



Un nou estudi revela com la llum de sincrotró impacta els materials de bateries durant l'anàlisi en temps real

Un estudi multicèntric realitzat per investigadors del Sincrotró ALBA, ICMAB-CSIC, CIC energigUNE i BRTA ha descobert efectes crítics induïts pel feix en materials de bateries estudiats amb llum de sincrotró. L'equip va demostrar que, durant estudis de caracterització, la radiació de raigs X pot inhibir l'activitat electroquímica en elèctrodes de bateries d'ions de liti comuns. L'estudi identifica llindars de dosis de radiació i proposa noves estratègies per a mitigar els efectes induïts pel feix, a fi de garantir una caracterització operant de les bateries més precisa.

L'emmagatzematge eficient d'energia és crucial per a aconseguir un futur d'energia neta, ja que les bateries a gran escala permetran emmagatzemar i distribuir fonts d'energia renovable com la solar i l'eòlica. Els esforços globals per a optimitzar el rendiment de les bateries inclouen el desenvolupament de nous materials, que sovint es caracteritzen mitjançant tècniques *operando* basades en llum sincrotró. Aquestes mesures en temps real examinen el rendiment de la bateria mentre es carrega i descarrega. No obstant això, el possible impacte dels feixos de raigs X d'alta intensitat sobre els materials en estudi no s'havia entès en profunditat fins ara, la qual cosa generava preocupació sobre la precisió dels resultats obtinguts amb aquestes poderoses tècniques.

Un nou estudi, publicat en *Chemistry of Materials*, aporta dades sobre aquest tema en investigar sistemàticament com la radiació de sincrotró afecta a dos materials d'elèctrodes de bateries basats en liti molt utilitzats: $\text{LiNi}_{0.33}\text{Mn}_{0.33}\text{Co}_{0.33}\text{O}_2$ (NMC111) and LiFePO_4 (LFP). La recerca revela que, en aquests experiments, els feixos de raigs X produïts en instal·lacions de sincrotró poden alterar l'activitat electroquímica d'aquests materials i, en casos extrems, això podria portar a conclusions incorrectes sobre el rendiment d'aquests.

Un equip de l'Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC), del Centre de Recerca Cooperativa en Energies Alternatives (CIC energigUNE), del Basque Research and Technology Alliance (BRTA) i del Sincrotró ALBA van col·laborar per a estudiar el comportament electroquímic del NMC111 i l'LFP —dos components clau de les bateries comercials d'ions de liti— sota radiació de raigs X. Utilitzant la difracció de raigs X (XRD) i l'espectroscòpia d'absorció de raigs X (XAS) en les línies de llum MSPD i NOTOS del Sincrotró ALBA, van observar com els materials reaccionaven a diferents intensitats de radiació durant els cicles de càrrega i descàrrega.



Els resultats van mostrar que a dosis altes, la radiació de sincrotró causava una inhibició de la reactivitat electroquímica en les àrees irradiades. En altres paraules, el feix de raigs X interferia amb el funcionament normal del material de la bateria, alentint o detenint les reaccions químiques esperades. Es va descobrir que els efectes depenien de la dosi, sent les dosis més altes les que provocaven una inhibició més significativa. L'important és que l'estudi va demostrar que aquests efectes eren reversibles. Una vegada que el feix es movia a una altra àrea o es reduïa la intensitat de la radiació, els materials tornaven a la seva activitat normal. Això suggereix que els materials no patien danys permanents pel feix, sinó que la seva activitat es "pausava" temporalment a causa de l'exposició als raigs X.

Aquestes troballes corroboren en mesures *operando* amb llum de sincrotró els esperats efectes induïts pel feix. No obstant això, la recerca sistemàtica ha permès també al grup proposar diverses estratègies per a mitigar-los. Per exemple, reduir la intensitat del feix de sincrotró utilitzant atenuadors, com làmines d'alumini, per a disminuir el flux de fotons que arriba a la mostra. També van descobrir que els elèctrodes de bateries més primers eren menys afectats pel feix, la qual cosa suggereix que el gruix dels materials estudiats influeix en la seva tolerància a la radiació. A més, van observar que controlar el temps d'exposició i introduir períodes de descans entre les mesures podria ajudar a prevenir l'acumulació d'efectes del feix.

Aquest estudi, el primer a utilitzar la línia de llum NOTOS per a avançar en la recerca de bateries, no sols va proporcionar la primera anàlisi sistemàtica dels efectes induïts pel feix de llum de sincrotró en l'estudi de materials en condicions de treball reals, sinó que també té implicacions més àmplies per a millorar la precisió de les tècniques de caracterització basades en llum sincrotró en molts camps de la ciència de materials. A mesura que es desenvolupin nous materials de bateries més eficients, especialment per a aplicacions com a vehicles elèctrics i l'emmagatzematge d'energia renovable, els especialistes en llum sincrotró de tot el món continuaran refinant les tècniques de raigs X d'alta brillantor per a proporcionar dades precises i en temps real que permetin comprendre els complexos processos químics que ocorren durant el funcionament de les bateries.

