



## 1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

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

**Descripción general (resumen y metodología):**

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.

Si se piensa en la enorme capacidad asociada con la Doble Capa Eléctrica que se forma cuando un sólido cargado está en contacto con una solución iónica (un ejemplo típico es el supercondensador), no es sorprendente que hayan surgido múltiples aplicaciones en los últimos años. Nuestro grupo ha estudiado estos sistemas capacitivos para la producción de energía por intercambio de salinidad, CDLE (Capacitive Energy Extraction Based on Double Layer Expansion) utilizando para ello diferentes tipos de electrodos de carbón poroso. Otro procedimiento similar es el que recibe el nombre de CDP (Capacitive Donnan Potential) [1] donde se emplean membranas de intercambio iónico, una catiónica y otra aniónica, que se colocan junto a los electrodos, entre ellos y la solución salina.

Recientemente hemos incrementado la energía extraída por este método mediante la utilización de electrodos recubiertos con una capa delgada de polielectrolito iónico. El recubrimiento en ambos electrodos (electrodos "soft") [2], positivo para uno de ellos y negativo para el otro, tiene la ventaja de que el sistema no requiere de una fuente externa para su funcionamiento, ya que entre los electrodos se origina una diferencia espontánea de potencial, potencial "Donnan", que produce una corriente cuando ambos se conectan externamente. Si se alterna una solución salina concentrada (agua de mar) con otra diluida (agua de río), la diferencia de potencial generará corrientes que van alternativamente moviendo carga en uno u otro sentido y de esta forma produciendo energía eléctrica.

El perfil del potencial eléctrico y la cinética de los iones cerca de la interfase cuando se intercambian las disoluciones de diferente concentración son aspectos claves para predecir su comportamiento y aumentar la eficiencia en los procesos tecnológicos.

En este trabajo se pretende realizar un estudio del mecanismo de transporte de los iones desde la disolución hacia los nanoporos, elaborando para ello un modelo unidimensional 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 para describir intercambio de disoluciones, en el que se tendrá en cuenta también la difusión de iones y electromigración desde la disolución hacia los poros.

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

Finalmente, se interpretarán los resultados y se determinará su acuerdo con los resultados experimentales en la producción de ciclos de energía por intercambio de salinidad usando electrodos porosos.

**Tipología:** Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado.

**Objetivos planteados:**

- Elaboración de un modelo teórico monodimensional del transporte iónico en medios porosos.
- Simulación numérica de las ecuaciones que gobiernan el sistema para predecir la dinámica del cambio de potencial del electrodo cuando se intercambia una disolución de diferente concentración iónica.
- Comparación con datos experimentales de generación de energía usando electrodos porosos. Análisis de los resultados y acuerdo con las predicciones teóricas.

**Bibliografía básica:**

[1] Direct power production from a water salinity difference in a membrane-modified supercapacitor flow cell

BB. Sales, M. Saakes, JW. Post, CJN. Buisman, PM. Biesheuvel, HVM. Hamelers, Environmental Science & Technology, 44 (2010):14 5661-5665

[2] Polyelectrolyte-coated carbons used in the generation of blue energy from salinity differences

S. Ahualli, ML. Jiménez. MM. Fernández, G. Iglesias, D. Brogioli, AV Delgado, Physical Chemistry Chemical Physics, 16 (2014):46, 25241-25246

**Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:**

**Plazas:** 1

**2. DATOS DEL TUTOR/A:**

**Nombre y apellidos:** SILVIA ALEJANDRA AHUALLI YAPUR

**Ámbito de conocimiento/Departamento:** FÍSICA APLICADA

**Correo electrónico:** sahualli@ugr.es

**3. COTUTOR/A DE LA UGR (en su caso):**

**Nombre y apellidos:** JUAN CALVO YAGÜE

**Ámbito de conocimiento/Departamento:** MATEMÁTICA APLICADA

**Correo electrónico:** juancalvo@ugr.es

**4. COTUTOR/A EXTERNO/A (en su caso):**

**Nombre y apellidos:**

**Correo electrónico:**

**Nombre de la empresa o institución:**

**Dirección postal:**

**Puesto del tutor en la empresa o institución:**

**5. DATOS DEL ESTUDIANTE:**

**Nombre y apellidos:** Diego Sebastián Moreno Ceacero

**Correo electrónico:** diegosmc@correo.ugr.es