

## PLAN DE TRABAJO

De conformidad con lo establecido en el Artículo 48, de la Resolución Administrativa No. 191 de 31 de julio de 2017 de la **SENACYT**, se agrega el Anexo No. 1 del presente Contrato por Mérito, que contiene el Plan de Trabajo adecuado del proyecto **“Desarrollo tecnológico para la nueva generación de baterías de ion-litio por medio de recubrimientos de películas delgadas de Diamante Ultrananocristalino”** beneficiado dentro de la Convocatoria Pública de Fomento a la Investigación y Desarrollo (FID) 2017, de conformidad con las siguientes cláusulas:

**CLÁUSULA PRIMERA:** El plan de trabajo quedará como sigue

### DATOS DEL BENEFICIARIO

**Nombre completo:** Fundación Tecnológica de Panamá  
**Representante Legal:** Amador Hassell Torres  
**Número de cédula:** 8-99-307  
**Fecha de nacimiento:** 14 de marzo de 1941  
**Lugar de nacimiento:** Panamá  
**Nacionalidad:** Panameña  
**Dirección postal:** 0819-07289- Plaza Centennial, Centro Plaza, local #6  
**Teléfonos:** 260-0549, 260-0616  
**Correo electrónico:** [amador.hassell@utp.ac.pa](mailto:amador.hassell@utp.ac.pa)

### DATOS DEL INVESTIGADOR PRINCIPAL

**Nombre Completo** Elida Isabel de Obaldia Villarreal  
**Número de cédula** 4-138-2260  
**Fecha de nacimiento** Marzo 2, 1960  
**Lugar de nacimiento** David, Rep. de Panamá  
**Nacionalidad** Panameña  
**Teléfonos** 560 3757 ó 833 9080 ó 6576 1821  
**Correo electrónico** elida.deobaldia@utp.ac.pa

**TIEMPO TOTAL DE EJECUCIÓN  
DE LA PROPUESTA:** **26 meses**

**MONTO TOTAL DEL PROYECTO:** **B/. 120,000.00**

## 1. ANTECEDENTES DE LA PROPUESTA

El acelerado desarrollo de la tecnología de acumuladores energéticos tanto de ordenadores portátiles, teléfonos celulares inteligentes (smartphones), tabletas electrónicas portátiles u otros dispositivos móviles, ha planteado la necesidad de producir baterías de más larga vida después de carga, tal que provean un aumento de un orden de magnitud, si es posible, en el ciclo de vida de estos dispositivos, después de cargar la batería, a efecto de aprovechar simultáneamente la eficiencia que ofrecen, así como la posibilidad de perpetuar la misma durante su uso, indicador que nos señalaría el incremento de la vida útil del dispositivo. Un efecto adicional que es muy importante es que las baterías sean mucho más seguras para evitar accidentes causados por calentamiento descontrolado como el que ocurrió con la batería de un teléfono celular en el 2016, que resultó en dos billones de dólares de pérdida para la compañía de clase mundial en Corea.

Existen diversas tecnologías en las celdas electroquímicas que constituyen las baterías, no obstante, en lo que respecta a la presente propuesta nos avocaremos a aquellas celdas de tipo secundario, las cuales incluyen a las baterías de ion-litio (Li-ion baterías (LIB)) que son las más importantes comercialmente en el tiempo presente.

La revisión del estado del arte nos señala que el Litio (Li), elemento perteneciente al grupo I, de la tabla periódica, tiene el potencial reductor más negativo que el de los demás metales de la tabla periódica de los elementos, lo cual resulta en que el ion Li proporcione un alto voltaje de circuito abierto y cuya consecuencia es la más baja tasa de auto-descarga (alrededor de 2% mensual [1]), así como la inexistencia de efecto de memoria de la batería. Las primeras baterías (LiBs (por su sigla en inglés) fueron creadas por la compañía Sony en las décadas de los 80, donde el medio electrolito era acuoso. Sin embargo, no fue hasta el año 1996 cuando el medio electrolítico líquido fue sustituido por un polímero sólido compuesto, y electrodos y separador laminados.

