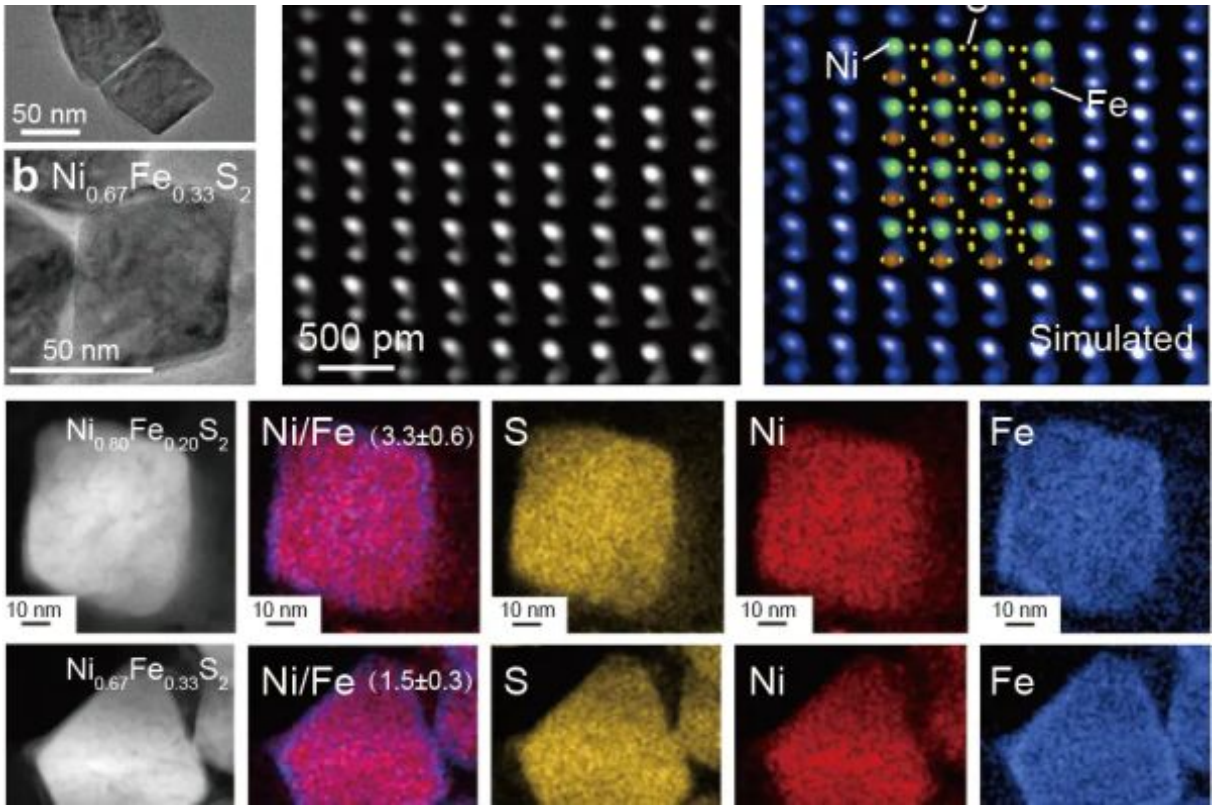


Mismo comienzo, distintos finales: nuevos protocolos de activacion de catalizadores a medida mejoran la fiabilidad en la generacion de hidrogeno verde

Un equipo de investigadores internacionales revela la importancia de disenar protocolos de activacion a medida para prevenir la degradacion de los catalizadores en la electrolisis del agua. Su enfoque, que monitorea la evolucion del material en tiempo real, permite obtener catalizadores con mayor durabilidad, estabilidad y reproducibilidad en comparacion con los logrados mediante protocolos tradicionales.

March 03, 2025

Las tecnologias de descarbonizacion se implementan cada vez mas para combatir el cambio climatico. Muchas de estas tecnologias implican reacciones electroquimicas para generar

combustibles y productos quimicos limpios utilizando electricidad renovable (por ejemplo, hidrogeno verde). Sin embargo, estas reacciones suelen ser ineficientes por si solas y requieren un electrocatalizador para acelerarlas.

El diseno predictivo de catalizadores activos se ve desafiado por su transformacion quimica y estructural durante la reaccion, lo que tambien agrava su degradacion y limita su estabilidad. Este efecto es especialmente notable en la reaccion de evolucion del oxigeno (REO) dentro de la electrolisis del agua, que es la mitad de la reaccion total necesaria para producir hidrogeno verde.

