

La Gaceta

ÓRGANO OFICIAL DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL DE INGENIERÍA

////////////////////////////////////
AÑO LIX LIMA 12 DE DICIEMBRE DE 2024 NÚMERO 141
////////////////////////////////////



UNIVERSIDAD NACIONAL DE INGENIERÍA

Escuela de Posgrado

UNIVERSIDAD NACIONAL DE INGENIERÍA Escuela de Posgrado

Se invita a la comunidad universitaria a participar de la videoconferencia de la defensa pública virtual de la Tesis de **DOCTORADO EN CIENCIAS CON MENCIÓN EN QUÍMICA**, del M.Sc. Víctor Raúl Jauja Ccana, a realizarse el día miércoles 18 de diciembre de 2024, a las 16h00.

TÍTULO DE LA TESIS:

**“INVESTIGACIÓN QUÍMICO-COMPUTACIONAL Y EXPERIMENTAL
PARA EL DISEÑO DE NUEVOS MATERIALES APLICADOS EN BATERÍAS
RECARGABLES DE ION LITIO: ELECTROLITOS Y ÁNODOS”**

ASESOR

Dr. ADOLFO LA ROSA TORO GÓMEZ
Docente Principal de la Facultad de Ciencias
UNIVERSIDAD NACIONAL DE INENIERÍA

RESUMEN

Esta tesis se centra en la aplicación de métodos avanzados de química computacional, para predecir propiedades y desarrollar nuevos materiales electrolíticos y anódicos. El estudio de nuevos electrolitos líquidos basados en soluciones acuosas superconcentradas (agua, sales de Li, aditivos y/o cosolventes) se realizó un screening por DFT de las propiedades electrónicas, energía de orbitales frontera (HOMO-LUMO) y potenciales redox calculados a través de ciclos termodinámico. Mientras que la a estructura física y dinámica del electrolito, así como el efecto del agua en estos sistemas han sido estudiados a través de métodos de MD. Los resultados muestran la relación que tienen parámetros como la función de distribución radial y el número de coordinación de las moléculas de agua a los cationes Li^+ con la reactividad del sistema electrolítico; así como el desplazamiento cuadrático medio del Li^+ es relacionado a la conductividad iónica (Li^+) del electrolito.





UNIVERSIDAD NACIONAL DE INGENIERÍA

Escuela de Posgrado

Estos parámetros son de gran importancia en las LIBs. A partir de estos resultados, se desarrolló el sistema electrolítico agua – acetato de litio – urea para su estudio experimental en el que se utilizaron electrodos comerciales (LTO y TiO₂ como ánodos; LFP y LMO como cátodos), evaluando propiedades como ventana de estabilidad electroquímica del electrolito, compatibilidad con los electrodos. Para el desarrollo de nuevos ánodos, se realizó un estudio mediante DFT para materiales grafénicos. Se evaluó la inclusión de distintos grupos funcionales y dopantes (O, N, S y F) en el grafeno y su efecto en las propiedades electrónicas (densidad de estados DOS y estructura de bandas), las energías de adsorción de los metales (Li, Na y K) así como la distribución de las cargas atómicas. El Gr-NH₂ mostró mejores valores de conductividad eléctrica y reversibilidad en la adsorción del Li. Este mismo análisis fue realizado para evaluar el efecto de diferentes configuraciones de dopaje con N (grafítica, pirrónica y piridínica) determinando así la contribución de cada una en su performance como ánodo en LIBs.

ENLACE

La Escuela de Posgrado UNI le está invitando a una reunión de Zoom programada.

Tema: SUSTENTACION DE TESIS

FECHA: miércoles 18 de diciembre de 2024

HORA: 16h30 Lima

Entrar Zoom Reunión

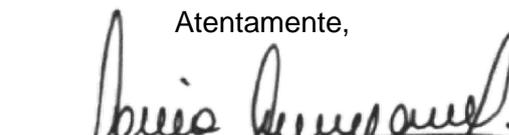
<https://us02web.zoom.us/j/81875520558?pwd=OBtsMvra4vm8yiSc10YbEPdVxkbbiV.1>

ID de reunión: 818 7552 0558

Código de acceso: 694022



Atentamente,


M.Sc. SONIA ANAFAN ULLOA
SECRETARIA GENERAL



EDITOR: SECRETARÍA GENERAL UNI
IMPRESA DE LA EDUNI