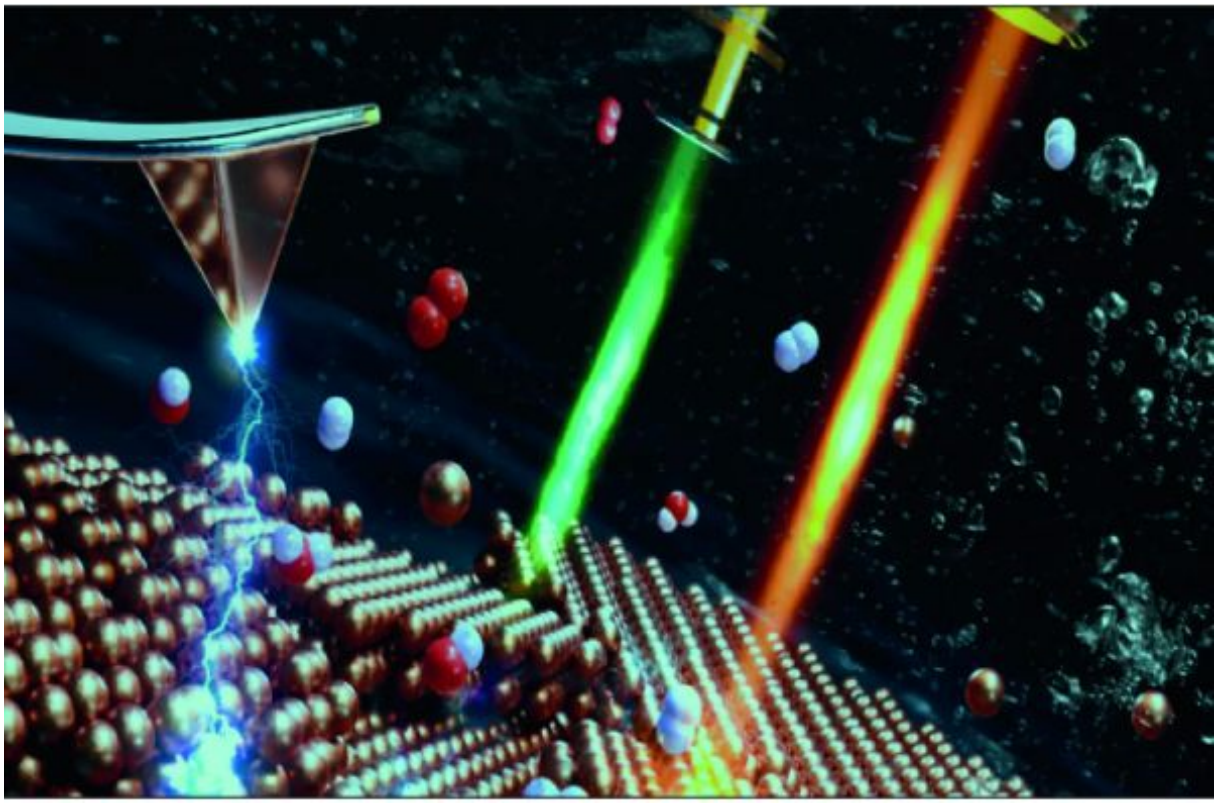


Un enfoque holistico para mejorar los estudios de interfaces electroquimicas

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

March 05, 2024

La interfaz electroquimica, que normalmente comprende la union entre una superficie polarizada, un liquido (electrolito) y reactivos disueltos, yace en el nucleo de varias tecnologias de fabricacion y almacenamiento de energia. Estas abarcan desde procesos maduros y bien establecidos como la electrolisis cloroalcalina, hasta baterias, pilas de combustible y electrolisis del agua para la produccion de combustibles solares.
La IE impulsa las transformaciones atomicas y moleculares que determinan el rendimiento de estos dispositivos. Sin embargo, su diseno predictivo (necesario para permitir mayores avances en el rendimiento) se enfrenta a un importante desafio debido a su caracter

