

Image not found

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 monitorea l'evolucio del material en temps real, permet obtenir catalitzadors amb major durabilitat, estabilitat i reproductibilitat en comparacio amb allo aconseguir 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 desapropitar 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 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'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 Ciència i Tecnologia, la Universitat Tecnològica de Pequín, la Universitat Oceànica d Zhejiang, la ETH Zürich, la Freie Universitat Berlin, la Universitat Tsinghua i la Universitat e Ciència i Tecnologia Electronica de la Xin

. La col·laboracio multidisciplinaria en l'equip va ser clau per a l'exit de l'estudi. Per exemple, 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 liderar les estrategies de programacio dels precatalitzadors, aixi com el monitoratge experimental de com els catalitzadors canviaven durant els protocols d'activacio. "Aquesta sinergia multidisciplinaria va permetre una comprensio profunda del comportament del precatalitzador, impulsant el desenvolupament d'una estrategia personalitzada per 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 precisió l'evolucio del precatalitzador durant l'operacio. En comparacio amb les techniques 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 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 entorn l'electròlisi de l'aigua. Això permetria ampliar l'estratègia a electròlitzadors de major escala, acostant l'objectiu final de la comercialització de dispositius una mica 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>

Agraïments:

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 the 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).