"L'ús de radiació de sincrotró permet observar processos complexos i dinàmics, la qual cosa la converteix en una eina essencial per a l'avanç de la recerca en bateries. El potencial de les tècniques *operando* de XAS i XRD basades en sincrotró per a caracteritzar els materials de les bateries durant els cicles, i així obtenir una millor comprensió dels processos electroquímics en curs, està atraient un interès creixent per part de la comunitat científica. No obstant això, en realitzar experiments amb llum de sincrotró, és necessari considerar els possibles efectes induïts pel feix, que poden conduir a resultats erronis. Detectar aquests efectes i desenvolupar estratègies de mitigació per a minimitzar-los és crucial", diu Carlos Escudero, científic de línia en la línia de llum NOTOS i un dels autors d'aquest treball.

Article de referència:

Beam Effects in Synchrotron Radiation Operando Characterization of Battery Materials: X- Ray Diffraction and Absorption Study of $\text{LiNi}_{0.33}\text{Mn}_{0.33}\text{Co}_{0.33}\text{O}_2$ and LiFePO_4 Electrodes. Chem. Mater. 2024, 36, 5596–5610 (<https://pubs.acs.org/doi/full/10.1021/acs.chemmater.4c00597>)

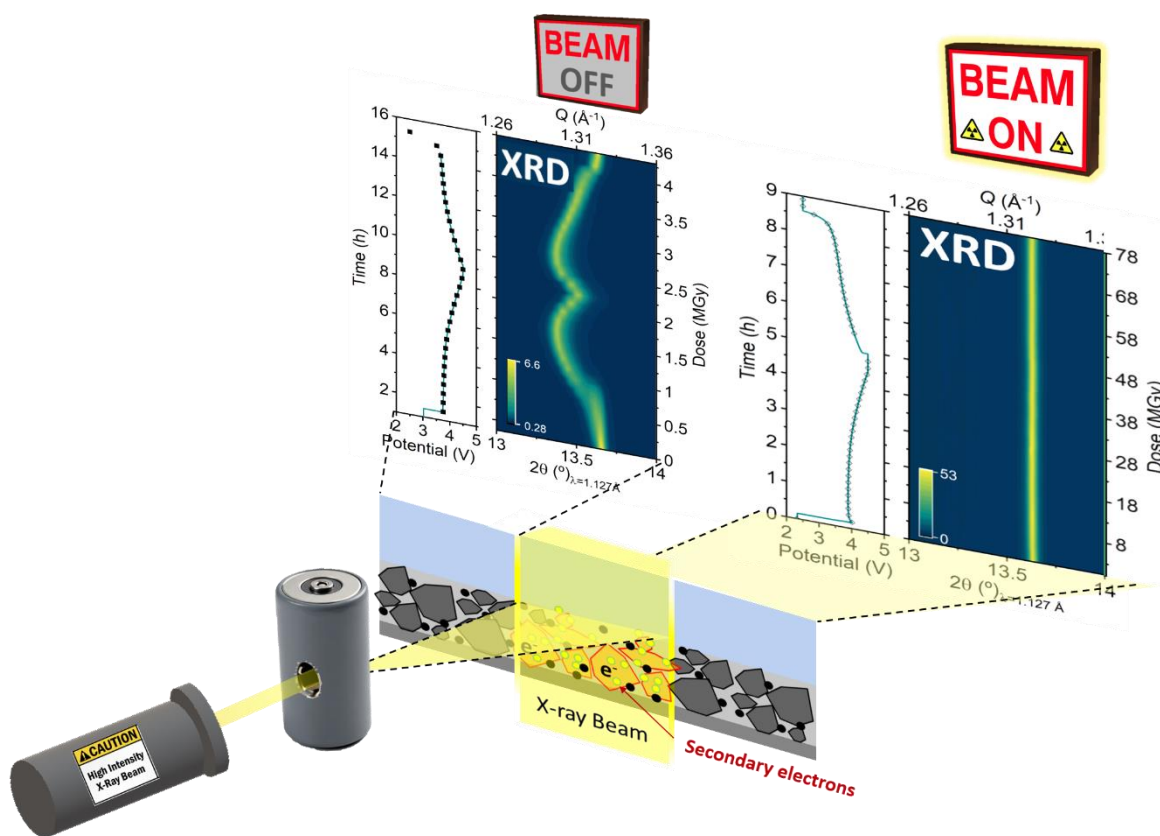


Figura. Representació esquemàtica de la interacció entre un feix de raigs X i el material analitzat durant les mesures *operando* de XRD/XAS, que il·lustra una supressió completa de l'activitat electroquímica en l'àrea exposada degut a una alta dosi de radiació.