

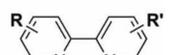
Introducción:

La quema de combustibles fósiles es la principal causa del cambio climático que amenaza a la sociedad actual. Junto al problema de la producción de energía de fuentes renovables, aparece el problema de su almacenamiento. Las baterías de flujo redox son una de las alternativas más prometedoras. Este proyecto busca estudiar y proponer moléculas orgánicas adecuadas para su uso en baterías de flujo redox acuosas.

Estrategia: seleccionar una familia de moléculas, predecir sus propiedades fisicoquímicas (**potencial de reducción, solubilidad, estabilidad química y electroquímica y adsorción en los electrodos y membrana**), para seleccionar las candidatas a ser sintetizadas, caracterizadas electroquímicamente y probadas en celdas de carga y descarga. Este procedimiento se ha seguido exitosamente por el grupo en varias ocasiones.

Familias de moléculas:

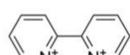
Se han calculado y sintetizado algunos derivados de las siguientes moléculas orgánicas:



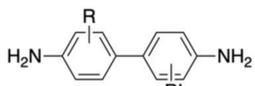
Bipiridina



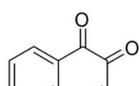
Metil viológeno



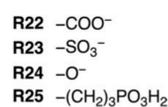
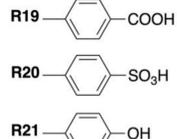
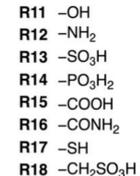
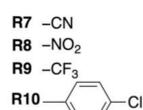
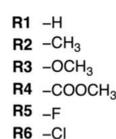
Diquat



Bencindina



Lawsonia



R1-R25: Grupos funcionales utilizados

Estabilidad electroquímica:

Desarrollar modelos basados en cálculos de mecánica cuántica. El factor más importante es la velocidad con la que ocurre la reacción de transferencia electrónica (reducción).

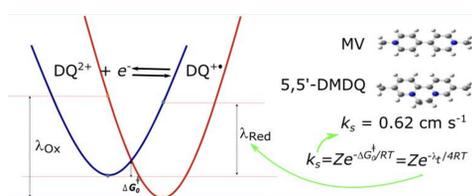


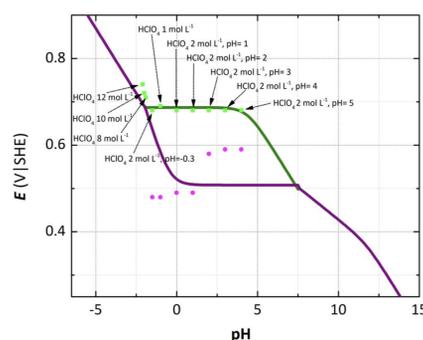
Table 1. Experimental $E_{1/2}$, Calculated E^0 , and Kinetic Experimental Data of Compounds Studied

compound	$E_{1/2}$ (V) (vs SHE)	E^0 (V) (vs SHE)	k_s (cm s ⁻¹)
DQ	-0.460	-0.493	0.35
4,4'-DMDQ	-0.580	-0.609	0.22
5,5'-DMDQ	-0.578	-0.634	0.62
6,6'-DMDQ	-0.565	-0.615	0.28
MV	-0.514	-0.575	^a
(SP ₂) ₂ ²⁺ -Vi ²⁺	-0.481	-0.607	0.22
BTMAP ²⁺ -Vi ²⁺	-0.416	-0.321	0.28

Potenciales de reducción teóricos y experimentales, así como constantes de velocidad de derivados del diquat y del metil viológeno. Ref [1].

Potencial de reducción:

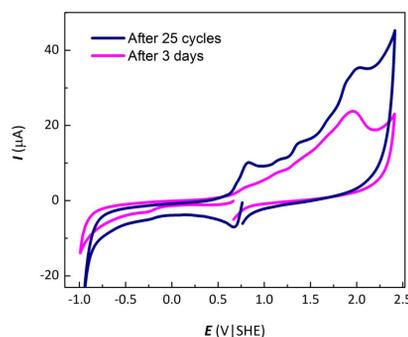
Diagrama de Pourbaix teórico para determinar las mejores condiciones de operación. Comparación y calibración con datos experimentales.



