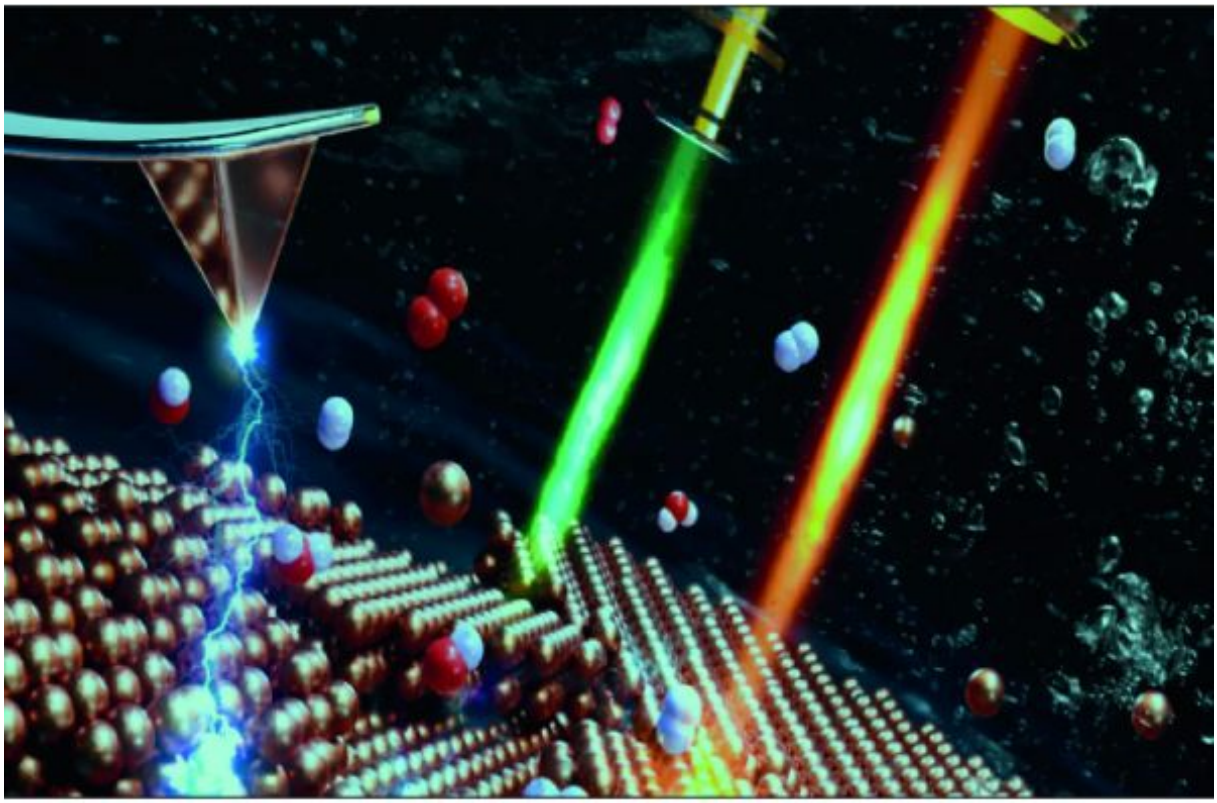


Un enfocament holistic per millorar els estudis d'interficies electroquimiques

Una nova revisio publicada a Nature Review Chemistry analitz com la combinacio d'exploracions a nivell fotonic, electronic quimic i mecanic pot ajudar a esclarir aspectes fins ara no resolt de les interficies electroquimiques (IE), un dels principi subjacents de la conversio i l'emmagatzematge d'energia.

March 05, 2024

La interficie electroquimica, que normalment compren la unio entre una superficie polaritzada, un liquid (electrolit) i reactius dissolts, rau al centre de diverses tecnologies de fabricacio i emmagatzematge d'energia. Aquestes abasten des de processos madurs i ben establerts com l'electrolisi cloroalcalina, fins a bateries, piles de combustible i electrolisi de l'aigua per a la produccio de combustibles solars.

