



**Propuesta de Trabajo Fin de Grado del Doble Grado en Física y Matemáticas  
(curso 2023-2024)**

*Responsable de tutorización:* Silvia Ahualli Yapur

*Correo electrónico:* sahualli@ugr.es

*Departamento:* Física Aplicada

*Área de conocimiento:* Física Aplicada

*Responsable de cotutorización:* Juan Calvo Yagüe

*Correo electrónico:* juancalvo@ugr.es

*Departamento:* Matemática Aplicada

*Área de conocimiento:* Matemática Aplicada

*(Rellenar sólo en caso de que la propuesta esté realizada a través de un estudiante)*

*Estudiante que propone el trabajo:*

*Título:* Transporte de iones en electrodos porosos. Aplicación a la desionización capacitiva y producción de energía azul.

*Número de créditos:* 6 ECTS 12 ECTS

*Tipología del trabajo (marcar una o varias de las siguientes casillas):*

- 1. Revisiones y/o trabajos bibliográficos sobre el estado actual de aspectos específicos relacionados con la titulación
- 2. Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática de la titulación, a partir del material disponible en los centros
- 3. Trabajos experimentales, de toma de datos de campo, de laboratorio, etc.
- 4. Elaboración de nuevas prácticas de laboratorio
- 5. Elaboración de un informe o un proyecto en el ámbito del grado de naturaleza profesional
- 6. Trabajos relacionados con las prácticas externas

*Descripción y resumen de contenidos:*

La superficie es determinante en escala nanométrica por su gran relación superficie/volumen y en un gran número de aplicaciones. Si la superficie adquiere carga eléctrica cuando está en contacto con una disolución, se produce una atracción electrostática entre ella y los iones de signo contrario (contraiones) y repulsión con los del mismo signo (coiones), que se distribuyen en un cierto volumen próximo a la superficie. Al conjunto formado por la superficie y la región con exceso de contraiones y defecto de coiones, se lo conoce como Doble Capa Eléctrica. Su existencia es determinante, no sólo desde el punto de vista fundamental, sino por las aplicaciones o tecnologías relacionadas con ella.

La Doble Capa Eléctrica se caracteriza por tener una muy alta capacidad eléctrica y tiene aplicaciones directas cuando la superficie disponible para almacenar carga es muy grande (supercondensadores, por ejemplo). Es el caso de electrodos de carbón activado, idóneos por su alta conductividad, que tienen poros desde unos pocos nanómetros de espesor y superficies específicas del orden de los 1000 m<sup>2</sup>/g. Entre las aplicaciones que han despertado un gran interés por su carácter medioambiental podemos mencionar a la desionización capacitiva (CDI) [1] o la generación de energía por diferencias de salinidad o energía azul (CDP) [2,3]. En el primer caso,

los iones se almacenan en los poros del electrodo y son retirados así de la disolución. En el segundo, una disminución de la salinidad produce una expansión de la Doble Capa Eléctrica, y al igual que un condensador en el que se alejan las placas a carga constante, el potencial entre las placas aumenta.

El perfil del potencial eléctrico y la cinética de los iones cerca de la interfase son aspectos claves para predecir su comportamiento y aumentar la eficiencia en los procesos tecnológicos [1]. En este trabajo se pretende un estudio del mecanismo de transporte de los iones desde la disolución hacia los nanoporos, elaborando para ello un modelo bidimensional del electrodo.

#### *Actividades a desarrollar:*

*En primer lugar, se hará una revisión bibliográfica acerca del tema que se irá ampliando a medida que se desarrolle el trabajo.*

*El trabajo comenzará con los aspectos teóricos. Se partirá de un modelo unidimensional de la adsorción de iones que se extenderá a otro bidimensional, en el que se tendrá en cuenta no sólo la difusión de iones y electromigración desde la disolución hacia los poros, sino también el movimiento del fluido.*

*Se pretende resolver las ecuaciones que gobiernan el sistema usando métodos de simulación numérica.*

*El trabajo experimental consiste en ensayos de desionización de disoluciones y la producción de ciclos de energía por intercambio de salinidad usando electrodos porosos.*

*Se interpretarán los resultados y su acuerdo con las predicciones del modelo teórico.*

#### *Objetivos planteados*

Elaboración de un modelo teórico bidimensional del transporte iónico en medios porosos.

Simulación numérica de las ecuaciones que gobiernan el sistema para predecir la dinámica de carga del electrodo y la distribución de iones en los poros del mismo.

Estudio experimental de la desionización y generación de energía usando electrodos porosos. Análisis de los resultados y acuerdo con las predicciones teóricas.

#### ***Bibliografía***

[1] S. Ahualli, G.R. Iglesias, M.M. Fernandez, M.L. Jimenez, A.V. Delgado, Use of Soft Electrodes in Capacitive Deionization of Solutions, *Environmental Science & Technology*, 51 (2017) 5326-5333.

[2] S. Ahualli, M.L. Jimenez, M.M. Fernandez, G. Iglesias, D. Brogioli, A.V. Delgado, *Physical Chemistry Chemical Physics* 16 (46) (2014) 25241-25246.

[3] D. Brogioli, *Physical Review Letters*, 103 (5) (2009).

Firma del estudiante  
(solo para trabajos propuestos por estudiantes)

Firma del responsable de tutorización  
(solo para trabajos propuestos por estudiantes)

Firma del responsable de cotutorización (*en su caso*)  
(solo para trabajos propuestos por estudiantes)

En Granada, a 18 de mayo de 2023