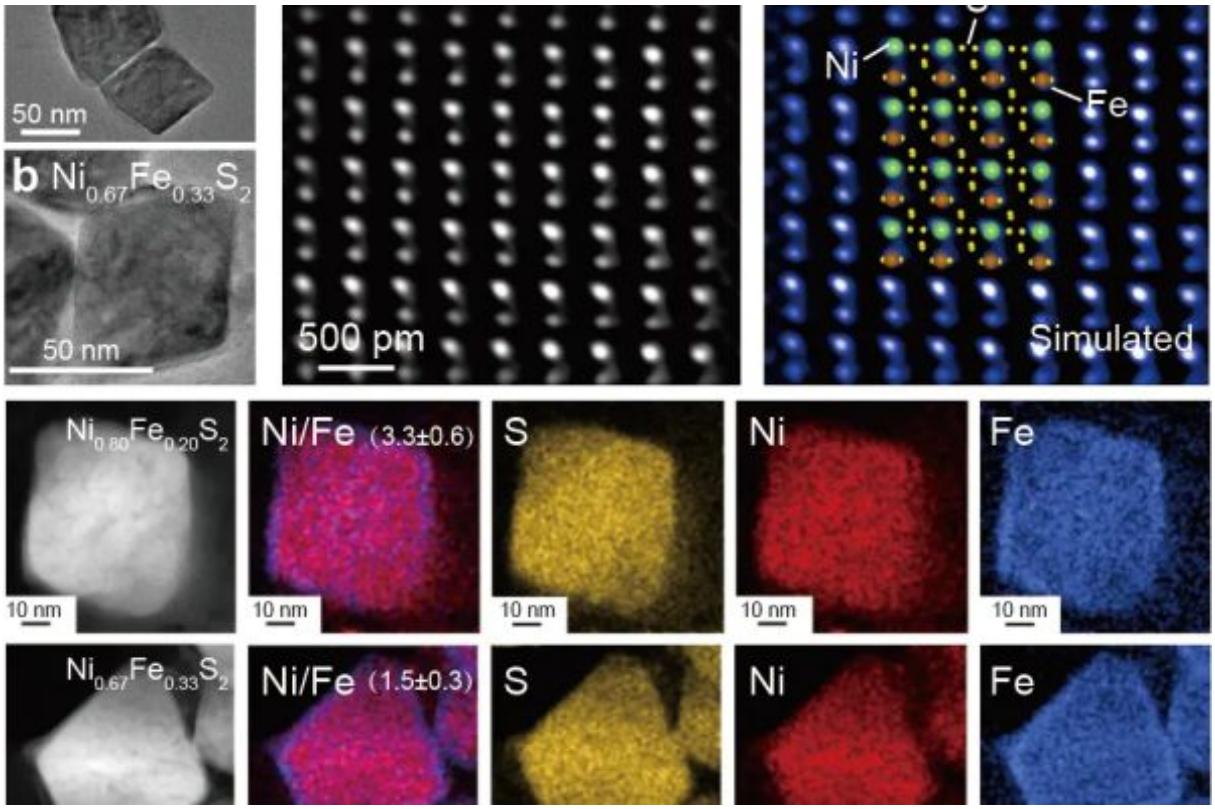

Mateix inici, finals diferents: nous protocols d'activacio de catalitzadors a mida milloren la fiabilitat en la generacio d'hidrogen verd

Un equip d'investigadors internacionals revela la importancia de dissenyar protocols d'activacio a mida per prevenir la degradacio dels catalitzadors en l'electrolisi de l'aigua. El seu enfocament, que monitora l'evolucio del material en temps real, permet obtenir catalitzadors amb major durabilitat, estabilitat i reproductibilitat en comparacio amb allo aconseguit mitjancant protocols tradicionals.

March 03, 2025

Les tecnologies de descarbonitzacio s'implementen cada cop mes per combatre el canvi climatic. En moltes d'aquestes tecnologies hi ha reaccions electroquimiques involucrades a l'hora de generar combustibles i productes quimics no contaminants mitjancant electricitat renovable (per exemple, hidrogen verd). No obstant, aquestes reaccions sovint son

