



## Un enfocament holístic per millorar els estudis d'interfícies electroquímiques

Una nova revisió publicada a Nature Review Chemistry analitzant com la combinació d'exploracions a nivell fòtonic, electrònic químic i mecànic pot ajudar a esclarir aspectes fins ara no resolts de les interfícies electroquímiques (IE), un dels principis subjacents de la conversió i l'emmagatzematge d'energia.

March 05, 2024

La interfície electroquímica, que normalment comprèn la unió entre una superfície polaritzada, un líquid (electrolit) i reactius dissolts, rau al centre de diverses tecnologies de fabricació i emmagatzematge d'energia. Aquestes abasten des de processos madurs i ben establerts com l'electròlisi cloroalcalina, fins a bateries, piles de combustible i electròlisi de l'aigua per a la producció de combustibles solars.

La IE impulsa les transformacions atòmiques i moleculars que determinen el rendiment d'aquests dispositius. No obstant, el seu disseny predictiu (necessari per permetre més avenços en el rendiment) s'enfronta a un desafiament important degut al seu caràcter altament dinàmic, un tret inseparable d'aquest procés. La IE pot canviar dràsticament mentre

esta operant, des de canvis dinàmics intrínsecs relacionats amb la transferència d'electrons i energia, i les conseqüents reaccions; fins a una extensa reconstrucció de la superfície, amb canvis en la configuració i estructura electrònica 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) és crucial per comprendre aquells principis que governen les reaccions provocades en l'interfície i permetre un disseny amb fonament

Tradicionalment, la IE s'ha estudiat aplicant diferents mètodes que podrien investigar algun aspecte específic (per exemple, estructura o composició) amb una resolució determinada proporcionant només coneixements parcials i incomplets d'aquestes interfícies

En aquest context, el **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 fòniques, electròniques, químiques i mecàniques, per oferir una visió més completa de la IE. La revisió, publicada a *Nature reviews chemistry*, destaca les oportunitats d'aquestes combinacions per superar les limitacions espectroscòpiques tradicionals i tancar la bretxa existent entre el modelatge teòric, els sistemes ideals i les interfícies de treball -permetent en última instància el disseny predictiu de la IE i de dispositius amb un rendiment millorat.

### **De les tècniques individuals a un enfocament complementari i teòric**

L'article comença exposant les tècniques analítiques individuals que s'han utilitzat en el passat per provar dispositius d'electrolisi. Es descriuen les propietats que cadascun pot extreure, els seus avantatges, així com els seus inconvenients. Tal i com s'ha suggerit abans, tots ells porten associat un obstacle comú: cada enfocament només pot atorgar accés a un conjunt limitat de propietats de la IE, proporcionant únicament una imatge parcial de tot el mecanisme.

De fet, les IE són molt heterogènies, intricades i dinàmiques, cosa que fa que els estudis basats en un sol mètode siguin insuficients per comprendre-les en tota la seva complexitat. A la revisió, 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.

Reconeixent els esforços actuals de recerca fragmentats -sovint aïllats dins d'enfocaments metodològics específics- ens vam proposar esborrar aquestes divisions mostrant el poder de combinar diverses tècniques analítiques i coneixements teòrics. Aquesta estratègia té com a objectiu fomentar la col·laboració interdisciplinària i la innovació al camp, explica Lu Xia. Segons l'autor, abordar la complexitat de la IE de manera holística combinant múltiples tècniques (simultàniament o seqüencialment) i informar-se teòricament és fonamental per al desenvolupament d'aquest camp. La revisió ofereix una llarga llista d'enfocaments complementaris i detalla la seva

area d'activitat. Per exemple, combinar 'Electrochemical Impedance Spectroscopy' amb 'Surface Enhanced Raman Spectroscopy' (dues metodologies experimentals generalment aplicades per separat) i integrar-les amb simulacions basades en 'Density Functional Theory' (una descripció teòrica de la IE), pot donar lloc a una millor comprensió de diversos processos (transferència de càrrega i química) que tenen lloc a la interfície. D'aquesta manera també es pot predir la formació d'espècies intermèdies (elements transitoris que es formen al llarg d'una reacció electroquímica), les quals poden indicar per què certes interaccions es desenvolupen eficientment o no. Un cop revelades aquestes característiques, un coneixement més profund dels mecanismes de reacció dins la IE esdevé possible. En un futur proper, altres científics podran utilitzar el seu treball per desenvolupar, optimitzar i guiar el disseny d'una àmplia gamma de tecnologies electroquímiques, incloses piles de combustible, bateries, electrolitzadors per a la producció d'hidrogen i sistemes electroquímics de reducció de CO<sub>2</sub>. 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 més àmplia d'investigadors contribueixi a aquest camp. Ara com ara, l'equip ja ha proporcionat un punt de referència que els ajudarà a identificar mètodes útils i complementaris adequats per investigar la IE en acció.

### Referència bibliogràfica

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·lustració d'exploracions fòtoniques, electròniques, químiques i mecàniques complementaries per a desentranyar els complexos mecanismes a les interfícies electroquímiques (EI), inclosos els enllaços, els intermediaris i la transformació de reactius a nivell molecular o atòmic.