

PLA DE RECERCA / PLAN DE INVESTIGACIÓN
CURS / CURSO 2022-23

Candidat o candidata a doctor / Doctorando o doctoranda Ana Caravaca Morales	
DNI, Passaport, NIE / DNI, Pasaporte, NIE 09082844Y	Correu electrònic / Correo electrónico ana.caravaca@ua.es
Programa de doctorat / Programa de doctorado Electroquímica Ciencia y Tecnología	
Línea de recerca / Línea de investigación Electrocatálisis fundamental y aplicada	
Títol de la tesi / Título de la tesis Materiales electrónicos avanzados para fotoelectrolizadores y electrolizadores reversibles de membrana de intercambio aniónico	

MEMÒRIA DEL PLA DE RECERCA
MEMORIA DEL PLAN DE INVESTIGACIÓN

1. Antecedents i estat actual del tema / Antecedentes y estado actual del tema

Los sistemas fotovoltaicos han experimentado un gran impulso durante los últimos años. Por ejemplo, España cubría alrededor de un 6% de su demanda energética con energía fotovoltaica en 2020. Sin embargo, en el campo de la generación de hidrógeno vía fotoelectroquímica queda un largo camino por recorrer. Además, los dispositivos actuales utilizan fotocatalizadores caros y sin un diseño apropiado. Todo ello impide una producción a gran escala a un precio competitivo. Este hecho ha empujado a los investigadores a perseguir materiales electrónicos abundantes y económicos, como son los óxidos metálicos. No obstante, todavía no se ha encontrado ningún material que pueda ser utilizado de forma eficiente y económica como fotoelectrodo para la generación de hidrógeno por fotoelectroquímica (PEC). Por tanto, el estudio de materiales fotoactivos y su modificación, además de su optimización siguen presentando un alto interés económico y científico.

El primer sistema para la fotoelectrólisis del agua consistió en una celda fotoelectroquímica basada en el dióxido de titanio (rutilo) como fotoánodo, y un contraelectrodo de platino. Mientras el hidrógeno se genera en el cátodo, la generación de oxígeno ocurre en el fotoánodo. siendo la reacción global de fotoelectrólisis del agua [1].

En contraste con las reacciones fotocatalíticas clásicas, en este caso, la reacción no es espontánea, siendo la energía solar transformada en energía química (fotosíntesis). Sin embargo, después de 50 años desde este primer informe, el tema continua teniendo un gran interés científico ya que aún no se ha conseguido un sistema que trabaje eficientemente con luz visible. No obstante, se ha conseguido un progreso significativo en estos últimos años [2,3].

En las últimas décadas, se han desarrollado avances significativos en la preparación y el estudio de materiales semiconductores de óxidos de metales de transición para aplicaciones fotoelectroquímicas. Sin embargo, estos estudios estan basados, en la mayoría de los casos, en óxidos simples de un único metal (óxidos binarios). Actualmente, las propiedades de los óxidos binarios más abundantes se conocen en detalle, a pesar de que diversas técnicas han sido empleadas para mejorar sus propiedades fundamentales con el objetivo de poder adaptarlos a una aplicación final. Entre estas metodologías se encuentran, el dopado del material nanoestructurado, la generación de "composites" (mezcla de otros óxidos/calcogenuros, adsorbatos, etc). El potencial de estas metodologías ha sido demostrado en el caso de los nanomateriales basados en el dióxido de titanio [4], e incluso de forma más clara, en el caso de la hematita [5]. Aún con todo, los

semiconductores tipo n y tipo p que cuenten con gran estabilidad y alta fotoactividad bajo iluminación solar aún están por identificar y optimizar. En este contexto, el presente proyecto persigue el objetivo de preparar nuevos materiales alternativos basados en óxidos ternarios y oxinitruros abundantes en la Tierra, para ser utilizados como electrodos en la electrolisis del agua vía luz solar.

En contraste con los óxidos binarios, las propiedades fotoelectroquímicas de los óxidos ternarios están aún por explorar. Revisando los óxidos ternarios se pueden encontrar formulas simples que son encontradas en la naturaleza como minerales, por ejemplo: ABO_2 , AB_2O_4 , ABO_3 y ABO_4 .