ineficients per si soles i requereixen un electrocatalitzador per a accelerar-les.
El disseny predictiu de catalitzadors actius es veu desafiat per la seva transformacio quimica i estructural durant la reaccio, fet que tambe agreuja la seva degradacio i en limita l'estabilitat. Aquest efecte es especialment notable en la reaccio d'evolucio de l'oxigen (REO) dins de l' electrolisi de l'aigua, que es la meitat de la reaccio total necessaria per produir hidrogen verd.
En general, el material inicial no esta completament optimitzat per a la catalisi; es diu que es troba en una forma de **precatalitzador**. Per millorar la seva capacitat d'impulsar la reaccio electroquimica, cal un proces d'activacio. "Penseu en els precatalitzadors com a talents ocults i en els protocols d'activacio com els programes d'entrenament que els converteixen en campions. El protocol d'activacio adequat els fara destacar; el protocol incorrecte pot desaprofitar el seu potencial", explica el Dr. Lu Xia, investigador de l'ICFO i ex-investigador de Jülich, qui estudia com explotar l'electroquimica per a aplicacions d'emmagatzematg d'energia. Tradicionalment, pero, els processos d'activacio han estat ignorats i s'apliquen d manera estandard, sense tenir en compte de quin material esta fet el precatalitzador inicial Ara, un esforc conjunt entre eForschungszentrum Jülich (dirigit pel Dr. Meital Shviro, ara a NREL), la Universitat de Bayreuth i els investigadors de l'ICFO, el **Dr. Lu Xia**, el **Dr. Kaiwen Wang**, el **Dr. Tengyu Chen**, el **Dr. Kaiqi Zhao**, **Ranit Ram**, la **Dra. Barbara Polesso** i el **Dr. Anku Guha**, liderats pel **Prof. Dr. F. Pelayo Garcia de Arquer**, ha demostrat que el paper dels protocols d'activacio personalitzats es, de fet, fonamental. **L'equip ha proposat un protocol d'activacio que ofereix control sobre la deterioracio en temps real i ha demostrat que aquest millora la fiabilitat, activitat i estabilitat** d'aquells catalitzadors emprats en les REO de l'electrolisi de l'aigua. Significativament, el proces s'ha implementat **en condicions industrialment rellevants**. D'altra banda, han demostrat que protocols d'activacio inadequats condueixen a una degradacio irreversible del catalitzador, la qual cosa complica el control i la reproductibilitat. En l'estudi, publicat en Nature Materials, han col·laborat moltes altre institucions internacionals, a saber, la Universitat de Chongqing, la Universitat Noruega d Ciencia i Tecnologia, la Universitat Tecnologica de Pequin, la Universitat Oceanica d Zhejiang, la ETH Zürich, la Freie Universitat Berlin, la Universitat Tsinghua i la Universitat e Ciencia i Tecnologia Electronica de la Xin
. La col·laboracio multidisciplinaria en l'equip va ser clau per a l'exit de l'estudi. Per exemp e, Forschungszentrum Jülich es va centrar en el disseny i caracteritzacio de catalitzadors la Universitat de Chongqing va ser responsable de les simulacions teoriques per a predi el comportament d'activacio, i l'ICFO va exercir un paper central a l'hora de proposar i lid rar les estrategies de programacio dels precatalitzadors, aixi com el monitoratge experime tal de com els catalitzadors canviaven durant els protocols d'activacio. "Aquesta sine gia multidisciplinaria va permetre una comprensio profunda del comportament del precatalitzador, impulsant el desenvolupament d'una estrategia personalitzada p r a aconseguir una electrolisi d'alt rendiment", comparteix el Dr. Xia, primer coautor de l'est

Un protocol d'activacio apropiat condueix a catalitzadors de major rendiment

Al final, les observacions van validar els models teorics, que havien predit amb precisio l'evolucio del precatalitzador durant l'operacio. En comparacio amb les tecniques tradicionals, **la combinacio de teoria i experimentacio va aconseguir un major control sobre el proces d'oxidacio, una dissolucio minima del catalitzador i una estabilitat a llarg termini del material**.

En concret, els investigadors van posar en practica el seu metode amb materials prometedors per a catalitzar la REO en un electrolitzador d'aigua funcionant en entorns industrials rellevants. Despres de centenars d'hores d'activitat, van observar una millora triple en la durada del catalitzador abans de dissoldre's completament quan van utilitzar el seu protocol d'activacio en lloc de l'estandard.

"Els dos enfocaments son fonamentalment diferents, cosa que explica per que els resultats difereixen", explica la Dra. Xia. "L'activacio convencional, com la voltametria ciclica, indueix canvis a la superficie de manera no controlada, fet que degrada els catalitzadors i en perjudica l'estabilitat. En el nostre cas, aprofitem una plataforma de precatalitzadors, guiada per models teorics i coneixements adquirits durant la propia operacio, per controlar amb precisio l'activacio, minimitzant la dissolucio i garantint un rendiment fiable", afegeix l'investigador.

En conjunt, aquest enfocament redueix la bretxa entre la comprensio teorica i l'aplicacio practica, la qual cosa permet el desenvolupament de catalitzadors altament confiables per a l'electrolisi de l'aigua. A mes, l'estudi destaca la importancia dels protocols d'activacio a l'hora de garantir una activacio, estabilitat i reproductibilitat optimes. El següent pas natura seria aplicar el protocol a altres reaccions electroquimiques i investigar com els afecta. Un altra direccio de recerca seria perfeccionar el protocol per a tenir en compte arees d material mes grans, fenomens de transport i altres subtileses entorn l'electrolisi de l'aigua Aixo permetria ampliar l'estrategia a electrolitzadors de major escala, acostant l'objectiu fina de la comercialitzacio de dispositius una passa mes

Referencia:

Xia, L., Gomes, B.F., Jiang, W. et al. Operando-informed precatalyst programming towards reliable high-current-density electrolysis. Nat. Mater. (2025).
DOI: https://doi.org/10.1038/s41563-025-02128-7

Agraiments:

L.X and M.S acknowledge the access to the infrastructure at the Ernst Ruska-Centre, Forschungszentrum Jülich. L.X and B.F.G. thank DESY (Hamburg, Germany), a member of th

Helmholtz Association, for the provision of experimental facilities. Parts of this research wer carried out at PETRA III and we would like to thank Wolfgang A. Caliebe for assistance i using the P64 beamline. Beamtime was allocated for proposal I-20221247. B.F.G. and C.R acknowledge Federal Ministry of Education and Research (BMBF) under the funding code Live XAS (Grant 05K22WC1), HighHy (Grant 03SF0689B), L. G. and X. Z. acknowledge th Fundamental Research Funds for the Central Universities (2024IAIS-QN002), and the Nationa Natural Science Foundation of China (52471196 and 12347101). L.X. and F.P.G.A. than CEX2019-000910-S [MCIN/AEI/10.13039/501100011033], Fundacio Cellex, Fundaci Mir-Puig, and Generalitat de Catalunya through CERCA, and the La Caixa Foundatio [100010434, E.U. Horizon 2020 Marie Sk?odowska-Curie grant agreement 847648] European Union's Horizon 2023 research and innovation programme under the Mari Sklodowska-Curie grant agreement 101150688, and the European Union (NASCENT 101077243).