargo, las curvas de datos que se obtienen a partir de estos análisis son muy variadas, y no todos los picos electroquímicos y bandas espectroscópicas pueden medirse con los mismos procedimientos.

Esta nota de aplicación revela cuatro herramientas incluidas en los softwares DropView 8400 y DropView SPELEC para facilitar la medición y el análisis de las

curvas y los datos recopilados. La selección del procedimiento adecuado puede ayudar al proceso de medición y así facilitar el análisis de los resultados.

Se explican en detalle las siguientes opciones de medida: automeasurement (medida automática), set on curve measurement (medida ajustada a la curva), set free measurement (medida ajustada libremente) y set step measurement (medida ajustada en puntos concretos).

INSTRUMENTACIÓN Y SOFTWARE

Las curvas que se muestran en este estudio se han obtenido con SPELEC y un instrumento μ Stat 400 controlado por el software DropView SPELEC y DropView 8400, respectivamente.

El SPELEC es un instrumento completamente integrado disponible para mediciones electroquímicas, ópticas y espectroelectroquímicas en varios rangos espectrales diferentes. El instrumento μ Stat 400 es un bipotenciostato/galvanostato portátil.

DropView SPELEC es un software avanzado y

dedicado que adquiere datos espectroelectroquímicos en tiempo real e incluye herramientas específicas para el procesamiento y análisis de datos. El software DropView 8400 proporciona las respuestas electroquímicas e incluye diferentes herramientas para el procesamiento de datos.

En las siguientes secciones, se dilucidarán exhaustivamente diferentes herramientas para medir señales electroquímicas y espectroscópicas.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

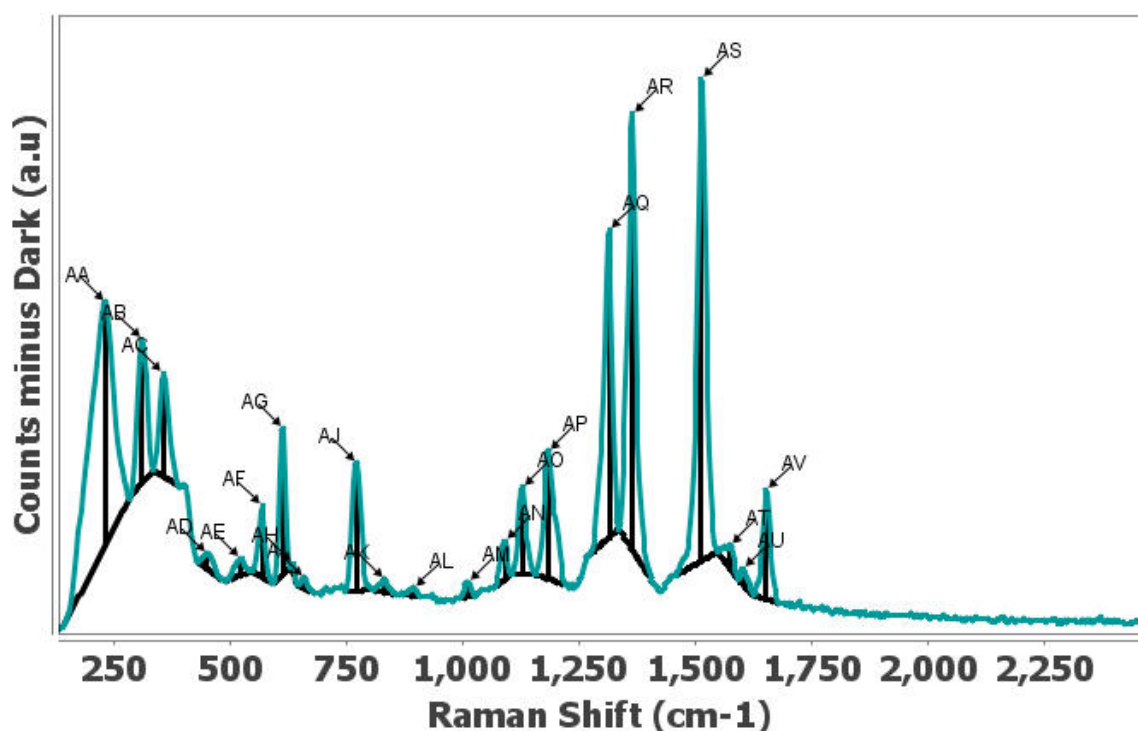
Se han implementado cuatro de las herramientas disponibles en los softwares DropView 8400 y DropView SPELEC para realizar mediciones en curvas electroquímicas y espectroscópicas, como se muestra a continuación:

