

INFORME CIENTIFICO DE BECA

Legajo N°:

BECA DE Estudio PERIODO 2014

1. APELLIDO: CESPEDES

NOMBRES: Carlos German

Dirección electrónica (donde desea recibir información): germancespedes@gmail.com

2. TEMA DE INVESTIGACIÓN (Debe adjuntarse copia del plan de actividades presentado con la solicitud de Beca)

ESTUDIO DE ESTRATEGIAS PARA LA OPTIMIZACIÓN DE UN SISTEMA DE CONVERSION DE ENERGIA BASADO EN CELDAS DE COMBUSTIBLE

3. OTROS DATOS (Completar lo que corresponda)

BECA DE ESTUDIO: 1º AÑO: *Fecha de iniciación:* 04/2014

2º AÑO: *Fecha de iniciación:*

BECA DE PERFECCIONAMIENTO: 1º AÑO: *Fecha de iniciación:*

2º AÑO: *Fecha de iniciación:*

4. INSTITUCIÓN DONDE DESARROLLA LOS TRABAJOS

Universidad y/o Centro: CITEMA (Centro de Investigación y desarrollo en Ciencia y Tecnología de Materiales)

Facultad: Universidad Tecnológica Nacional - Facultad Regional La Plata

Departamento: Ingeniería Química

Cátedra:

Otros:

Dirección: Calle: 120 y 64 *Nº:* s/n

Localidad: La Plata *CP:* 1900 *Tel:* 0221-4124300

5. DIRECTOR DE BECA

Apellido y Nombres: CASTRO LUNA, Ana María

Dirección electrónica: castrolu@gmail.com

6. EXPOSICIÓN SINTÉTICA DE LA LABOR DESARROLLADA EN EL PERIODO. (Debe exponerse la orientación impuesta a los trabajos, técnicas empleadas, métodos, etc., y dificultades encontradas en el desarrollo de los mismos, en el plano científico y material).

Durante el primer año de la beca de estudio se trabajó en los primeros estadios de la generación de modelos matemáticos que permitan describir los procesos físico-químicos que ocurren en el ánodo y el cátodo de una celda de combustible, tales como la electro-oxidación de metanol o hidrógeno y la electro-reducción de oxígeno.

En primer lugar para estudiar el cátodo de una celda de hidrógeno/oxígeno se realizó con éxito la simulación de curvas de polarización para la electro-reducción de oxígeno obtenidas en el laboratorio, con catalizadores que también han sido sintetizados en el laboratorio. El modelo usado considera que la electroreducción de oxígeno transcurre en sucesivas etapas de difusión de los reactivos a la interface electrodo/solución, adsorción sobre la superficie electródica y transferencia electrónica que da lugar a la conversión de oxígeno en agua. En consecuencia, se utilizaron las ecuaciones de Butler-Volmer y Nernst-Planck, y se consideró una adsorción tipo Langmuir del reactivo. Tomando en cuenta que la etapa determinante de la velocidad de la reacción es la transferencia electrónica se procedió a la simulación de curvas de polarización para la electro-reducción de oxígeno. Los resultados fueron presentados para su discusión en la 3ra Reunión de materiales tecnológicos en Argentina (MATTEAR 2014).

Por otra parte si en vez de una celda de hidrógeno/oxígeno se considera una celda de metanol directo, el reactivo para el ánodo es una solución de metanol y el cátodo se alimenta con oxígeno o aire. Uno de los problemas asociados a esta celda es el inevitable transporte de metanol al compartimiento catódico, lo que provoca la simultánea oxidación de metanol, MOR, y reducción de oxígeno, ORR, con consecuencias catastróficas para la performance de la celda de alcohol directo.

Tomando en cuenta las curvas de polarización experimental para la electro-reducción de oxígeno en presencia de metanol, usando diferentes catalizadores multi-componentes, se procedió a la simulación de las mismas. Para la MOR se consideró que el metanol se oxida a CO₂ considerando un mecanismo de reacción de sucesivas etapas de electrosorción del metanol y oxidación de los residuos de alcohol adsorbidos y se tomó en cuenta el rol, no solo de las especies provenientes del alcohol, sino de las especies oxigenadas necesarias para la conversión del alcohol en CO₂. Los resultados de este análisis del cátodo para la celda de alcohol directo se presentaron en el III Workshop Nacional de Celdas de Combustible (CCArIII).

Por otra parte, para la celda de hidrógeno/oxígeno, se ha propuesto un modelo matemático que pretende demostrar cómo afectan el desempeño de la celda variaciones en la conductividad de la membrana (PEM) debidas i) contenido de humedad ii) espesor de la membrana y iii) temperatura de trabajo .

