

# Modelos *all-atom* del transporte selectivo de iones a través de electrolitos y membranas de polielectrolitos. Aplicación a baterías Li-S

Autores: Javier Luque Di Salvo, Giorgio De Luca, Guillermina Luque

En algunas baterías se utiliza un separador poroso de base polimérica para aislar el contacto directo entre cátodo y ánodo, a la vez que garantizar una alta conductividad iónica. Sin embargo, los mismos no son aptos en baterías de nueva generación, como ser la batería de litio-azufre (Li-S) o las baterías secas (*all-solid*). En particular, la batería Li-S posee 5 veces más capacidad específica teórica respecto a las baterías de ion-litio. Sin embargo, varios problemas asociados a la disolución descontrolada del cátodo S-C, durante la reducción  $S_8 + 16 Li^+ \rightarrow 8Li_2S - 16e^-$ , conlleva al transporte de polisulfuros de litio intermediarios solubles en el electrolito hacia el ánodo, pasivándolo y generando la pérdida de material catódico irreversiblemente. Entre las diferentes estrategias para suprimir el llamado *shuttle* de polisulfuros, una de ellas es utilizar membranas funcionales a través de las cuales se busca transportar selectivamente litio, bloqueando simultáneamente el paso de polisulfuros. En este seminario se mostrarán resultados de un análisis conformacional de hexasulfuro de litio  $Li_2S_6$  en varias mezclas de 1,2-dioxolano y dimetiletoxietano (DOL:DME) a varias fracciones molares, como un estudio fundamental en el modelado atómico direccionado al diseño de separadores para baterías Li-S.

En un marco más general, se ilustrarán métodos de dinámica molecular y complementarios aplicados al estudio de mecanismos de transporte iónico en polímeros polielectrolitos (resinas iónicas, membranas de intercambio iónico) y sistemas nanoestructurados donde la solvatación iónica se ve perturbada por estar en geometrías nano-confinadas.