automedida  (icono de programa)

Esta herramienta es adecuada para mediciones automáticas en una curva. Utilizar esta herramienta es

tan fácil como seleccionar la curva electroquímica o espectroscópica sobre la que se va a aplicar y luego seleccionar el *automedida* herramienta.

Figura 1 muestra el resultado de la medida de un espectro Raman utilizando la herramienta de automedida. Además, como se muestra en la figura, esta herramienta reconoce todas las bandas y muestra la información asociada a cada señal Raman.



 AQ
 Height: 600.683 counts (a.u.)
 Width: 20.867 cm⁻¹
 Peak position: 1314.495 cm⁻¹
 Area: 23773.278 counts (a.u.)*cm⁻¹
 Peak Area: 13055.26 counts (a.u.)*cm⁻¹
 Start: 1272.568 cm⁻¹
 End: 1335.304 cm⁻¹

 AR
 Height: 852.339 counts (a.u.)
 Width: 20.619 cm⁻¹
 Peak position: 1364.853 cm⁻¹
 Area: 29397.476 counts (a.u.)*cm⁻¹
 Peak Area: 18843.652 counts (a.u.)*cm⁻¹
 Start: 1335.304 cm⁻¹
 End: 1408.79 cm⁻¹

Figure 1. Espectro Raman medido por la herramienta predeterminada de medición automática y la información relacionada con las bandas AQ y AR.

Además, en **Figura 1**, se pueden percibir numerosas bandas en la curva espectroscópica, pero la *automedida* La herramienta ofrece un procedimiento rápido para obtener la información asociada a todos los picos, en lugar de tener que medir manualmente cada banda por separado.

Además, la configuración predeterminada de esta herramienta se puede modificar para optimizar la medición automática según la forma de la curva seleccionada.

Establecer en la medición de la curva  (icono de

programa)

Esta opción permite a los usuarios medir el pico entre dos puntos seleccionados en la curva. No es necesario definir con precisión estos dos puntos, ya que la herramienta buscará automáticamente el punto de la curva más cercano al área seleccionada.

En **Figura 2**, se dibuja una línea recta entre los dos puntos seleccionados (300 nm y 550 nm) y se crea una línea vertical donde la altura es igual al valor máximo de la banda UV/VIS.