Tomando en cuenta que una celda de combustible está compuesta de distintas capas tales como las capas de difusión de gases y las capas catalíticas, que son de naturaleza porosa, se propuso el uso de modelos de poro simple para evaluar los sobrepotenciales de concentración y de activación, la caída óhmica en la celda. Los resultados de este análisis fueron presentados en las Terceras Jornadas de Intercambio y Difusión de los Resultados de Investigaciones de los Doctorandos en Ingeniería UTN Mendoza.

Todas las simulaciones fueron realizadas computacionalmente mediante la asistencia de programas específicos como ser Matlab, Python y Octave. Además, se desarrollaron programas de visualización de datos necesarios para el manejo ágil y eficiente de un gran volumen de datos experimentales que se dispone dentro del grupo de investigación y que permite reducir los tiempos de análisis, ya sea con fines teóricos o experimentales.

Como parte de la formación experimental se ha participado en la síntesis de catalizadores multi-metálicos en base a platino que se utilizan en el cátodo de una celda de alcohol directo, intentando que estos , sean tolerantes a la presencia de metanol. Se han utilizado métodos de reducción química de precursores metálicos, se ha realizado la caracterización fisicoquímica de los mismos por vía electroquímica como a través de técnicas de análisis de superficies. A la fecha se han enviado a revistas internacionales relacionadas con el tema, para su consideración dos manuscritos sobre los temas explicado anteriormente

Se ha comenzado a adquirir la destreza necesaria para la preparación de MEAs que son el corazón de la celda de combustible y donde ocurre las reacciones electrocatalíticas para lograr la conversión de energía química en energía eléctrica. Se ha participado en la preparación de electrodos técnicos para una celda de hidrógeno/oxígeno en el grupo de conversión y almacenamiento de energía (CAE) del INIFTA. Con estos electrodos se han realizado diferentes ensayos en la preparación de la capa catalítica con el objetivo de obtener una buena desempeño de la celda de combustible. En las MEAs preparadas con las capas catalíticas se han debido tomar en consideración la presión de ensamble, temperatura, variaciones en la distribución de la capa catalítica, etc.

Otras actividades realizadas en el año, consistieron en la realización de cursos de posgrado en la Universidad Tecnológica Nacional - UTN, la Universidad Nacional de Córdoba - UNC, y la Universidad Nacional de La Plata – UNLP, exigidos para la carrera de Doctorado en Ingeniería, Mención Materiales UTN.

7. TRABAJOS DE INVESTIGACIÓN REALIZADOS O PUBLICADOS EN EL PERIODO.

7.1. PUBLICACIONES. Debe hacerse referencia, exclusivamente a aquellas publicaciones en la cual se halla hecho explícita mención de su calidad de Becario de la CIC. (Ver instructivo para la publicación de trabajos, comunicaciones, tesis, etc.). Toda publicación donde no figure dicha aclaración no debe ser adjuntada. Indicar el nombre de los autores de cada trabajo, en el mismo orden que aparecen en la publicación, informe o memoria técnica, donde fue publicado, volumen, página y año si corresponde; asignándole a cada uno un número. En cada trabajo que el investigador presente -si lo considerase de importancia- agregará una nota justificando el mismo y su grado de participación.

1) (Proceeding) _ M ASTEAZARAN; G CESPEDES; S. BENGIO; MS MORENO; WE TRIACA; AM CASTRO LUNA. "Searching suitable catalysts for a passive DAFC cathode". Italia. Taormina. 2014 Pag 217. Libro. Resumen. Congreso. Euromediterranean Hydrogen Technologies Conference (EmHyTeC2014).
E-Book: http://www.itae.cnr.it/emhytec2014/emhytec_files/e-BoA_EmHyTeC2014.exe

7.2. PUBLICACIONES EN PRENSA. (Aceptados para su publicación. Acompañar copia de cada uno de los trabajos y comprobante de aceptación, indicando lugar a que ha sido remitido. Ver punto 7.1.)

7.3. PUBLICACIONES ENVIADAS Y AUN NO ACEPTADAS PARA SU PUBLICACIÓN. (Adjuntar copia de cada uno de los trabajos. Ver punto 7.1.)

1) M ASTEAZARAN; G CESPEDES; S. BENGIO; MS MORENO; AM CASTRO LUNA. "Research on methanol-tolerant catalysts for the oxygen reduction reaction". Mexico, Cancún. 2015. Journal of Applied Electrochemistry.