Exceptuando la primera familia, la mayoría de los óxidos se comportan como fotoánodos. La segunda familia la constituyen las espinelas (normal e inversa). Diferentes subfamilias siguen siendo interesantes, en particular aquellas basadas en el Fe, Ni, Co, y Mn, que se comportan como fotoánodos relativamente eficientes. La tercera familia [6] ha comenzado a ser estudiada en el campo de la electroquímica recientemente. Este tipo de óxidos poseen en general una estructura tipo perovskita, pero también hay algunas tipo ilmenita [7]. Entre los que se comportan como fotoánodos, se han estudiado tanto el $LaFeO_3$ como el $NiTiO_3$. La última familia posee diversas estructuras cristalinas, entre las que se encuentran la scheelita y la wolframita. Se han estudiado los vanadatos $BiWO_4$ y $FeVO_4$ que se comportan como fotoánodos, aunque con limitada estabilidad.

Los oxinitruros (y nitruros) son materiales alternativos que funcionan como fotoánodos [8]. Los Oxinitruros muestran bandas de valencias hibridadas de orbitales O 2p y N 2p con bandas prohibidas más estrechas que la de los correspondientes óxidos metálicos. La introducción del nitrógeno se facilita gracias a un radio iónico, entorno de coordinación, electronegatividad, y polarizabilidad similares a los del oxígeno. Solo hay unos pocos oxinitruros conocidos hasta la fecha que puedan actuar como fotocatalizadores bajo la luz visible, entre ellos pueden destacarse el TaON, $BaTaO_2N$, $LaTiO_2N$, y el oxinitruro de galio-zinc. Se ha reportado que son fotocatalizadores eficientes cuando son utilizados como nanopartículas [9], pero también presentan ventajas cuando se utilizan como una muy fina heterocapa protectora [10].

Una aparente dificultad de este proyecto que no debe ser obviada deriva del hecho de que hay varios compuestos que podrían resultar de interés. En cuanto a los óxidos, de acuerdo con JA Turner [11] podrían haber más de 50,000 óxidos ternarios, un número que BA Parkinson [12] incrementa hasta los 200,000. Es evidente que necesitamos adoptar una estrategia para realizar un estudio sistemático. Para guiar la selección y preparación de los materiales más prometedores, se pueden adoptar los diferentes enfoques:

a) Enfoque combinatorial: (B.E. Parkinson) Ha sido empleado para estudiar la actividad fotocatalítica de óxidos ternarios y cuaternarios. El método emplea una impresora de tinta para preparar muestras 2D con una composición espacial variable. La subsiguiente pirolisis de la muestra produce una librería de óxidos cuya actividad fotoelectrocatalítica es investigada por el escaneo de la muestra con un laser enfocado a su superficie, por lo que la fotocorriente puede ser mapeada. A pesar de ser una aproximación válida, posee la dificultad de que el tratamiento térmico es único, lo que significa que algunos materiales pueden ser ignorados ya que estos podrían requerir de otras condiciones para su preparación.

b) Aproximación teórica: (J.A. Turner) Mediante cálculos de mecánica cuántica (DFT), el número de óxidos ternarios que en principio podrían ser de interés en fotoelectrocatalisis puede ser delimitado. De hecho, los cálculos pueden ser una herramienta para el diseño de materiales y, en cualquier caso, para entender el comportamiento. Este enfoque limita el número de óxidos a ser estudiados.

c) Enfoque bibliográfico: En esta aproximación las familias más simples de los óxidos ternarios que poseen una alta estabilidad son fácilmente identificables ya que hay estudios publicados de algunos ellos o porque existen en la naturaleza como minerales.

En otro orden de cosas, una celda de combustible/electrolizador reversible o regenerativo es un dispositivo prometedor que puede trabajar como una celda de combustible que consume hidrógeno pero también, en el modo inverso, como un electrolizador de agua que produce hidrógeno.