En la LiBs, el flujo de iones de  $\text{Li}^+$  desde el ánodo al cátodo se produce mediante el uso de un electrolito no acuoso, que a su vez permite la separación de los electrodos debido a que el Li es demasiado reactivo para ponerse en contacto directo. Cabe señalar que los electrolitos a emplearse deben ser completamente aproticos (no ceden, ni aceptan protones, aunado a que no tienen enlace O-H ni N-H en su estructura [2]) y lo suficientemente polares para disolver las sales de Li, tal como se puede observar en la Figura 1, donde podemos observar una celda que utiliza como ánodo el carbón en su forma grafeno (el cual tiene una hibridación  $\text{sp}^2$ , y un orbital tipo sigma ( $\sigma$ ) que es perpendicular al orbital  $\pi$  restante, y por lo tanto el orbital  $\sigma$  tiene un electrón débilmente ligado en consecuencia puede saltar de orbital a orbital [3]), y un óxido de metal de transición como cátodo, donde el proceso electroquímico consiste básicamente en la des-intercalación de los iones  $\text{Li}^+$  de la estructura del grafeno en el ánodo, mientras que en el cátodo ocurre simultáneamente la intercalación de iones  $\text{Li}^+$  en la estructura de óxido metálico la cual representa la descarga de la celda [4]. El grafito ha sido tradicionalmente el material utilizado ampliamente para la fabricación del ánodo para LiBs, en el mercado de LIBs hoy, como se presenta en la Figura 2:

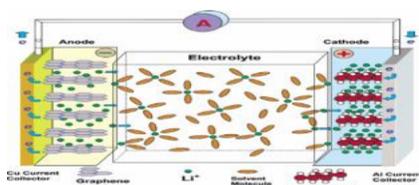


Figura 1: Esquema de celda LIB con ánodo de carbón grafito y cátodo de en forma grafeno, mostrando de cobalto.

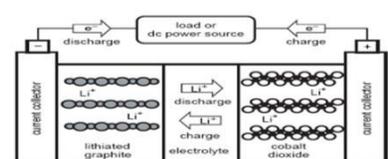
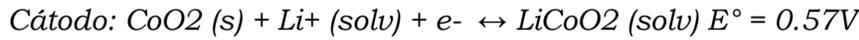
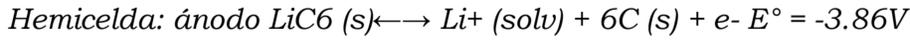
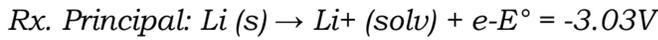


Figura 2: LIBs con ánodo de transferencia de  $\text{Li}^+$ . óxido

Las reacciones implicadas en la celda anterior se esquematizan a continuación:



Como podemos observar, la ionización de átomos de Li extraídos del ánodo sólido, como así también, la reacción electrolítica del ánodo no son espontaneas, es decir que la energía libre de Gibbs es mayor que cero ( $\Delta G > 0$ ), para ambas reacciones, mientras que en el cátodo es ( $\Delta G < 0$ ), siendo pues esta ultima una pila de tipo galvánica y por lo tanto produciendo una corriente eléctrica proporcional al potencial termodinámico según la expresión [5]:  $\Delta G^\circ = -nFE^\circ$ ; siendo n, el número de electrones por mol de producto, y F la constante de Faraday de magnitud 96485 C/mol.

