

## Laboratorio de Energías Sustentables

### > Simulación de Monte Carlo de inserción de Li en ánodos de titanatos de litio

Las baterías de iones de litio son dispositivos diseñados para almacenamiento de energía eléctrica que emplean como electrolito una sal de litio que procura los iones necesarios para la reacción electroquímica reversible que tiene lugar entre el cátodo y el ánodo. Una batería de ión litio contiene un ánodo (típicamente de grafito, aunque puede ser de otros materiales, como titanatos de litio), un cátodo comúnmente formado por un óxido metálico de Litio y un electrolito que consiste en una solución de sal de litio en un solvente orgánico. Entre las principales ventajas de los ánodos de titanato de Litio, se pueden listar las siguientes: 1) Barato, seguro y fácil de preparar. 2) Buena movilidad del ión Li (mayor que en grafito). 3) Cambio de volumen despreciable durante los procesos de carga y descarga. 4) Baja formación de interfase de electrolito sólida (SEI) y poca descomposición del electrolito. 5) Buena reversibilidad en el procesos de inserción y desinserción de los iones Li, con buena estabilidad estructural. Por otro lado, hay algunas desventajas: 1) Baja conductividad electrónica. 2) Capacidad específica teórica de  $175\text{mAhg}^{-1}$  (relativamente baja comparada con la del grafito,  $372\text{mAhg}^{-1}$ ). Más allá de la relativamente baja capacidad, las ventajas que presentan los titanatos de litio los convierten en buenos candidatos para usos estacionarios (como baterías de casas) o vehículos pesados. Objetivo. Estudiar titanatos de Li, en su función como ánodos de baterías de ión-Li, mediante técnicas de simulación computacional de tipo Monte Carlo y Monte Carlo cinético. Simulación Monte Carlo. Se desarrollará un programa de Monte Carlo reticular tridimensional, para simular el ingreso y posibles estados de equilibrio del Li dentro de las estructuras de los ánodos de titanato de Litio. También se puede desarrollar un programa de Monte Carlo cinético para estudiar los procesos de difusión de los átomos de litio, conectando el comportamiento microscópico, con lo que se observa macroscópicamente. Las energías se calcularán en base a cálculos de tipo DFT o relacionados con dicha técnica.

>>> **Docente:** María Cecilia Gimenez – Correo: [cecilia.gimenez@unc.edu.ar](mailto:cecilia.gimenez@unc.edu.ar)  
**Más información:** <http://www.laesunc.com/laes/>

### > Estudios de adsorción, difusión y disociación de amoníaco sobre superficies metálicas, mediante DFT

Algunos de los principales desafíos sociales en los tiempos actuales son los crecientes problemas ambientales, los recursos fósiles limitados y la dependencia geopolítica del petróleo crudo. Debido a las limitaciones de los combustibles fósiles, hoy en día se hace imprescindible el estudio de fuentes de energía renovables (como la eólica, la energía solar, etc.). En este contexto, es de gran importancia el desarrollo de sistemas eficientes de conversión de energía (tales como celdas solares y celdas de combustible), y almacenamiento de energía (tales como supercapacitores y baterías). En particular, existe un proyecto multimillonario para invertir en producción de “hidrógeno verde” en la provincia de Río Negro y el transporte del hidrógeno está previsto que sea en forma de amoníaco ( $\text{NH}_3$ ). Por ello resulta de particular interés el estudio

de los mecanismos microscópicos de producción y disociación del amoníaco para recuperar el hidrógeno a partir de estas moléculas. Objetivo y método de cálculo. Se estudiará, con el programa Quantum Espresso la formación, adsorción, difusión y disociación de moléculas de amoníaco sobre superficies y nanopartículas metálicas, con el objetivo de encontrar las condiciones óptimas para su utilización en celdas de combustible.

>>> **Docente:** María Cecilia Gimenez – Correo: [cecilia.gimenez@unc.edu.ar](mailto:cecilia.gimenez@unc.edu.ar)

**Más información:** <http://www.laesunc.com/laes/>

### > **Simulaciones de Monte Carlo y estudios de percolación de aleaciones bidimensionales de metales sobre superficies**

El estudio de fenómenos superficiales es de fundamental importancia en catálisis, desde el punto de vista de la electroquímica y en un campo de creciente importancia tecnológica en los últimos tiempos, el de la nanotecnología. El estudio del proceso de adsorción de un átomo metálico sobre un sustrato de naturaleza diferente sirve para entender la deposición de monocapas y submonocapas metálicas, como así también la formación de conglomerados, crecimiento cristalino, transiciones de fase superficiales y muchos otros fenómenos. En la presente propuesta, se estudiará un fenómeno denominado percolación. Cuando una partícula se encuentra situada en un sitio vecino a otra partícula, se dice que ambas partículas pertenecen a la misma isla o “cluster”. Se considera que el sistema “percola” cuando una misma isla atraviesa toda la superficie. **MODELO Y METODO DE CALCULO.** Emplearemos aquí un modelo reticular para representar la adsorción de átomos de un metal sobre una superficie (100) de otro metal, en presencia de defectos superficiales, mediante simulaciones de tipo Monte Carlo gran canónico y canónico. Las energías se calculan con un método semiempírico apropiado para metales, denominado método del átomo embebido. Se realizarán barridos lineales del potencial químico para obtener las isotermas de adsorción (grado de cubrimiento en función de potencial químico) en simulaciones gran canónicas. Para el caso de estudios de percolación, las simulaciones serán canónicas, estudiándose la probabilidad de percolación para cada grado de cubrimiento,  $\theta$ , y realizando simulaciones para diferentes tamaños de sistema. Como el umbral de percolación está definido para sistemas infinitos y, en la práctica, computacionalmente se pueden estudiar sistemas finitos, se realizan técnicas de escaleo y se extrapolan los resultados para tamaño infinito.

>>> **Docente:** María Cecilia Gimenez – Correo: [cecilia.gimenez@unc.edu.ar](mailto:cecilia.gimenez@unc.edu.ar)

**Más información:** <http://www.laesunc.com/laes/>