Este sistema requiere para su funcionamiento un catalizador bifuncional con altas actividades para a) la generación y reducción de oxígeno (OER/ORR) o b) la generación y oxidación de hidrógeno (HER/HOR). Los catalizadores resultan cruciales para minimizar el sobrepotencial de cada reacción, asegurando un dispositivo de alta eficiencia. Recientemente, se ha demostrado que estos

dispositivos, mediante el uso de metales preciosos, pueden ser competitivos en cuanto a su funcionamiento con respecto a otras tecnologías [13]. Sin embargo, para mejorar su viabilidad se necesitan materiales más económicos para ambos electrodos:

a. Electrodo de hidrógeno (HER/HOR)

La mayoría de los materiales no preciosos que pueden ser una alternativa se basan en el níquel, incluyendo aleaciones con otros metales de transición, sulfuros y fosfuros y el uso de heteroestructuras. Así, el grupo de Jaramillo ha demostrado que las aleaciones níquel-plata poseen una alta actividad para HER/HOR [14]. El grupo de Sun ha reportado un electrocatalizador sin metal noble basado en el níquel y el nitrato de níquel preparado por electrodeposición y nitruración en amoníaco. Estos electrodos presentan algunas ventajas frente al Pt/C para HER/HOR en disolución alcalina, con un sobrepotencial cercano a cero, una excelente estabilidad a largo plazo y una eficiencia farádica unidad [15]. También se han obtenido resultados interesantes con catalizadores híbridos de NiO-Ni soportados en carbones preparados por un tratamiento hidrotermal mucho más simple [16].

b. Electrodo de Oxígeno (responsable de las reacciones de OER y ORR)

Algunos autores han propuesto alternativas prometedoras al grupo del platino, implicando a una extensa variedad de compuestos, incluyendo materiales carbonosos dopados con N, P y S, óxidos e hidróxidos de metales de transición, fosfuros metálicos, nitruros metálicos y perovskitas y espinelas que contienen Fe, Co o Mn [17, 18]. Se han obtenido buenos resultados con catalizadores basados en carbón dopado con heteroátomos a pesar de que sufren degradación oxidativa a potenciales altos [19]. Los óxidos e hidróxidos mixtos de metales de transición son particularmente atractivos debido a la naturaleza multivalente de estos metales y a una diversidad composicional que puede proveer de sitios activos con diferentes funcionalidades para alcanzar una energía adecuada para los intermedios de reacción. De hecho, se han observado efectos catalíticos sinérgicos en la combinación del Ni, Fe y Mn, siendo el Fe determinante para la actividad OER y el Co y Mn para la actividad ORR [20]. Otros autores han observado una interacción sinérgica en catalizadores trimetálicos que contienen óxidos de Ni, Fe y Co, en comparación con catalizadores bimetálicos de Fe-Ni, Fe-Co y Co-Ni [21]. Además, la estructura de metales mixtos (NiFeOx) puede ser combinada con otros conocidos electrocatalizadores para el ORR como son las ftalocianinas de cobalto calcinadas, para mejorar su actuación [22].

Los métodos más comunes para la fabricación de electrocatalizadores para celdas alcalinas reversibles de combustible consisten en las tradicionales rutas húmedas: co-precipitación, métodos hidrotermales o sol-gel. Asimismo, no solo es importante seleccionar adecuadamente el catalizador sino también optimizar la integración de su estructura con respecto al electrodo, el polímero conductor y la celda completa, lo cual motiva perseguir diversas nanoestructuras en los catalizadores. Por lo que el uso de métodos sintéticos alternativos ha adquirido importancia, como son el CVD, ALD, o incluso, el electrodeposición [23].

Algunos artículos de revisión han sido publicados considerando limitaciones, retos y avances de los electrolizadores reversibles de flujo, incluyendo los electrocatalizadores [24-26]. Existen varios prototipos de electrolizadores reversibles basados en electrocatalizadores de metales no preciosos. El grupo de Jaramillo ha desarrollado un prototipo que usa como electrocatalizador el Ni/C y MnOx/GC [27]. Nanoláminas 2D de (oxi)hidróxidos ternarios de FeCoNi se han preparado por síntesis hidrotérmica y utilizadas en ambos electrodos [28]. Asimismo, Alonso-Vante ha evaluado en una celda de combustibles de microfluidica el rendimiento de electrodos bifuncionales de metales no preciosos: nanoestructuras basadas en Ni y soportadas en nanotubos de carbono se utilizaron para catalizar la reacción de evolución del hidrógeno (HER) y la reacción de oxidación del hidrógeno (HOR), mientras que NiFeOx-CoNy soportado en nanoconos de carbón dopados con N se utilizó para la reacción de evolución del oxígeno (OER) y la reacción de reducción del oxígeno (ORR) [29].

