

## **Fenómenos interfaciales en las baterías de ion litio y de litio/azufre**

**Perla B. Balbuena**  
**Department of Chemical Engineering, Texas A&M University**  
**College Station, TX, 77843**  
[balbuena@tamu.edu](mailto:balbuena@tamu.edu)

Varios de los fenómenos más importantes de los cuales depende el funcionamiento de las baterías ocurren en la interface entre el electrodo y el electrolito. Aunque generalmente el grueso de las investigaciones se enfoca en los materiales que funcionan como electrodos, la vida útil de la batería está estrechamente relacionada a fenómenos de degradación que generalmente aparecen en la interface. De hecho, la película que se genera en la superficie del electrodo, conocida como “interfase solido-electrolito” (SEI layer en inglés) es uno de los aspectos más fascinantes de la fisico-química de las baterías.

En esta charla voy a discutir varios problemas asociados con la nucleación y crecimiento de SEI layers sobre ánodos de Silicio y de carbón. Especialmente nos enfocaremos en el problema de transferencia de electrones del electrodo al electrolito después que el SEI layer crece más allá de los espesores permitidos para “tunneling” de electrones, y en las diferencias en las características de la SEI layer en función del agregado de ciertos aditivos. También hablaremos sobre el efecto del área superficial del carbón en las reacciones interfaciales y de sus efectos sobre la disminución de la capacidad de la batería debido al SEI layer. Finalmente voy a discutir nuestros resultados más recientes sobre la batería de litio/azufre, sus problemas y posibles soluciones que involucran en este caso ambos electrodos y el rol fundamental del electrolito para controlar y mitigar los efectos no deseados. Todo el trabajo es computacional, usando métodos de primeros principios, siempre discutidos en el contexto de los resultados experimentales.