La reacción global es reversible, por lo tanto, si aplicamos una corriente inversa, se podría incrementar la vida útil de la batería, dado que las degradaciones de los electrolitos orgánicos tardan más tiempo que los electrolitos acuosos [6]. La siguiente tabla muestra algunas de las reacciones del ion  $Li^+$  [6]:

**Intercalation Hosts Used as Cathodes  
for Lithium Batteries**

Host Compound	Cell Reaction	$E_{cell}/V$
$CoO_2$	$nLi(s) + CoO_2(s) \rightarrow Li_nCoO_2(s)$	3.8-4.5
$V_2O_5$	$nLi(s) + V_2O_5(s) \rightarrow Li_nV_2O_5(s)$	2.9-3.6
$MnO_2$	$nLi(s) + MnO_2(s) \rightarrow Li_nMnO_2(s)$	2.5-3.2
$TiS_2$	$nLi(s) + TiS_2(s) \rightarrow Li_nTiS_2(s)$	1.6-2.5
$MoO_2$	$nLi(s) + MoO_2(s) \rightarrow Li_nMoO_2(s)$	0.8-1.9

El grafito, usado como polvo de grafito natural (natural graphite-NG) embebido en láminas de cobre (Cu), para ánodos comerciales actuales de LiBs, presenta un ataque químico extenso, resultando en la degradación del ánodo y reduciendo la duración de la energía específica de la LIB como función de la carga/descarga de la LIB. Un buen funcionamiento de las LiBs requiere una capa protectora entre los electrodos y el electrolito. Esta capa se forma instantáneamente con el contacto de los metales con la solución. Cuando el material activo (grafito natural (NG)) se expande y se contrae producto de la reacción de litación/delitización, en la capa de la interfase solido electrolito (SEI), se consume de forma irreversible el Li necesario para que ocurra la reacción electroquímica, por lo que cada vez que la batería se carga o descarga, se incrementa esta capa acortando la vida de la batería [7, 8].

Por otro lado, las LiBs presentan un ciclo de vida relativamente pobre a altas corrientes, dado al aumento de la resistencia interna con ciclos y edades, así como problemas de seguridad producto del sobrecalentamiento y/o sobrecarga [1]. Estos efectos requieren que las aplicaciones a altas corrientes contengan una alta capacidad de almacenamiento de la LIB, así como la perpetuidad de la eficiencia del dispositivo para garantizar largo periodo de vida útil de los mismos.

Basados en la información presentada arriba, la presente propuesta se enfoca en realizar la investigación y desarrollo tecnológico para generar nuevas LiBs, basadas en el uso de láminas delgadas de diamante ultrananocristalino (ultranancrystalline diamond (UNCD)-nombre en Inglés de la tecnología original de este material en forma de láminas delgadas) [9] como recubrimiento de gran resistencia a la corrosión de Li, para proteger los componentes internos de las LIBs, a saber: ánodo, cátodo, membranas separadoras de ánodos y cátodos, las paredes internas de las cápsulas metálicas que contienen los componentes de las LIBs. Las láminas de UNCD exhiben una multitud de propiedades únicamente integradas [9] en un solo material, esto es, dureza más grande, característica del diamante, comparada con cualquier otro material, gran resistencia al ataque químico de cualquier elemento corrosivo, y resistente al desgaste mecánico,

eléctricamente aislante cuando la lámina de UNCD es producida sin introducción de átomos de nitrógeno (N) en los bordes de grano y ópticamente transparente desde el ultravioleta (UV) hasta el infrarrojo (IR) [10]. Una propiedad única de las láminas de UNCD es que se pueden hacer eléctricamente conductoras cuando se incorporan átomos de nitrógeno (N) en los bordes de grano del UNCD (llamado N-UNCD) con hibridación  $sp^2$  en los enlaces químicos de los átomos de C, aportando un electrón débilmente adherido en la orbital sigma [8], haciendo este material ideal para la protección de ánodos de LIBs de la corrosión química producida por iones  $Li^+$ . Básicamente, se propone una mejora de  $\geq 10x$  en la vida media de las LIBs con ánodos y cátodos recubiertos con N-UNCD, por medio de la prevención del ataque químico que existe dentro de la batería debido a los efectos en los ciclos de carga-descarga. Este desarrollo implica la integración de las películas de N-UNCD con nano-carbonos y matriz metálica para la obtención de ánodos mejorados. Cabe señalar que una de las principales características de las láminas aisladoras de UNCD y conductoras eléctricas N-UNCD es que ambas son inertes a los ataques químicos de líquidos corrosivos o gases, tal y cual se ha demostrado a través de experimentos realizados por el Dr. O. Auciello y colaboradores, evidenciando que los recubrimientos de UNCD y N-UNCD son resistentes a Li fundido, como a los ataques químicos incluso al ácido fluorhídrico [9].