La principal limitación al desarrollo de sistemas electródicos prácticos a escala masiva procede de la baja cinética de las reacciones redox del oxígeno [30], lo cual requiere del diseño de materiales electródicos que catalicen estos procesos, y cuya síntesis no dependa en metales caros o escasos. El empleo de cálculos teóricos, fundamentalmente basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), han permitido obtener información de propiedades de los materiales electródicos, tanto del

material masivo [31] y de su superficie [32]. Los resultados de estos cálculos, integrados en el análisis termodinámico y cinético, proporcionan un marco teórico [33] para la comprensión de los factores que determinan la actividad electrocatalítica.

2. Bibliografia més rellevant / Bibliografía más relevante

- [1] A. Fujishima, K. Honda, *Nature*, 238 (1972) 37-38.
- [2] J. Augustynski, B.D. Alexander and R. Solarska, *Top Curr. Chem.*, 303 (2011) 1-38.
- [3] S. Caramori, V. Cristino, L. Meda, R. Argazzi and C.A. Bignozzi, *Top Curr. Chem.*, 303 (2011) 39-94.
- [4] T. Berger, D. Monllor-Satoca, M. Jankulovska, T. Lana-Villarreal and R. Gómez, *ChemPhysChem*, 13 (2012) 2824-2875.
- [5] K. Sivula, F. Le Formal and M. Grätzel, *ChemSusChem*, 4 (2011) 432-449.
- [6] A. Navrotsky, *Chem. Mater.*, 10 (1998) 2787-2793.
- [7] M. A. Peña and J. L. G. Fierro, *Chem. Rev.*, 101 (2001) 1981-2017.
- [8] T. Takata, C. Pan and K. Domen, *Sci. Technol. Adv. Mater.*, 16 (2015) 033506.
- [9] D. Abeyasinghe and S.E. Skrabalak, *ACS Energy Lett.*, 3 (2018) 1331-1344.
- [10] S.P. Phivilay, C.A. Roberts, A.D. Gamalski, E.A. Stach, S. Zhang, L. Nguyen, Y. Tang, A. Xiong, A.A. Puretzky, F.F. Tao, K. Domen and I.E. Wachs, *ACS Catal.*, 8 (2018) 6650-6658.
- [11] http://www.hydrogen.energy.gov/pdfs/review08/pdp_34_turner.pdf
- [12] http://www.hydrogen.energy.gov/pdfs/review11/bes011_parkinson_2011.pdf
- [13] X. Peng, Z. Taie, J. Liu, Y. Zhang, X. Peng, Y. N. Regmi, J.C. Fornaciari, C. Capuano, D. Binny, N.N. Kariuki, D.J. Myers, M.C. Scott, A.Z. Weber and N. Danilovic, *Energy Environ. Sci.*, 13 (2020) 4872.
- [14] M.H. Tang, C. Hahn, A. J. Klobuchar, J. W. Desmond Ng, J. Wellendorff, T. Bligaard and T. F. Jaramillo, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 16 (2014) 19250-7.
- [15] F. Song F, W. Li, J. Yang, G. Han, P. Liao and Y. Sun, *Nat. Commun.*, 9 (2018) 4531.
- [16] C.A. Campos-Roldán, L. Calvillo, M. Boaro, R.G. González-Huerta, G. Granozzi and N. Alonso-Vante, *ACS Appl. Energy Mater.*, 3 (2020) 4746-4755.
- [17] S. Zhao, L. Yan, H. Luo, W. Mustain and H. Xu, *Nano Energy*, 47 (2018) 172-198.
- [18] S. R. Narayan, A. Manohar and S. Mukerjee, *Electrochem. Soc. Interface*, 24 (2015) 65.
- [19] L.M. Rivera-Gavidia, I. Fernández de la Puente, M.A. Hernández-Rodríguez, V. Celorrio, D. Sebastián, M.J. Lázaro, E. Pastor and G. García, *J. Catal.*, 387 (2020) 138-144.
- [20] S. Dresp and P. Strasser, *ChemCatChem*, 10 (2018) 1-11.
- [21] M.A. Kazakova, D.M. Morales, C. Andronesco, K. Elumeeva, A.G. Selyutin, A. V. Isckchenko, G.V. Golubtsov, S. Dieckhöfer, W. Schuhmann and J. Masa, *Catal. Today*, 357 (2020) 259-268.
- [22] H. Zhong, R. Tian, X. Gong, D. Li, P. Tang, N. Alonso-Vante and Y. Feng, *J. Power Sources*, 361 (2017) 21-30.
- [23] E. López-Fernández, C. Gómez Sacedón, J. Gil-Rostra, F. Yubero, A.R. González-Elipé and A. Lucas-Consuegra, *Molecules* 26 (2021) 6326.
- [24] T. Sadhasivam, K. Dhanabalan, S.-H. Roh, T.-H. Kim, K.-W. Park, S. Jung, M.D. Kurkuri, H.-Y. Jung, *Int. J. Hydrogen Energy*, 42 (2017) 4415-4433.
- [25] Y. Wang, D.Y.C. Leung, J. Xuan and H. Wang, *Renew. Sustain. Energy Reviews*, 75 (2017) 775-795.
- [26] J. Tang, C. Su, Y. Zhong and Z. Shao, *J. Mater. Chem. A*, 9 (2021) 3151.
- [27] J.W. Desmond Ng, Y. Gorlin, T. Hatsukade and T.F. Jaramillo, *Adv. Energy Mater.*, 3 (2013) 1545-1550.
- [28] Q. Zhang, N.M. Bedford, J. Pan, X. Lu and R. Amal, *Adv. Energy Mater.*, (2019) 1901312.
- [29] C.A. Campos-Roldán, H. Zhong, S. M. Unni, R.G. González-Huerta, Y. Feng and N. Alonso-Vante, *ACS Appl. Energy Mater.*, 3 (2020) 7397-7403.
- [30] H.B. Tao, J. Zhang, J. Chen, L. Zhang, Y. Xu, J.G. Chen and B. Liu, *J. Am. Chem. Soc.*, 141 (2019) 13803-13811.
- [31] C. Franchini, R. Podloucky, J. Paier, M. Marsman and G. Kresse, *Phys. Rev. B*, 75 (2007) 195128.
- [32] A. Kulkarni, S. Siahrostami, A. Patel and J.K. Norskov, *Chem. Rev.*, 118 (2018) 2302-2312.
- [33] V.A. Nikitina, A.A. Kurilovich and A.S. Ryabova, *J. Electrochem. Soc.*, 165 (2018) J3199-J3208.