altamente dinamico, un rasgo inseparable de dicho proceso. La IE puede cambiar drasticamente mientras esta operando, desde cambios dinamicos intrinsecos relacionados con la transferencia de electrones y energia, y las consecuentes reacciones; hasta una extensa reconstruccion de la superficie, con cambios en la configuracion y estructura electronica incluidos.
Por lo tanto, evaluar la IE en condiciones de trabajo relevantes (normalmente denominadas ?in situ' y ?operando', dependiendo de que tan cerca esten las condiciones de la realidad operacional) es crucial para comprender aquellos principios que gobiernan las reacciones provocadas en la interfaz y permitir un diseno con fundamento.
Tradicionalmente, la IE se ha estudiado aplicando diferentes metodos que podrian investigar algun aspecto especifico (por ejemplo, estructura o composicion) con una resolucion 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 ICFOnian Dr. Ernest Pastor, lideran un consorcio multidisciplinar que revisa las perspectivas de combinar diferentes sondas fotonicas, electronicas, quimicas y mecanicas, para ofrecer una vision mas completa de la IE. La revision, publicada en Nature reviews chemistry, destaca las oportunidades de tales combinaciones para superar las limitaciones espectroscopicas tradicionales y cerrar la brecha existente entre el modelado teorico, los sistemas ideales y las interfaces de trabajo -permitiendo en ultima instancia el diseno predictivo de la IE y de dispositivos con un rendimiento mejorado.

De las tecnicas individuales a un enfoque complementario y teorico
El articulo comienza exponiendo las tecnicas analiticas 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 obstaculo comun: cada enfoque solo puede otorgar acceso a un conjunto limitado de propiedades de la IE, proporcionando unicamente una imagen parcial de todo el mecanismo.
De hecho, las IE son muy heterogeneas, intrincadas y dinamicas, lo que hace que los estudios basados en un solo metodo sean insuficientes para comprenderlas en toda su complejidad. En la revision, los investigadores reconocen el poder de combinar enfoques independientes para resolver mejor diferentes propiedades de la IE y evitar interpretaciones enganosas que, de la otra manera, pueden no ser detectadas.
i¿½Reconociendo los actuales esfuerzos de investigacion fragmentados -a menudo aislad s dentro de enfoques metodologicos especificos- nos propusimos tender puentes entre est s divisiones mostrando el poder de combinar varias tecnicas analiticas y conocimient s teoricos. Esta estrategia tiene como objetivo fomentar la colaboracion interdisciplinaria y a innovacion en el campoi¿½, explica Lu Xia. Segun el autor, abordar la complejidad de la I

de manera holistica combinando multiples tecnicas (simultanea o secuencialment
) e informandose teoricamente es fundamental para el desarrollo de este ca
po. La revision ofrece una larga lista de enfoques complementarios y detalla su area de activi
ad. Por ejemplo, combinar ?Electrochemical Impedance Spectroscopy' con ?Surface Enha
ced Raman Spectroscopy' (dos metodologias experimentales generalmente aplicadas
por separado) e integrarlas con simulaciones basadas en ?Density Functional Theory'
una descripcion teorica de la IE), puede desbloquear una mejor comprension de varios proc
sos (transferencia de carga y quimica) que tienen lugar en la interfaz. De este modo tambie
se pueden predecir la formacion de especies intermedias (elementos transitorios que se fo
man a lo largo de una reaccion electroquimica), las cuales pueden indicar por que cie
tas interacciones se desarrollan de manera eficiente o no. Una vez reveladas e
tas caracteristicas, un conocimiento mas profundo de los mecanismos de reaccion en la I
se vuelve posi
le. En un futuro proximo, otros cientificos podran utilizar su trabajo para desarrollar, optimiz
r y guiar el diseno de una amplia gama de tecnologias electroquimicas, incluidas pila
de combustible, baterias, electrolizadores para la produccion de hidrogeno y sist
mas electroquimicos de reduccion de CO2. Para ello, es necesario estandarizar nuevos sistemas
experimentales basados ??en su principio de complementariedad. De implementarse, este
procedimiento podria permitir que una base mas amplia de investigadores contribuya a este
campo. Por ahora, el equipo ya ha proporcionado un punto de referencia que les ayudara a
identificar metodos utiles y complementarios adecuados para investigar la IE en accion.

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

Pie de foto: Ilustracion de exploraciones fotonicas, electronicas, quimicas y mecanicas complementarias para desentranar los complejos mecanismos en las interfaces electroquimicas (EI), incluidos los enlaces, los intermediarios y la transformacion de reactivos a nivel molecular o atomico.