



PROYECTO MINISTERIO DE CIENCIA E INNOVACIÓN

PROYECTOS DE GENERACIÓN DE CONOCIMIENTO

CONVOCATORIA 2022

Investigador principal: D. Ulises Amador Elizondo

Referencia: PID2022-139501OB-C21

Título: PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y ELECTRONICAS DE OXIDOS MIXTOS COMPLEJOS QUE DETERMINAN SU RENDIMIENTO EN LA REACCION DE EVOLUCION DEL OXIGENO EN ELECTROLIZADORES DE OXIDO SOLIDO

Entidad Financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación, Agencia Estatal de Investigación. «Financiado por la Unión Europea FEDER Una manera de hacer Europa»

Cantidad concedida: 185.000 €

Fecha inicio: 01/09/2023 **Fecha**

fin: 31/08/2025 **Resumen:**

El hidrógeno se considera el vector energético del futuro. Sin embargo, su sostenibilidad depende de la limpieza de la vía de producción y de la energía utilizada durante el proceso de obtención. El hidrógeno molecular puede obtenerse de muchos recursos diferentes, como los combustibles fósiles, la biomasa y el agua. La división del agua es el proceso más importante porque el agua es el recurso natural más abundante que contiene hidrógeno. La molécula de agua puede dividirse en hidrógeno y oxígeno si se le proporciona suficiente energía sin emisiones nocivas. La división del agua en su forma más simple utiliza una corriente eléctrica (electrólisis) que pasa a través de dos electrodos para producir hidrógeno y oxígeno.

En las dos tecnologías de electrólisis a las que se dedica el presente proyecto, electrólisis de agua alcalina (AWE) y electrólisis de óxido sólido (SOE), las mayores pérdidas de eficiencia por sobrepotencial están asociadas al ánodo. Esto motiva una búsqueda intensiva de nuevos materiales ya que los materiales "de última generación" distan mucho de cumplir todos los requisitos necesarios para su aplicación eficiente en dispositivos reales. Existe pues, un amplio margen de mejora, tanto en los propios materiales como en la ingeniería que permite su aplicación.

En este proyecto pretendemos conocer mejor la relación entre las características estructurales y electrónicas, con el objetivo de proporcionar guías eficientes para optimizar las propiedades electrocatalíticas de los materiales que se utilizarán en el ánodo de los electrolizadores (AWE de baja temperatura y SOE de alta temperatura).

Este proyecto establece objetivos ambiciosos, pero alcanzables. Se pretende identificar, calcular y probar las características estructurales y electrónicas (descriptores) de los materiales para comprender y mejorar su actividad catalítica para la OER en ánodos de baja y alta temperatura. Esto servirá de guía



para desarrollar materiales anódicos mejorados y electrolizadores más eficientes para producir hidrógeno verde.

Los objetivos generales del proyecto coordinado son:

- 1) Obtener una serie de descriptores electrónicos útiles para mejorar los materiales anódicos de los electrolizadores (AWE y SOE).
- 2) Identificar los aspectos estructurales (incluyendo la orientación de la estructura) y composicionales que hacen que un material sea mejor catalizador para OER.
- 3) Evaluar los efectos de la presencia de cloruro en el agua de mar sobre el OER e identificar las propiedades de los materiales para evitar o minimizar la formación de cloro.

A través del cumplimiento de los objetivos del ECSOER, los resultados esperados son:

1. Añadir nuevas perspectivas en el conocimiento global de la actividad catalítica de óxidos de TM complejos para OER (a baja y alta temperatura).
2. Aportar nuevos conocimientos sobre la actividad catalítica de óxidos de TM complejos para la actividad OER preferente evitando CIER en SWAWE.
3. Definir rutas claras para mejorar el rendimiento del electrocatalizador de óxidos de TM para OER en SOE, AWE, y particularmente en el campo menos explorado de SWAWE.
4. Aceleración del diseño de materiales mediante la determinación de descriptores electrónicos fiables que sean transferibles para la investigación de otros óxidos complejos.
5. Abrir nuevas vías para potenciales materiales multifuncionales en OER.

El subproyecto 1 (PID2022-139501OB-C21 "ECSOE") dentro del marco del proyecto coordinado participa en los objetivos generales:

- (1) obtener una serie de descriptores electrónicos útiles para mejorar los materiales anódicos de los electrolizadores de alta temperatura SOE), y
- (2) Identificar los aspectos estructurales (incluyendo la orientación de la estructura) y composicionales que hacen que un material sea mejor catalizador para OER a alta temperatura.

Para ello, se plantean los objetivos específicos

- (a) Síntesis de polvos de la serie Ruddlesden-Popper $(\text{SrLn})_{n+1}(\text{FeO. } 9\text{M}0. 1)_n\text{O}_{3n+1}$ ($1 < n < \infty$), y Ln= lantánido, M = Metales de Transición 3d, 4d, 5d);
- (b) crecimiento de películas delgadas de algunos de estos óxidos;
- (c) caracterización de las propiedades electroquímicas en modo SOE de polvos y películas delgadas;
- (d) Caracterización in operando de polvos y películas delgadas durante OER en SOE mediante SXRD y XAS,
- (e) Identificación de características estructurales y electrónicas que determinan el rendimiento de $(\text{Sr})_{n+1}(\text{FeO. } 9\text{M}0.1)_n\text{O}_{3n+1}$ para la OER en SOE para contrastar con los resultados de los cálculos DFT realizados en el marco del Subproyecto 2.

La investigación que se llevará a cabo es marcadamente multidisciplinar, combinando metodologías y técnicas de la química y física de estado sólido y de materiales, física de superficies, y ciencia de materiales.



Las propiedades eléctricas y electroquímicas determinadas experimentalmente se explicarán con base a una profunda caracterización estructural (difracción de rayos-X de sincrotrón), microestructural (microscopias electrónicas) y electrónica (espectroscopías de absorción de rayos-X) incluyendo experimentos in-operando.

Se explorarán también los efectos de la orientación de la estructura en el comportamiento OER de películas delgadas crecidas en diferentes orientaciones.