La Figura 3 muestra un ánodo de NG/Cu cubierto por una lámina de N-UNCD donde se puede distinguir claramente el recubrimiento de los NG con N-UNCD [9]. La foto (b) de la Figura 3 muestra la imagen de microscopia electrónica de barrido (MES) de los granos de NG recubierto con lámina de N-UNCD, mientras que las Figuras 3 (c) y (d) muestran imágenes de microscopia electrónica de transmisión de alta resolución, incluyendo figuras de difracción de electrones que confirman la presencia de diamante.

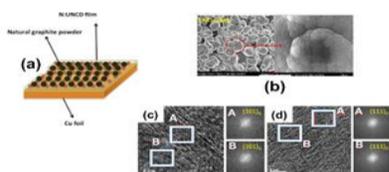


Figura 3: a) esquema de un ánodo de NG/Cu; b) imagen de MES mostrado el material NG cubierto con lámina de N-UNCD; c) and d) imágenes de alta resolución de microscopia electrónica de transmisión de ánodo NG/Cu cubierto por N-UNCD.

Mediciones eléctricas revelaron que LIBs con ánodo de NG/Cu recubiertos con N-UNCD no presenta desgaste estructural ni eléctrico después de 100 ciclos de carga/descarga, como sucede con el caso de las LIBs con ánodos no recubiertos con láminas de N-UNCD; como muestra a Figura 4(b), donde se muestra el ciclo de descarga/carga de electrodos de grafito natural sin recubrimiento y con recubrimiento de N-UNCD dopado con nitrógeno. La Figure 4 (c) muestras curvas de difracción XRD, de los ánodos sin recubrimiento para el primer ciclo de carga-descarga (negro) y después de 100 ciclos (rojo) izquierdo. Mostrando degradación química. Los ánodos recubiertos con N-UNCD-N para el primer ciclo carga/descarga (negro) y después de 100 ciclos (rojo), muestra no degradación, confirmando que el recubrimiento de N-UNCD elimina la corrosión química por Li.

La propuesta, además de la investigación de procesos descritos arriba, se enfoca también en el diseño y desarrollo de la metodología para el revestimiento de los electrodos y de la pared interna de las capsulas contenedoras de los componentes de LIBs, basadas en el metal aluminio (Al es el metal de más bajo costo en el mercado (\$0.74 dólares/libra) vs el costo del siguiente metal (\$7-8 dólares/libra) en el mercado. El uso de Al para las capsulas de LIBs, con recubrimiento de UNCD aislador, como mecanismo de prevención de corrosión, promoverá la utilización del metal de más bajo costo para capsulas de LIBs. La tecnología de recubrimiento de Al por láminas de UNCD puede generar una patente compartida por la Universidad de Texas en Dallas (UTD) y la Universidad Tecnológica de Panamá (UTP), como resultado de un convenio de cooperación investigación existente entre ambas entidades, así como la formación de recursos humanos especializados en esta temática en Panamá, para producir un impacto en la escala nacional e internacional. Este impacto se basará en la aplicabilidad de la nueva generación de LIBs con superior rendimiento, más larga vida de

carga/descarga, y más seguras que las LIBs en el mercado hoy, para una gran variedad de dispositivos que requieren energía eléctrica producida por LIBs, como son: a) marcapasos/desfibriladores que hoy requieren cambio de LIBs en 7-8 años después de ser implantados en pacientes, debido a la degradación de los ánodos, b) LIBs que permitan cargar los teléfonos portátiles cada semana o dos en vez de cada noche como ocurre con los teléfonos con LIBs hoy, c) laptops y otros dispositivos energizados por LIBs, d) posible aplicación en la industria de fabricación de automóviles eléctricos y mercados regionales de energía beneficiados por los mecanismos de eficiencia y/o rendimiento de LIBs que la investigación propuesta produzca.

