



Un enfoque holístico para mejorar los estudios de interfaces electroquímicas

Una nueva revisión publicada en Nature Review Chemistry analiz como la combinación de exploraciones a nivel fotonico electronico, quimico y mecanico puede ayudar a arrojar luz sobr aspectos hasta ahora no resueltos de las interface electroquímicas (IE), uno de los principios subyacentes en l conversion y el almacenamiento de energia.

March 05, 2024

La interfaz electroquímica, que normalmente comprende la unión entre una superficie polarizada, un líquido (electrolito) y reactivos disueltos, yace en el núcleo de varias tecnologías de fabricación y almacenamiento de energía. Estas abarcan desde procesos maduros y bien establecidos como la electrolisis cloroalcalina, hasta baterías, pilas de combustible y electrolisis del agua para la producción de combustibles solares.

La IE impulsa las transformaciones atómicas y moleculares que determinan el rendimiento de estos dispositivos. Sin embargo, su diseño predictivo (necesario para permitir mayores avances en el rendimiento) se enfrenta a un importante desafío debido a su carácter

altamente dinámico, un rasgo inseparable de dicho proceso. La IE puede cambiar drásticamente mientras esta operando, desde cambios dinámicos intrínsecos relacionados con la transferencia de electrones y energía, y las consecuentes reacciones; hasta una extensa reconstrucción de la superficie, con cambios en la configuración y estructura electrónica incluidos.

Por lo tanto, evaluar la IE en condiciones de trabajo relevantes (normalmente denominadas 'in situ' y 'operando', dependiendo de que tan cerca estén las condiciones de la realidad operacional) es crucial para comprender aquellos principios que gobiernan las reacciones provocadas en la interfaz y permitir un diseño con fundamento.

Tradicionalmente, la IE se ha estudiado aplicando diferentes métodos que podrían investigar algún aspecto específico (por ejemplo, estructura o composición) con una resolución determinada, proporcionando solo conocimientos parciales e incompletos de estas interfaces.

En este contexto, el **Dr. Lu Xia** y el **Prof. Dr. F. Pelayo Garcia del ICFO**, junto con el ex ICFOiano **Dr. Ernest Pastor**, lideran un consorcio multidisciplinar que revisa las perspectivas de combinar diferentes sondas fónicas, electrónicas, químicas y mecánicas, para ofrecer una visión más completa de la IE. La revisión, publicada en *Nature reviews chemistry*, destaca las oportunidades de tales combinaciones para superar las limitaciones espectroscópicas tradicionales y cerrar la brecha existente entre el modelado teórico, los sistemas ideales y las interfaces de trabajo -permitiendo en última instancia el diseño predictivo de la IE y de dispositivos con un rendimiento mejorado.

De las técnicas individuales a un enfoque complementario y teórico

El artículo comienza exponiendo las técnicas analíticas individuales que se han utilizado en el pasado para probar dispositivos de electrolisis. Se describen las propiedades que cada uno de ellos puede extraer, sus ventajas y sus inconvenientes. Como se ha sugerido antes, todos ellos llevan asociado un obstáculo común: cada enfoque solo puede otorgar acceso a un conjunto limitado de propiedades de la IE, proporcionando únicamente una imagen parcial de todo el mecanismo.

De hecho, las IE son muy heterogéneas, intrincadas y dinámicas, lo que hace que los estudios basados en un solo método sean insuficientes para comprenderlas en toda su complejidad. En la revisión, los investigadores reconocen el poder de combinar enfoques independientes para resolver mejor diferentes propiedades de la IE y evitar interpretaciones engañosas que, de la otra manera, pueden no ser detectadas.

Reconociendo los actuales esfuerzos de investigación fragmentados -a menudo aislados dentro de enfoques metodológicos específicos- nos propusimos tender puentes entre estas divisiones mostrando el poder de combinar varias técnicas analíticas y conocimientos teóricos. Esta estrategia tiene como objetivo fomentar la colaboración interdisciplinaria y a innovación en el campo, explica Lu Xia. Según el autor, abordar la complejidad de la I

de manera holística combinando múltiples técnicas (simultánea o secuencialmente) e informándose teóricamente es fundamental para el desarrollo de este campo. La revisión ofrece una larga lista de enfoques complementarios y detalla su área de actividad. Por ejemplo, combinar 'Electrochemical Impedance Spectroscopy' con 'Surface Enhanced Raman Spectroscopy' (dos metodologías experimentales generalmente aplicadas por separado) e integrarlas con simulaciones basadas en 'Density Functional Theory' (una descripción teórica de la IE), puede desbloquear una mejor comprensión de varios procesos (transferencia de carga y química) que tienen lugar en la interfaz. De este modo también se pueden predecir la formación de especies intermedias (elementos transitorios que se forman a lo largo de una reacción electroquímica), las cuales pueden indicar por qué ciertas interacciones se desarrollan de manera eficiente o no. Una vez reveladas estas características, un conocimiento más profundo de los mecanismos de reacción en la IE se vuelve posible. En un futuro próximo, otros científicos podrán utilizar su trabajo para desarrollar, optimizar y guiar el diseño de una amplia gama de tecnologías electroquímicas, incluidas pila de combustible, baterías, electrolizadores para la producción de hidrógeno y sistemas electroquímicos de reducción de CO₂. Para ello, es necesario estandarizar nuevos sistemas experimentales basados en su principio de complementariedad. De implementarse, este procedimiento podría permitir que una base más amplia de investigadores contribuya a este campo. Por ahora, el equipo ya ha proporcionado un punto de referencia que les ayude a identificar métodos útiles y complementarios adecuados para investigar la IE en acción.

Referencia bibliográfica

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>

Pie de foto: Ilustración de exploraciones fónicas, electrónicas, químicas y mecánicas complementarias para desentrañar los complejos mecanismos en las interfaces electroquímicas (EI), incluidos los enlaces, los intermediarios y la transformación de reactivos a nivel molecular o atómico.