

# Relación mesoestructura- rendimiento en baterías y celdas de combustible: un enfoque computacional multi-escala



Sala de conferencias.  
Dpto. Física-UNS.



Viernes 31/03. 15hs.



**Dr. Alejandro A. Franco**

Institut Universitaire de France

Laboratoire de Réactivité et Chimie des Solides (LRCS)

Réseau sur le Stockage Electrochimique de l'Energie (RS2E)

ALISTORE European Research Institute

2017

31/03

**E**l diseño optimizado de electrodos compuestos para baterías y celdas de combustibles demostró ser de crucial importancia, en particular para alcanzar las expectativas de aplicación en la industria automotriz: en términos de ganar desempeño y reducción de costos. Estos electrodos están actualmente hechos de materiales activos o catalíticos, con aditivos y aglutinantes y resultan complejas estructuras porosas contenida en un electrolito. Varios escenarios conceptuales han sido desarrollados con la intención de comprender la influencia de las propiedades estructurales de estos materiales en la respuesta de la celda: aproximaciones considerando la construcción de estructuras artificiales que poseen las características más importantes de los catalizadores reales y aproximaciones basadas en la reconstrucción de la estructura de los electrodos guiada computacionalmente. Estas aproximaciones han provisto progresos en la comprensión de la operación de baterías y celdas de combustibles: pero aun hay una significativa falta de entendimiento de sus características estructurales (es decir, localización exacta de los aglutinantes) y el impacto de la anisotropía tridimensional en las propiedades de transporte efectivo a multi-escala. Desde el poro y/o partícula hasta el filtrado de agregados y/o aglomerados. La descripción estructural del electrodo compuesto es crucial para la correcta interpretación de las caracterizaciones experimentales pero además es muy importante para la optimización de la celda de combustible.

En esta charla se discutirá un nuevo modelo computacional que describe la interacción entre los procesos electroquímicos y de transporte a múltiples escalas espaciales. Las capacidades predictivas de nuestra aproximación para establecer y optimizar las relaciones entre el desempeño y la mesoestructura son presentadas en el contexto de tres ejemplos de aplicación:

- Mecanismo de carga y descarga en baterías Li-O<sub>2</sub>;
- Ciclado de baterías Li-S
- Degradación de membranas y corrosión en la celda de combustible PEM
- Mecanismo de descarga en "slurry redox flow batteries"

Finalmente, se discutirán las enormes oportunidades presentes en la combinación de estos modelos con el software de realidad virtual inmersiva para el análisis de datos sobre la base de una experiencia reciente realizada dentro del Programa Erasmus Master M.E.S.C.



[www.fisica.uns.edu.ar](http://www.fisica.uns.edu.ar)



Departamento de Física-UNS

Departamento de Física-UNS