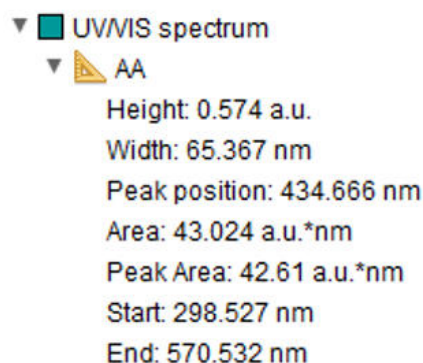
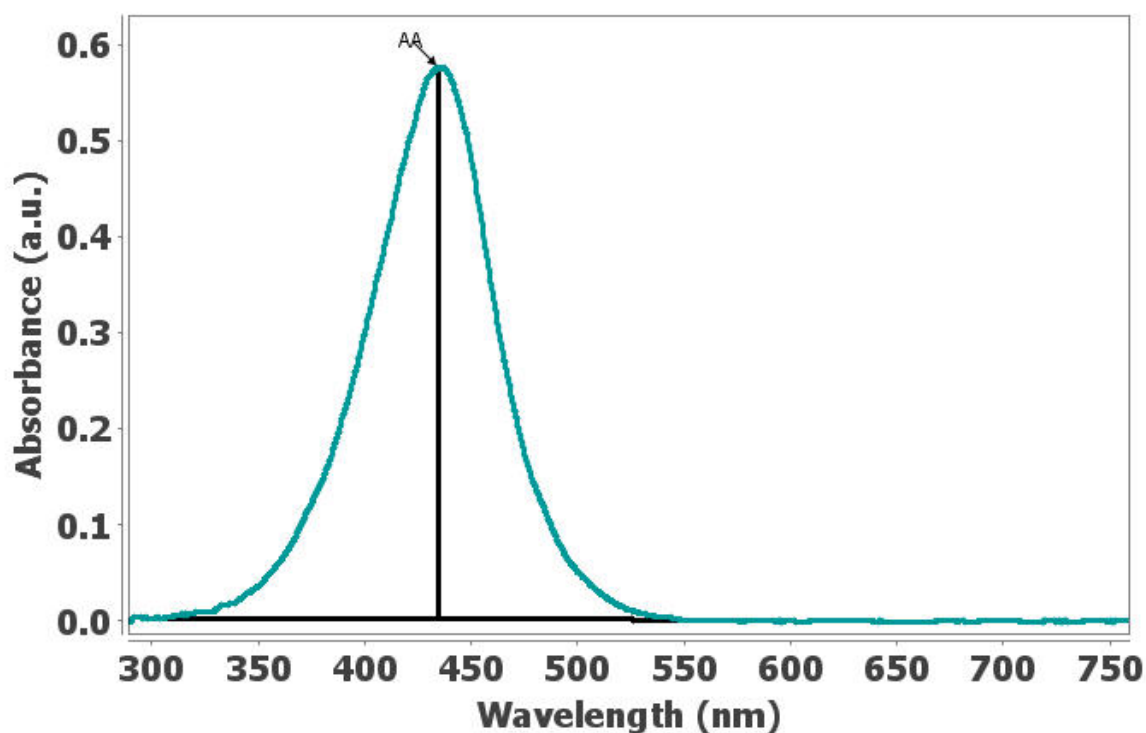


Figure 2. Banda UV/VIS medida por la herramienta de medición de curva establecida y la información relacionada que se muestra para esta banda de absorción.

Establecer medición libre  (icono de software)
Establecer medición libre actúa de manera similar al caso del *establecer en la medición de la curva* pero se diferencia en que los puntos seleccionados no se ajustan automáticamente a los puntos más cercanos de la curva. Por lo tanto, estos dos puntos deben

definirse con precisión cuando se utiliza el *establecer la medición libre* herramienta.

En **figura 3**, el pico de oxidación se ha medido en un voltamograma de barrido lineal considerando la corrección de la corriente capacitiva inicial.