3. Objectius de la investigació / Objetivos de la investigación

1. Investigar y optimizar las condiciones de preparación por ruta húmeda (baño químico, electrodeposición, etc.) de electrodos en capas finas de óxidos y oxinitruros sobre substratos conductores. Además, investigar y optimizar la síntesis de nanopolvos de óxidos, hidróxidos y aleaciones utilizables como catalizadores bifuncionales.
2. Realizar una caracterización básica (foto)electroquímica en disoluciones alcalinas acuosas purgadas con hidrógeno, nitrógeno y oxígeno. En el caso de los materiales fotoactivos, se establecerán las condiciones de (foto)estabilidad a corto plazo y las eficiencias de fotooxidación del agua. En cuanto a los electrocatalizadores para los procesos de oxígeno e hidrógeno, se realizarán experimentos sistemáticos para evaluar los procesos de HER/HOR y OER/ORR.
3. Realizar en mapeo teórico de materiales alternativos como fotoelectrodos mediante cálculos DFT, identificando los materiales más prometedores.
4. Variación de la síntesis de los electrocatalizadores más prometedores con el objetivo de optimizar su carácter bifuncional. La modificación se basará en cálculos teóricos y supondrá cambios tanto en la estructura y/o la composición química.
5. Evaluación de la estabilidad de los materiales fotoactivos y electrocatalizadores bajo las condiciones pertinentes de iluminación, potencial aplicado o corriente. Entender los mecanismos de desactivación a través de técnicas in situ y mediante análisis ex situ post-mortem.
6. Optimizar el pretratamiento de diferentes membranas de intercambio aniónico comerciales con atención particular al mojado inicial en disoluciones de KOH. Identificación de procedimientos para la optimización del conjunto electrodo-membrana.
7. Integración de los mejores electrodos en fotoelectrolizadores o electrolizadores reversibles trabajando con membranas de electrolito poliméricas y caracterizar su operación.

