



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

Un equip d'investigadors internacionals revela la importància de dissenyar protocols d'activació a mida per prevenir la degradació dels catalitzadors en l'electrolisi de l'aigua. El seu enfocament, que monitora l'evolució del material en temps real, permet obtenir catalitzadors amb major durabilitat, estabilitat i reproductibilitat en comparació amb al·lo aconseguit mitjançant protocols tradicionals.

March 03, 2025

Les tecnologies de descarbonització s'implementen cada cop més per combatre el canvi climàtic. En moltes d'aquestes tecnologies hi ha reaccions electroquímiques involucrades a l'hora de generar combustibles i productes químics no contaminants mitjançant electricitat renovable (per exemple, hidrogen verd). No obstant, aquestes reaccions sovint són

ineficients per si soles i requereixen un [electrocatalitzador](#) per a accelerar-les.

El disseny predictiu de catalitzadors actius es veu desafiat per la seva transformació química i estructural durant la reacció, fet que també agreuja la seva degradació i en limita l'estabilitat. Aquest efecte és especialment notable en la reacció d'evolució de l'oxigen (REO) dins de l'[electrolisi](#) de l'aigua, que és la meitat de la reacció total necessària per produir hidrogen verd.

En general, el material inicial no està completament optimitzat per a la catalisi; es diu que es troba en una forma de **precatalitzador**. Per millorar la seva capacitat d'impulsar la reacció electroquímica, cal un procés d'activació. "Penseu en els precatalitzadors com a talents ocults i en els protocols d'activació com els programes d'entrenament que els converteixen en campions. El protocol d'activació adequat els farà destacar; el protocol incorrecte pot desapropiar el seu potencial", explica el Dr. Lu Xia, investigador de l'ICFO i ex-investigador de Jülich, qui estudia com explotar l'electroquímica per a aplicacions d'emmagatzematge d'energia. Tradicionalment, però, els processos d'activació han estat ignorats i s'apliquen de manera estàndard, sense tenir en compte de quin material està fet el precatalitzador inicial. Ara, un esforç conjunt entre el [Forschungszentrum 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'activació personalitzats és, de fet, fonamental. **L'equip ha proposat un protocol d'activació que ofereix control sobre la deterioració 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 procés s'ha implementat **en condicions industrialment rellevants**. D'altra banda, han demostrat que protocols d'activació inadequats condueixen a una degradació irreversible del catalitzador, la qual cosa complica el control i la reproductibilitat. En l'estudi, publicat en *Nature Materials*, han col·laborat moltes altres institucions internacionals, a saber, la Universitat de Chongqing, la Universitat Noruega de Ciència i Tecnologia, la Universitat Tecnològica de Pequín, la Universitat Oceànica de Zhejiang, la ETH Zürich, la Freie Universität Berlin, la Universitat Tsinghua i la Universitat de Ciència i Tecnologia Electrònica de la Xina.

La col·laboració multidisciplinària en l'equip va ser clau per a l'èxit de l'estudi. Per exemple, Forschungszentrum Jülich es va centrar en el disseny i caracterització de catalitzadors, la Universitat de Chongqing va ser responsable de les simulacions teòriques per a predir el comportament d'activació, i l'ICFO va exercir un paper central a l'hora de proposar i liderar les estratègies de programació dels precatalitzadors, així com el monitoratge experimental de com els catalitzadors canviaven durant els protocols d'activació. "Aquesta sinèrgia multidisciplinària va permetre una comprensió profunda del comportament del precatalitzador, impulsant el desenvolupament d'una estratègia personalitzada per 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 precisió l'evolució del precatalitzador durant l'operació. En comparació amb les tècniques tradicionals, **la combinació de teoria i experimentació va aconseguir un major control sobre el procés d'oxidació, una dissolució mínima del catalitzador i una estabilitat a llarg termini del material.**

En concret, els investigadors van posar en pràctica el seu mètode amb materials prometedors per a catalitzar la REO en un electrolitzador d'aigua funcionant en entorns industrials rellevants. Després 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'activació en lloc de l'estàndard.

"Els dos enfocaments són fonamentalment diferents, cosa que explica per què els resultats difereixen", explica la Dra. Xia. "L'activació convencional, com la voltametria cíclica, induïx canvis a la superfície 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 teòrics i coneixements adquirits durant la pròpia operació, per controlar amb precisió l'activació, minimitzant la dissolució i garantint un rendiment fiable", afegeix l'investigador.

En conjunt, aquest enfocament redueix la bretxa entre la comprensió teòrica i l'aplicació pràctica, la qual cosa permet el desenvolupament de catalitzadors altament fiables per a l'electròlisi de l'aigua. A més, l'estudi destaca la importància dels protocols d'activació a l'hora de garantir una activació, estabilitat i reproductibilitat òptimes. El següent pas natural seria aplicar el protocol a altres reaccions electroquímiques i investigar com els afecta. Una altra direcció de recerca seria perfeccionar el protocol per a tenir en compte àrees de material més grans, fenòmens de transport i altres subtils efectes entorn l'electròlisi de l'aigua. Això permetria ampliar l'estratègia a electrolitzadors de major escala, acostant l'objectiu final de la comercialització de dispositius una passa més.

#### **Referència:**

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 were carried out at PETRA III and we would like to thank Wolfgang A. Caliebe for assistance in 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 the Fundamental Research Funds for the Central Universities (2024IAIS-QN002), and the National Natural Science Foundation of China (52471196 and 12347101). L.X. and F.P.G.A. thank CEX2019-000910-S [MCIN/AEI/10.13039/501100011033], Fundació Cellex, Fundació Mir-Puig, and Generalitat de Catalunya through CERCA, and the La Caixa Foundation [100010434, E.U. Horizon 2020 Marie Skłodowska-Curie grant agreement 847648] European Union's Horizon 2023 research and innovation programme under the Marie Skłodowska-Curie grant agreement 101150688, and the European Union (NASCENT 101077243).