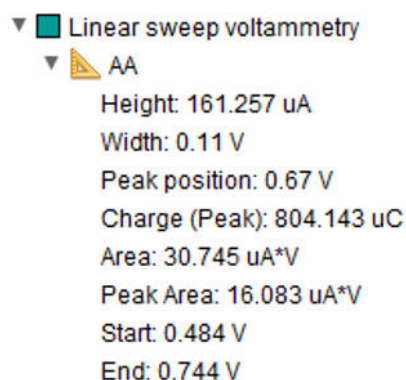
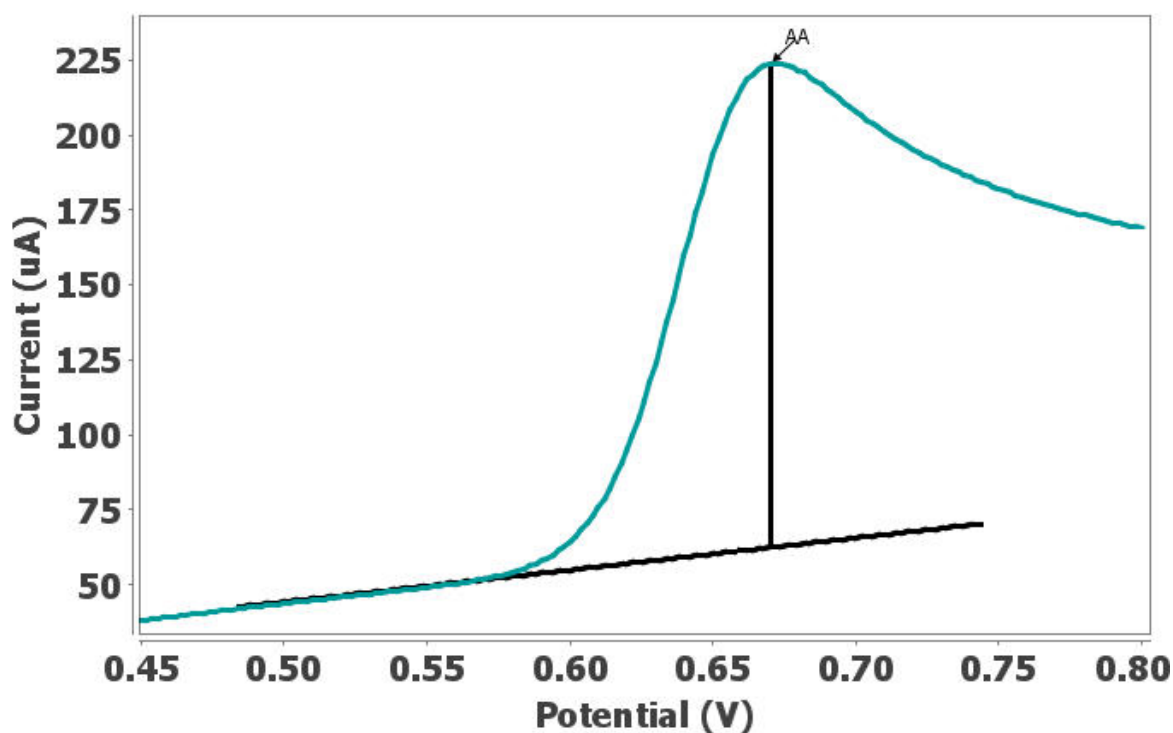
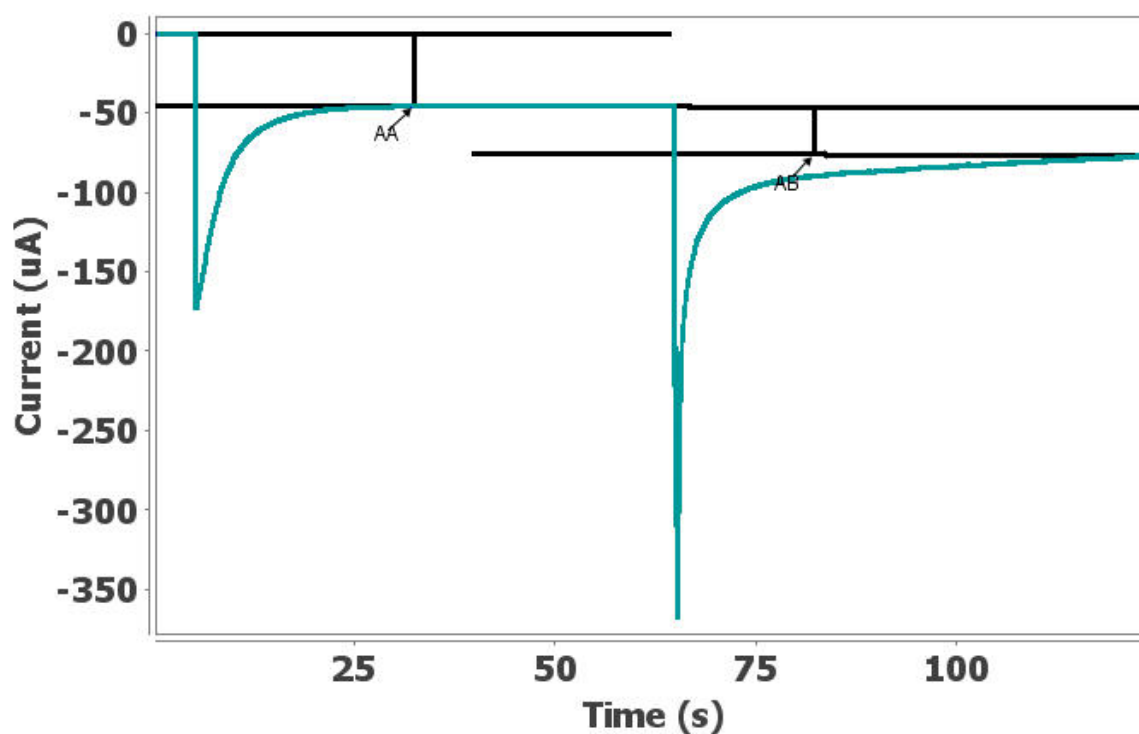


