



Contribution ID : 52

Type : not specified

Estudio del efecto de superficie en la adsorción de H₂O sobre β -PbO₂

Saturday, 14 August 2021 14:15 (20)

El dióxido de plomo en fase beta (tetragonal) es uno de los principales materiales que conforman el material activo, en las baterías de plomo ácido (BPA). Esta batería de poseen distintas fallas, siendo la pérdida de agua, uno de los más importantes. Por lo tanto, estudiar la interacción entre el H₂O y los materiales que componen el material activo en las BPA, es muy importante. En este trabajo, se usa la teoría funcional de la densidad, implementado en el software Quantum Espresso, para calcular la energía de adsorción de una molécula de H₂O sobre diferentes superficies de β -PbO₂, y β -PbO₂-OX (con oxígeno reticular). Los resultados muestran la estabilidad de las superficies (110) y (101), y la fuerte influencia del oxígeno reticular sobre la energía de adsorción, logrando mecanismos de fisisorción y quimisorción.

Primary author(s) : Mr GOMEZ QUISPE, Juan Rafael (Universidade Federal do ABC)

Co-author(s) : Dr MIRANDA BARRETO, Lucas Almeida (Universidade Federal do ABC); Dr CHAMPI FAN, Ana Melva (Universidade Federal do ABC); Dr OLIVEIRA BRITO, Gilberto Alberto (Universidade Federal de Uberlândia)

Presenter(s) : Mr GOMEZ QUISPE, Juan Rafael (Universidade Federal do ABC)

Session Classification : parallels

Track Classification : Materials Science and Nanotechnology