La IE impulsa les transformacions atomiques i moleculars que determinen el rendiment d'aquests dispositius. No obstant, el seu disseny predictiu (necessari per permetre mes avencos en el rendiment) s'enfronta a un desafiament important degut al seu caracter altament dinamic, un tret inseparable d'aquest proces. La IE pot canviar drasticament mentre

esta operant, des de canvis dinamics intrinsecs relacionats amb la transferencia d'electrons i energia, i les conseqüents reaccions; fins a una extensa reconstruccio de la superficie, am canvis en la configuracio i estructura electronica inclosos

Per tant, avaluar la IE en condicions de treball rellevants (normalment anomenades 'in situ' 'operand', depenent de com de prop estiguin les condicions de la realitat operacional) e crucial per comprendre aquells principis que governen les reaccions provocades en l interficie i permetre un disseny amb fonament

Tradicionalment, la IE s'ha estudiat aplicant diferents metodes que podrien investigar algu aspecte especific (per exemple, estructura o composicio) amb una resolucio determinada proporcionant nomes coneixements parcials i incomplets d'aquestes interficies

En aquest context, e**Dr. Lu Xia** i el **Prof. Dr. F. Pelayo Garcia de l'ICFO**, juntament amb l'ex ICFOnian Dr. Ernest Pastor, lideren un consorci multidisciplinari que revisa les perspectives de combinar diferents sondes fotoniques, electroniques, quimiques i mecaniques, per oferir una visio mes completa de la IE. La revisio, publicada a Nature reviews chemistry, destaca les oportunitats d'aquestes combinacions per superar les limitacions espectroscopiques tradicionals i tancar la bretxa existent entre el modelatge teoric, els sistemes ideals i les interficies de treball -permetent en ultima instancia el disseny predictiu de la IE i de dispositius amb un rendiment millorat.

De les tecniques individuals a un enfocament complementari i teoric

L'article comenca exposant les tecniques analitiques individuals que s'han utilitzat en el passat per provar dispositius d'electrolisi. Es descriuen les propietats que cadascun pot extreure, els seus avantatges, aixi com els seus inconvenients. Tal i com s'ha suggerit abans, tots ells porten associat un obstacle comu: cada enfocament nomes pot atorgar acces a un conjunt limitat de propietats de la IE, proporcionant unicament una imatge parcial de tot el mecanisme.

De fet, les IE son molt heterogenies, intricades i dinamiques, cosa que fa que els estudis basats en un sol metode siguin insuficients per comprendre-les en tota la seva complexitat. A la revisio, els investigadors reconeixen el poder de combinar enfocaments independents per resoldre millor diferents propietats de la IE i evitar interpretacions enganyoses que, de l'altra manera, poden no ser detectades.

i¿½Reconeixent els esforcos actuals de recerca fragmentats -sovint aillats di s d'enfocaments metodologics especifics- ens vam proposar esborrar aquestes divisio s mostrant el poder de combinar diverses tecniques analitiques i coneixements teoric . Aquesta estrategia te com a objectiu fomentar la col·laboracio interdisciplinaria i la innova io al campi¿½, explica Lu Xia. Segons l'autor, abordar la complexitat de la IE de manera holi tica combinant multiples tecniques (simultaniament o seqüencialment) i inform nt-se teoricament es fonamental per al desenvolupament d'aquest camp. La revisio ofereix una llarga llista d'enfocaments complementaris i detalla la sev

area d'activitat. Per exemple, combinar 'Electrochemical Impedance Spectroscopy' amb 'S rface Enhanced Raman Spectroscopy' (dues metodologies experimentals generalment apl cades per separat) i integrar-les amb simulacions basades en 'Density Functional Theory (una descripcio teorica de la IE), pot donar lloc a una millor comprensio de diversos pro essos (transferencia de carrega i quimica) que tenen lloc a la interficie. D'aquesta manera ta be es pot predir la formacio d'especies intermedies (elements transitoris que es formen al llarg d'una reaccio electroquimica), les quals poden indicar per que certes interacci ns es desenvolupen eficientment o no. Un cop revelades aquestes caracteristiqu s, un coneixement mes profund dels mecanismes de reaccio dins la IE esdeve pos ible. En un futur proper, altres cientifics podran utilitzar el seu treball per desenvolupar, opti itzar i guiar el disseny d'una amplia gamma de tecnologies electroquimiques, incloses pi es de combustible, bateries, electrolitzadors per a la produccio d'hidrogen i si temes electroquimics de reduccio de CO2. Per fer-ho, cal estandarditzar nous sistemes experimentals basats en el seu principi de complementarietat. En cas d'implementar-se, aquest procediment podria permetre que una base mes amplia d'investigadors contribueixi a aquest camp. Ara com ara, l'equip ja ha proporcionat un punt de referencia que els ajudara a identificar metodes utils i complementaris adequats per investigar la IE en accio.

Referencia bibliografica

Pastor, E., Lian, Z., Xia, L. et al. Complementary probes for the electrochemical interface. Nat Rev Chem (2024). https://doi.org/10.1038/s41570-024-00575-5

Peu de foto: Il·lustracio d'exploracions fotoniques, electroniques, quimiques i mecanique complementaries per a desentranyar els complexos mecanismes a les interficie electroquimiques (EI), inclosos els enllacos, els intermediaris i la transformacio de reactius nivell molecular o atomic.