

## Predicción de la eficiencia de los electrocatalizadores para la producción de hidrógeno mediante técnicas de aprendizaje automático

Baum, Fábio; González Morales, Karol Liseth

Universidade Federal da Integração Latino-Americana, Foz do Iguaçu, Brasil

fabio.baum@unila.edu.br

Área temática: G. Aplicaciones de nanomateriales en ambiente, energía, agro, alimentos y catálisis

Uno de los procesos de producción más prometedores para el almacenamiento de energía producida por fuentes renovables, como la energía solar y eólica, es en la forma de energía química, como en el hidrógeno generado por la quiebra de la molécula del agua. Sin embargo, la electrólisis consume una gran cantidad de energía, lo que reduce la viabilidad económica del proceso. La clave para superar este desafío es el desarrollo de electrocatalizadores de alta actividad y alta estabilidad [1]. Pero el intervalo entre la investigación inicial de un nuevo material y su aplicación industrial suele superar los 10 años. Para acortar esta brecha entre el descubrimiento y la implementación práctica, se introdujo la iniciativa Plataformas de Aceleración de Materiales (MAPs) [2]. Las MAPs combinan herramientas de aprendizaje automático (ML) con robótica y la experiencia de los científicos para acelerar el descubrimiento, la experimentación y la implementación de nuevos materiales en la industria [2]. Sin embargo, sus altos costos de implementación aún limitan su adopción a laboratorios en los principales centros de investigación y universidades de países ricos. Recientemente, han surgido iniciativas para desarrollar herramientas de bajo costo, democratizando el acceso a estas tecnologías. Paralelamente, el uso del aprendizaje automático (ML) ha ganado gran popularidad en la última década, y muchos modelos ahora pueden implementarse en ordenadores personales y portátiles. Este trabajo aplicó técnicas de ML para extraer datos de electrocatalizadores para la electrólisis de hidrógeno a partir de agua de más de 22 000 artículos que describen el proceso electrocatalítico para la producción de hidrógeno. En análisis estadístico, se verificó que las arquitecturas más recurrentes son los catalisadores soportados en carbono, las nanopartículas libres y las nanohojas, mientras los elementos más recurrentes en la base de datos de electrocatalizadores son no metales carbono, nitrógeno y oxígeno, y los metales de transición cobalto, níquel, molibdeno y hierro. El promedio del sobrepotencial para la reacción de evolución de hidrógeno (HER) es de 0,123 V. Los menores valores de sobrepotencial fueron encontrados para las estructuras huecas y las arquitecturas en capas.

### REFERENCIAS

1. Zhu, S; Jiang, K.; Chen, B.; Zheng, S. *J. Mater. Chem. A* 11 (2023) 3849
2. Flores-Leonar, M. M., Mejía-Mendoza, L. M., Aguilar-Granda, A., Sanchez-Lengeling, B., Tribukait, H., Amador-Bedolla, C., Aspuru-Guzik, A. *Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry* 25 (2020) 100370