2) M ASTEAZARAN; G CESPEDES; S. BENGIO; MS MORENO; W.E. TRIACA, AM CASTRO LUNA. "Searching Suitable Catalysts for a passive DAFC cathode". Italia, Taormina. 2015. International Journal of Hydrogen Energy

7.4. PUBLICACIONES TERMINADAS Y AUN NO ENVIADAS PARA SU PUBLICACIÓN. (Adjuntar resúmenes de no más de 200 palabras)

1) G CESPEDES; AM CASTRO LUNA. "Efectos de la membrana de intercambio de protones en el desempeño de una celda de combustible H₂/O₂". Tecnología Y Ciencia. Buenos Aires: UTN SCyT.

7.5. COMUNICACIONES. (No consignar los trabajos anotados en los subtítulos anteriores)

7.6. TRABAJOS EN REALIZACIÓN. (Indicar en forma breve el estado en que se encuentran)

8. OTROS TRABAJOS REALIZADOS. (Publicaciones de divulgación, textos, etc.)

8.1. DOCENCIA

8.2. DIVULGACIÓN

8.3. OTROS

9. ASISTENCIA A REUNIONES CIENTÍFICAS. (Se indicará la denominación, lugar y fecha de realización y títulos de los trabajos o comunicaciones presentadas)

1) G. CESPEDES; M. ASTEAZARAN; G. COCHA; A. CASTRO LUNA. Primeros estadios en el modelado y simulación de una reacción electrocatalítica. Aplicación en la electroreducción de oxígeno. Argentina. Mayo 2014. Congreso. III Reunión Materiales Tecnológicos en Argentina - M@ttear 2014.

2) M ASTEAZARAN; G CESPEDES; G COCHA; AM CASTRO LUNA. Síntesis, Caracterización y aplicación de nuevos materiales tecnológicos para tecnologías limpias. Celda de combustible de alcohol directa. Estudio teórico y experimental de la reacción de reducción de Oxígeno.. Argentina. Mayo 2014. Congreso. III Reunión Materiales Tecnológicos en Argentina - M@ttear 2014.

3) G CESPEDES; M ASTEAZARAN; WE TRIACA; AM CASTRO LUNA. Simulación de la reacción de reducción de oxígeno en presencia de Metanol. Argentina. Junio 2014. Workshop. III Workshop Nacional sobre Celdas de Combustible - CCAr III.

4) M ASTEAZARAN; G CESPEDES; S. BENGIO; MS MORENO; WE TRIACA; AM CASTRO LUNA. Research on Methanol-Tolerant Catalysts for the Oxygen Reduction Reaction. México. Cancún. Octubre 2014. Congreso. XI VInternational Congress of the Mexican Hydrogen Society.

5) G CESPEDES; AM CASTRO LUNA. Influencia de diferentes parámetros de la membrana en el desempeño de una celda de combustible H₂/O₂. Argentina. Mendoza. Noviembre 2014. Jornada. Terceras jornadas de intercambio y difusión de los resultados de investigaciones de los doctorandos en ingeniería. Universidad Tecnológica Nacional

6) M ASTEAZARAN; G CESPEDES; S. BENGIO; MS MORENO; WE TRIACA; AM CASTRO LUNA. Searching Suitable Catalysts for a Passive DAFC Cathode. Italia. Taormina. Diciembre 2014. Congreso. Euro-mediterranean Hydrogen Technologies Conference.

10. CURSOS DE PERFECCIONAMIENTO, VIAJES DE ESTUDIO, ETC. (Señalar características del curso o motivo del viaje, duración, instituciones visitadas y si se realizó algún entrenamiento)

1) CURSO: "Espectroscopia de Fotoemisión", 27/10/2014 al 31/10/2014, Universidad Nacional de Córdoba, Facultad de Matemática, Astronomía y Física, Córdoba. Carga Horaria: 20 hs. Certificado de Aprobación en trámite.

- 2) CURSO: "Introducción a la Quimiometría, Optimización Molecular y Modelado QSAR/QSPR", 20/10/2014 al 21/10/2014, Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – La Plata. Carga horaria: 16 hs. Certificado de aprobación en trámite.
- 3) CURSO: "Impacto de las Energías Renovables en Ciencia, Tecnología y Sociedad", 29/09/2014 al 30/09/2014, Universidad Tecnológica Nacional, Buenos Aires. Carga Horaria: 20 hs. Certificado de Aprobación en trámite.
- 4) CURSO: "Introducción a programación, cálculo numérico y simulación para científicos." 08/08/2014 al 12/12/2014, Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos, IFLISYB, La Plata. Carga Horaria: 70 hs. Certificado de Aprobación en trámite.
- 5) CURSO: "Bases teóricas y metodológicas de la investigación", 27/11/2014 al 05/12/2014, Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional La Plata, La Plata. Carga Horaria: 50 hs. Certificado de Aprobación en trámite.