Por lo general, el material inicial no esta completamente optimizado para la catalisis; se dice que esta en una forma de **precatalizador**. Para mejorar su capacidad de impulsar la reaccion electroquimica, se necesita un proceso de activacion. "Podemos pensar en los precatalizadores como talentos ocultos y en los protocolos de activacion como los programas de entrenamiento que los convierten en campeones. El protocolo de activacion adecuado los hara destacar; el incorrecto puede desperdiciar su potencial", explica el Dr. Lu Xia, investigador del ICFO y ex-investigador de Jülich, quien estudia como explotar l electroquimica para aplicaciones de almacenamiento de energia. Convencionalmente, pero los procesos de activacion han sido pasados por alto y se aplican de manera estandar, si considerar de que material esta hecho el precatalizador inicial

Ahora, un esfuerzo conjunto entre eForschungszentrum Jülich (dirigido por el Dr. Meital Shviro, ahora en NREL), la Universidad de Bayreuth y los investigadores del ICFO, el **Dr. Lu Xia** , el **Dr. Kaiwen Wang**, el **Dr. Tengyu Chen**, el **Dr. Kaiqi Zhao**, **Ranit Ram**, la **Dra. Barbara Polesso** y el **Dr. Anku Guha**, liderados por el **Prof. Dr. F. Pelayo Garcia de Arquer**, ha demostrado que el papel de los protocolos de activacion personalizados es, de hecho, fundamental. **El equipo ha propuesto un protocolo de activacion que ofrece control sobre el deterioro en tiempo real y ha demostrado que este mejora la fiabilidad, actividad y estabilidad** de aquellos catalizadores empleados en las REO de la electrolisis del agua. Significativamente, el proceso se implemente **en condiciones industrialmente relevantes**. Por otro lado, han demostrado que protocolos de activacion inadecuados conducen a una degradacion irreversible del catalizador, lo que complica el control y la reproducibilidad. En el estudio, publicado en Nature Materials, han colaborado muchas otras instituciones internacionales, a saber, la Universidad de Chongqing, la Universidad Noruega de Ciencia y Tecnologia, la Universidad Tecnologica de Beijing, la Universidad Oceanica de Zhejiang, la ETH Zürich, la Freie Universitat Berlin, la Universidad Tsinghua y la Universidad de Ciencia Tecnologia Electronica de China

La colaboracion multidisciplinaria en el equipo fue clave para el exito del estudio. Po ejemplo, Forschungszentrum Jülich se centro en el diseno y caracterizacion de catalizadore , la Universidad de Chongqing fue responsable de las simulaciones teoricas para predecir l comportamiento de activacion, y el ICFO desempeno un papel central al proponer y lider

r las estrategias de programacion de los precatalizadores, asi como la monitorizaci
n experimental de como los catalizadores cambiaban durante los protocolos de activacio
. "Esta sinergia multidisciplinaria permitio una comprension profunda del comportamiento d
l precatalizador, impulsando el desarrollo de una estrategia personalizada para lograr u
a electrolisis de alto rendimiento", comparte el Dr. Xia, primer coautor del estudi

Un protocolo de activacion apropiado conduce a catalizadores de mayor rendimiento

Al final, las observaciones validaron los modelos teoricos, que habian predicho con precision la evolucion del precatalizador durante la operacion. En comparacion con las tecnicas tradicionales, **la combinacion de teoria y experimentacion logro un mayor control sobre el proceso de oxidacion, una disolucion minima del catalizador y una estabilidad a largo plazo del material**.

En concreto, los investigadores pusieron en practica su metodo con materiales prometedores para catalizar la REO en un electrolizador de agua funcionando en entornos industriales relevantes. Despues de cientos de horas de actividad, observaron una mejora triple en la duracion del catalizador antes de disolverse completamente cuando utilizaron su protocolo de activacion en lugar del estandar.

"Los dos enfoques son fundamentalmente diferentes, lo que explica por que los resultados difieren", explica la Dra. Xia. "La activacion convencional, como la voltametria ciclica, induce cambios en la superficie de manera no controlada, lo que degrada los catalizadores y perjudica su estabilidad. En nuestro caso, aprovechamos una plataforma de precatalizadores, guiada por modelos teoricos y conocimientos adquiridos durante la propia operacion, para controlar con precision la activacion, minimizando la disolucion y garantizando un rendimiento fiable", anade el investigador.

En conjunto, este enfoque reduce la brecha entre la comprension teorica y la aplicacion practica, lo que permite el desarrollo de catalizadores altamente confiables para la electrolisis del agua. Ademas, el estudio destaca la importancia de los protocolos de activacion a la hora de garantizar una activacion, estabilidad y reproducibilidad optimas. El siguiente paso natural seria aplicar el protocolo a otras reacciones electroquimicas e investigar como les afecta. Otra direccion de investigacion seria perfeccionar el protocolo para tener en cuenta areas de material mas grandes, fenomenos de transporte y otras sutilezas que rodean la electrolisis del agua. Esto permitiria ampliar la estrategia a electrolizadores de mayor escala, trayendo el objetivo final de la comercializacion de dispositivos un paso mas cerca.

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

Agradecimientos:
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).