4. Metodologia, hipòtesi i planificació temporal / Metodología, hipótesis y planificación temporal

Metodología

a) Síntesis de materiales.

Los materiales electroactivos y fotoactivos serán sintetizados como capas finas en un substrato conductor mediante la utilización de algún método por vía húmeda.

b) Caracterización óptica, morfológica y estructural:

- Topografía: a través de la Microscopía Electrónica y AFM.
- Composicional: EDX, XPS.
- Estructural: XRD, espectroscopía Raman.
- Optoelectrónica: espectroscopía UV-vis y fluorescencia.

c) Técnicas electroquímicas (en oscuridad): voltametrías cíclicas, cronoamperometrías y cronopotenciometrías.

d) Medidas fotoelectroquímicas, en las cuales las técnicas electroquímicas se realizan bajo iluminación del electrodo a luz constante o modulada.

e) Espectroscopía y metodologías analíticas: Raman, métodos cromatográficos y DEMS.

f) Metodologías teóricas: DFT (DFT+U) aplicada a la determinación de la estructura electrónica de materiales utilizables como fotoelectrodos

Hipótesis

El proyecto propuesto deberá permitir el progreso en la preparación de materiales avanzados para su aplicación en la próxima generación de electrolizadores reversibles y fotoelectrolizadores para la producción de hidrógeno renovable, ambos basados en membranas de intercambio aniónico.

a) Barrido teórico mediante DFT es una forma eficiente para la identificación de nuevas estequiometrías de materiales fotoactivos.

- b) Las técnicas (foto)electroquímicas proporcionan información directa sobre la eficiencia y la cinética de la separación, transporte y transferencia de carga para los procesos de interés.
- c) El dopado es importante para la definición del carácter p o n de un semiconductor y para la mejora de su comportamiento fotoelectroquímico.
- d) La modificación superficial de los semiconductores con nanopartículas metálicas y otros electrocatalizadores cambian drásticamente la respuesta foto(electro)catalítica del material, lo que incrementa su eficiencia y selectividad.
- e) El estudio electroquímico en celdas de tres electrodos conteniendo disoluciones alcalinas permite guiar el desarrollo de los (foto)electrodos para ser aplicados en electrolizadores reversibles de membrana de intercambio aniónico.
- f) El desarrollo de catalizadores bifuncionales para los procesos redox del hidrógeno y el oxígeno proporciona un camino para el desarrollo de electrolizadores/celdas de combustible reversibles.
- g) La espectroscopía de masas acoplada a los experimentos (foto)electroquímicos permite la identificación de especies volátiles generadas en el electrodo.

Planificación temporal

Primer año:

- 1) Preparación y modificación de fotoelectrodos y electrocatalizadores
- 2) Medidas electroquímicas en disolución alcalina acuosa
- 3) Barrido mediante DFT de nuevos materiales
- 4) Modificación de electrocatalizadores bifuncionales modificando la estructura y la composición.

Segundo año: completar las tareas 1-4 del año anterior, y

- 5) evaluar la estabilidad de los materiales: mecanismos de degradación.

Tercer año:

- 6) Estudios con DEMS y espectroscopía de absorción-emisión transitoria.
- 7) Pretratamiento de las AEM e ingeniería de la interfase electrodo/membrana
- 8) Desarrollo de un electrolizador reversible y un fotoelectrolizador a escala laboratorio