Figure 3. Medición del pico de oxidación por la herramienta de medición libre en un voltamograma de barrido lineal, incluida la información relacionada con este pico anódico.

Establecer medida de paso  (icono de programa)

Adecuado para medir «pasos», el conjunto *medida de pasos* La herramienta permite a los usuarios seleccionar tres puntos principales en la curva para medir. Para marcar el primer punto, se tomará el punto más cercano de la curva seleccionada, al igual que con el *establecer en la medición de la curva* herramienta. Por el contrario, los siguientes dos puntos deben seleccionarse con precisión, al igual

que con el *establecer la medición libre* herramienta. Como se muestra en **Figura 4**, los *establecer la medida del paso* se aplica a la respuesta electroquímica obtenida por un procedimiento de detección amperométrica multipulsada. Esta herramienta dibuja una línea base recta entre los dos primeros puntos seleccionados, mientras que el tercer punto define una línea paralela con respecto a la línea base.



▼	■	Multipulsed Amperometric Detection
▼	▲	AA
		Height: -45.233 uA
		Area: 3193.935 uA*s
		Peak Area: 3183.147 uA*s
		Start: 0.4 s
		End: 64.3 s
▼	▲	AB
		Height: -29.923 uA
		Area: 6599.962 uA*s
		Peak Area: 2673.03 uA*s
		Start: 39.9 s
		End: 124.6 s

Figure 4. Medidas realizadas por la herramienta de medida set step tras detección amperométrica multipulso, mostrando la información obtenida para este análisis.

Los softwares DropView 8400 y DropView SPELEC son soluciones específicas para la monitorización de procesos electroquímicos y, en este último caso, también de eventos ópticos y espectroelectroquímicos. Además, ofrecen herramientas avanzadas para el procesamiento y análisis de datos.

Esta Nota de aplicación ha explicado cómo utilizar cuatro de estas herramientas que están enfocadas a la medición de curvas electroquímicas y ópticas, acompañadas de ejemplos específicos. Las opciones seleccionadas discutidas incluyen: *medición automática*, *ajuste de medición de curva*, *ajuste de medición libre*, y *establecer la medida del paso*.

Estos diferentes procedimientos permiten a los usuarios seleccionar la herramienta que proporcione

la medición más precisa de las curvas para cada caso en particular.

CONTACT

Metrohm Hispania
Calle Aguacate 15
28044 Madrid

mh@metrohm.es

CONFIGURACIÓN



Aparato UV-VIS SPELEC (200-900 nm)

SPELEC es un aparato para realizar medidas espectroelectroquímicas. Combina en un solo instrumento una fuente de luz, un bipotenciostato-galvanostato y un espectrómetro (gama de longitud de onda de UV/VIS: 200-900 nm) e incluye un software específico para espectroelectroquímica que permite la sincronización de experimentos electroquímicos y ópticos.