Comparación de diagramas de Pourbaix teórico y experimental de un derivado de bencidina. Ref [2].

Estabilidad química:

Desarrollar modelos basados en descriptores de reactividad química de la DFT. Garantizar que los compuestos no reaccionan con el medio para tener larga vida útil.



Voltamperograma cíclico de un derivado de la bencidina tras 25 ciclos de carga y descarga y después de 3 días de los ciclos, Ref. [2].

Perspectivas:

- Estudiar otras familias de moléculas y sus derivados
- Desarrollar métodos de aprendizaje de máquina y de inteligencia artificial para acelerar la predicción de las propiedades
- Desarrollar los diversos modelos basados en los métodos de la química cuántica para la predicción de las propiedades.

Posibilidades de colaboración:

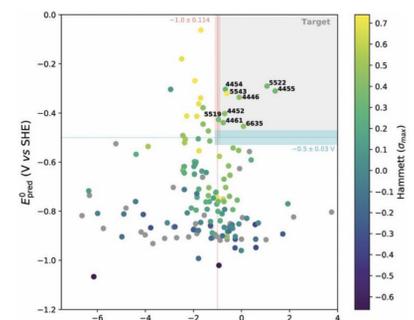
- Grupos de Química computacional, para el desarrollo de los modelos
- Grupos de Química experimental, que quisieran probar sus moléculas en este contexto o sintetizar nuevas moléculas ex-profeso para la aplicación
- Grupos de estudios de Economía, para evaluar la factibilidad de esta tecnología en el contexto actual
- Grupos de estudios de Sociología, para estudiar el impacto de estas tecnologías en la sociedad

Referencias:

- Eduardo Martínez-González, Humberto G. Laguna, Mariano Sánchez-Castellanos, Sergio S. Rozenel, Víctor M. Ugalde-Saldívar, y Carlos Amador-Bedolla, Kinetic Properties of Aqueous Organic Redox Flow Battery Analytes Using the Marcus-Hush Theory, *ACS Appl. Energy Mater.*, **3**, 8833 (2020).
- Martha M. Flores-Leonar, Gloria Acosta-Tejada, Humberto G. Laguna, Carlos Amador-Bedolla, Mariano Sánchez-Castellanos, y Víctor M. Ugalde-Saldívar, Benzidine Derivatives as Electroactive Materials for Aqueous Organic Redox Flow Batteries, *ACS Omega*, **8**, 32432 (2023).
- Mariano Sánchez-Castellanos, Martha M. Flores-Leonar, Zaahel Mata-Pinzón, Humberto G. Laguna, Karl M. García-Ruiz, Sergio S. Rozenel, Víctor M. Ugalde-Saldívar, Rafael Moreno-Esparza, Joep J. H. Pijpers and Carlos Amador-Bedolla, Theoretical exploration of 2,20-bipyridines as electro-active compounds in flow batteries, *Phys.Chem.Chem.Phys.*, **21**, 15823 (2019).

Solubilidad:

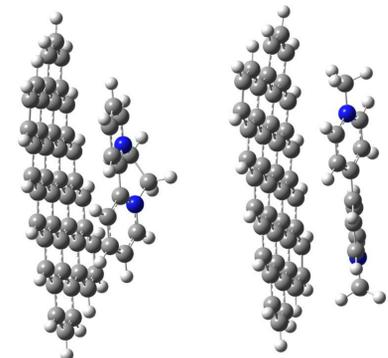
Desarrollo de modelos de solubilidad en agua, no es simple, deben ser específicos para nuestras familias. No han funcionado los modelos existentes



Potencial de reducción contra el logaritmo de la solubilidad (log S), calculado con el programa ChemAxon para las bipyridinas estudiadas, Ref. [3].

Adsorción a los electrodos y la membrana:

Estudios de Monte Carlo para determinar cuáles compuestos se adsorben a la membrana o al electrodo.



Modelos de adsorción del metil viológeno (MV) y el diquat (DQ) al electrodo, el MV se adsorbe, Ref [1].