11. DISTINCIONES O PREMIOS OBTENIDOS EN EL PERIODO

12. TAREAS DOCENTES DESARROLLADAS EN EL PERIODO

Cargo: Ayudante de trabajos prácticos de primera, Dedicación Simple, Periodo lectivo 2014.
Remuneración: AD-Honorem

Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional La Plata.

Cátedra: "Control Automático de Procesos", y "Modelización y simulación de procesos industriales"

Titular de la Cátedra: Mg. Ing. Guillermo R. Cocha

13. OTROS ELEMENTOS DE JUICIO NO CONTEMPLADOS EN LOS TITULOS ANTERIORES (Bajo este punto se indicará todo lo que se considere de interés para la evaluación de la tarea cumplida en el período)

14. TITULO DEL PLAN DE TRABAJO A REALIZAR EN EL PERIODO DE PRORROGA O DE CAMBIO DE CATEGORÍA (Deberá indicarse claramente las acciones a desarrollar)

ESTRATEGIAS PARA LA OPTIMIZACIÓN DE UN SISTEMA DE CONVERSION DE ENERGIA BASADO EN CELDAS DE COMBUSTIBLE.

Para el segundo año de la beca de estudio los objetivos generales son:

1-Profundizar en el conocimiento sobre como diferentes parámetros primarios afectan el funcionamiento de la celda de combustible. Entre los parámetros a estudiar están aquellos relacionados con la composición de los catalizadores, el tipo y espesor de membrana que se utiliza, la temperatura de la celda, la temperatura y el contenido de humedad requerido en los gases reactivos, la presión a la entrada de los gases a la celda, etc. También se deberá considerar el contenido de agua en la celda para evitar que se produzcan inundaciones en el ensamble Electrodo-Membrana-Electrodo (MEA) que disminuyan la performance de la celda. Para tal fin, se recurrirá al uso de modelos matemáticos, que tomen en consideración las relaciones corriente /potencial que proporciona la teoría electroquímica, las variaciones en la concentración de los reactivos expresadas en función de las ecuaciones de difusión/convección relacionadas al transporte de materia. Los modelos matemáticos se simularán variando los parámetros anteriores y con los resultados obtenidos desde el análisis teórico se realizaran comparaciones entre estos y los obtenidos experimentalmente con la celda de combustible unitaria que se construirá en el laboratorio de celdas de combustible FRLP UTN.

Los modelos matemáticos mencionados arriba se aplicarán en la determinación de las condiciones óptimas de operación de la celda de combustible.

Experimentalmente se continuará con la búsqueda de catalizadores multi-metálicos para la reacción de reducción de oxígeno (ORR) que si deben ser usados en la celda de metanol deberán ser tolerantes a la presencia de metanol. Con el catalizador catódico óptimo y uno comercial para usar en el ánodo se procederá a la fabricación de MEAs.

El comportamiento electroquímico de los ensambles, utilizando diferentes técnicas electroquímicas, será estudiado en una celda de combustible unitaria. Mediante técnicas físicas y electroquímicas se evaluará la durabilidad a tiempos largos de los catalizadores sintetizados y se comparará su desempeño con catalizadores comerciales.

Se proponen los siguientes objetivos particulares:

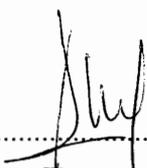
- i) Desarrollar modelos computacionales para simular y evaluar el comportamiento del prototipo contrastándolo con los resultados experimentales con el fin de establecer estrategias para el desempeño óptimo de la celda de combustible.
- ii) Construir ensambles Electrodo-Membrana-Electrodo, tanto con catalizadores comerciales como con catalizadores sintetizados en el laboratorio.
- iii) Evaluar el desempeño de las MEAs realizadas en una celda de combustible, y determinar su resistencia a largos periodos de tiempo.
- iv) Evaluar del comportamiento en operación y estabilidad de una celda de combustible mediante técnicas físicas y electroquímicas.

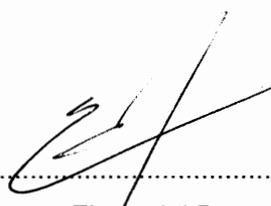
Condiciones de Presentación

A. El Informe Científico deberá presentarse dentro de una carpeta, con la documentación abrochada y en cuyo rótulo figure el Apellido y Nombre del Becario, la que deberá incluir:

- a. Una copia en papel A-4 (puntos 1 al 14).
- b. Las copias de publicaciones y toda otra documentación respaldatoria, deben agregarse al término del desarrollo del informe
- c. Informe del Director de tareas con la opinión del desarrollo del becario (en sobre cerrado).

Nota: El Becario que desee ser considerado a los fines de una prórroga, deberá solicitarlo en el formulario correspondiente, en los períodos que se establezcan en los cronogramas anuales.


.....
Firma del Director


.....
Firma del Becario