



Contribution ID : 139

Type : key notes

## Diseño práctico de materiales de baterías y para otras aplicaciones en energías renovables usando principios de física de superficies

*Friday, 16 December 2022 16:30 (45)*

La Ciencia de Materiales ha tenido mucho progreso hasta la fecha usando métodos empíricos. Sin embargo, la posibilidad de predecir las propiedades físicas, solamente a partir del conocimiento de la estructura cristalina y usando métodos de Mecánica Cuántica computacionales, está avanzando a un paso acelerado. En esta presentación mostramos algunos ejemplos de aplicación de esta filosofía para el desarrollo de materiales de baterías. Usando una combinación de Teoría de Funcionales de Densidad (DFT) con una gran variedad de mediciones de propiedades, incluyendo espectroscopía de absorción de rayos x suaves (sXAS) en el Sincrotrón Australiano, pudimos entender que las superficies de las partículas de material de batería se diferencian en estructura con respecto al interior de las partículas. Esto nos sugirió que las capas superficiales se pueden aproximar como capas defectuosas que crean niveles de energía dentro de la brecha de bandas de energía del material original. Con esta aproximación la importancia de la “Función de Trabajo” (Work Function) salió a resaltar junto con efectos de juntura entre el interior del material y las capas superficiales, resultando en beneficios para las propiedades.

**Primary author(s) :** ALARCO, Jose (Queensland University of Technology)

**Presenter(s) :** ALARCO, Jose (Queensland University of Technology)

**Session Classification :** keynotes

**Track Classification :** Applied Physics