5. Impacte esperat/ Impacto esperado

La implementación del uso de combustibles limpios podría tener un gran impacto en la economía y la sociedad, ya que puede suministrar energía para el crecimiento económico global, pero también reducir el impacto humano en el medio ambiente. Para cumplir con los objetivos de descarbonización de la década de 2030 del Pacto Verde Europeo, la sustitución de los combustibles fósiles por vectores de energía sostenible es de gran interés. El desarrollo de la economía del hidrógeno depende de mejorar la eficiencia y reducir el coste de las tecnologías empleadas para su producción y uso. En este sentido, la fotoelectrólisis del agua mediante energía solar podría complementar a los electrolizadores convencionales acoplados a fuentes de energía renovables. El proyecto AEM4H2 tiene como objetivo acelerar este proceso mediante el diseño de un sistema de producción de hidrógeno solar más competitivo mediante el desarrollo de materiales para fotoelectrolizadores y electrolizadores reversibles. El desarrollo de un electrolizador reversible es atractivo ya que permite almacenar grandes cantidades de energía en forma de hidrógeno que se puede utilizar como combustible en el mismo dispositivo cuando se requiera, lo que permite una reducción significativa de los costes de capital y mantenimiento. Sin embargo, si bien los resultados antes mencionados son contribuciones prometedoras no solo por los avances científicos específicos, que generarán nuevos conocimientos, sino también para el desarrollo tecnológico, económico y social al contribuir a traer nuevos productos a bajo costo, existe el riesgo de no lograr un alto impacto a menos que se hagan esfuerzos para cambiar la percepción social de alto riesgo asociado con el H2.

Más allá de los objetivos climáticos, los gobiernos están priorizando las energías renovables como motor del crecimiento económico, reconociendo las numerosas oportunidades de empleo creadas por la transición a las energías renovables que, según los datos recopilados por IRENA (Agencia Internacional de Energías Renovables), se traduce en aproximadamente 11 millones de empleos directos e indirectos. Se pretende que los resultados de la tesis impulsen el empleo en España tanto en el campo de las energías renovables como en el de la industria química.

Al compartir conocimientos y datos (a menos que la IP esté protegida para una futura explotación y desarrollo comercial) con la comunidad internacional del conocimiento, los resultados de la tesis podrán hacer una contribución significativa a ampliar la base de conocimiento española, que es crucial para proporcionar a varios niveles conocimientos útiles y validados como base para la toma de decisiones informadas.

6. Implicacions ètiques o de bioseguretat/ Implicaciones éticas o de bioseguridad.

Indique si la memòria contempla algun dels següents aspectes que puguen tenir implicacions ètiques o relatives a la bioseguretat:

Indique si la memoria contempla alguno de los siguientes aspectos que puedan tener implicaciones éticas o relativas a la bioseguridad:

- A. Recerca en humans o utilització de mostres biològiques d'origen humà
Investigación en humanos o utilización de muestras biológicas de origen humano
Si ☐ No ☒
- B. Utilització de cèl·lules troncales embrionàries humanes, o línies derivades d'elles
Utilización de células troncales embrionarias humanas, o líneas derivadas de ellas
Si ☐ No ☒
- C. Assaigs clínics
Ensayos clínicos
Si ☐ No ☒
- D. Ús de dades personals, informació genètica, uns altres
Uso de datos personales, información genética, otros
Si ☐ No ☒
- E. Experimentació animal
Experimentación animal
Si ☐ No ☒
- F. Utilització d'agents biològics de risc per a la salut humana, animal o per al medi ambient
Utilización de agentes biológicos de riesgo para la salud humana, animal o para el medioambiente
Si ☐ No ☒
- G. Ús confinat d'organismes modificats genèticament (OMG)
Uso confinado de organismos modificados genéticamente (OMG)
Si ☐ No ☒
- H. Alliberament d'OMG
Liberación de OMG
Si ☐ No ☒

Si ha contestat afirmativament en alguna de les qüestions anteriors, explique els aspectes ètics referits a la recerca que es proposa, les consideracions, procediments o protocols a aplicar en compliment de la normativa vigent. En tot cas, la recerca en aquestes àrees requerirà de l'autorització del comitè d'ètica de la UA i/o dels organismes preceptius ([més informació](#)). Aquesta autorització, que ha de ser prèvia a l'inici dels treballs experimentals, serà exigible per al dipòsit de la tesi.

Si ha contestado afirmativamente en alguna de las cuestiones anteriores, explique los aspectos éticos referidos a la investigación que se propone, las consideraciones, procedimientos o protocolos a aplicar en cumplimiento de la normativa vigente. En todo caso, la investigación en estas áreas requerirá de la autorización del comité de ética de la UA y/o de los organismos preceptivos ([más información](#)). Esta

autorización, que tiene que ser previa al inicio de los trabajos experimentales, será exigible para el depósito de la tesis.