## **2. JUSTIFICACIÓN Y PROBLEMA A INVESTIGAR**

Entre los esfuerzos globales para disminuir la dependencia de combustibles fósiles e incidir con estrategias tendientes a la mitigación y/o adaptación al cambio climático, está la promoción de la investigación científico-técnica para el desarrollo e implementación de nuevas tecnologías que contribuyan al desarrollo económico de un país y simultáneamente contribuyan a controlar el medio ambiente para mejorar ciclo de vida. Ejemplos de tecnologías que impactarán el modo y calidad de vida son los automóviles eléctricos y las paredes de poder (Power Walls) para almacenamiento de energía basados en energía renovables.

No obstante, aspectos como el sobrecalentamiento, durabilidad (por ciclo de carga/descarga), voltaje muy variable, hacen que las LIBs de hoy tengan un ciclo de vida corto. Así mismo se estima que el consumo de carburo de litio para el diseño de LIBs, aumento en un 350% desde el 2008 hasta el 2016 [11], hecho que pone de manifiesto un desbalance entre la demanda y suministro de la materia prima, por la escasez del elemento en la corteza terrestre. La investigación y desarrollo propuestos producirán un adelanto transformativo en el ciclo de vida, capacidad de almacenamiento de energía y seguridad de LIBs mediante el recubrimiento de electrodos con láminas de conducción eléctrica de N-UNCD que eliminan la corrosión química de Li, y láminas aislantes de UNCD para recubrimiento de paredes internas de las capsulas de LIBs, que también eliminan la corrosión química por Li, de tal manera que ambos mejoramientos incrementarán la eficiencia de la nueva generación de LIBs, aliviando la demanda de la materia prima.

Un aspecto de vital importancia a resaltar para la implementación de la presente propuesta es el actual intercambio de información y experiencia científico técnica existente entre la Universidad Tecnológica de Panamá (UTP) y la Universidad de Texas en Dallas (UTD), aunado a que los aportes en especies de ambas entidades para el desarrollo de la investigación propuesta supera el medio millón de dólares (ver presupuesto adjunto y notas de compromiso de ambas entidades). Así mismo el proponente principal Dra. Elida de Obaldía de la UTP, esta estratégicamente posicionada para llevar acabo la presente propuesta en conjunto con el Dr. Orlando Auciello del Departamento de Materiales y Biotecnología de la UTD, quien cuenta con los equipos necesarios para el desarrollo de la presente propuesta aunado al hecho de que el Dr. Auciello es uno de los inventores de la tecnología de láminas de UNCD y actualmente líder mundial en las aplicaciones de la tecnología de recubrimientos de UNCD para LIBs usadas en una gran variedad de dispositivos y sistemas de alta tecnología. No cabe duda de que la experticia de la Dra Vanessa Quintero, reintegrándose a la UTP a finales del año, en la mediciones y análisis de LIBs es una parte esencial para el logro de esta propuesta. Más aún, este proyecto será grandemente favorecido con la participación del Dr. Jesús Alcántara, recientemente graduado, bajo la dirección del Dr. Auciello, con una tesis de primer nivel mundial sobre la ciencia y tecnología de láminas de UNCD para una nueva generación de micro/nano electrónica basada en diamante, más allá de silicio. El proyecto también incluye balance genérico y de ciencias, con la participación de la estudiante de PhD Michelle Salgado, quien está comenzando sus estudios doctorales en el tema de baterías, y quien cuenta con amplia experiencia en la rama de

materiales. Esperamos contactar con un estudiante de doctorado o un staff miembro de la UTP que hará una pasantía en el área de optimización de películas delgadas de UNCD así como la fabricación de las LIBs y sus indicadas mediciones.

### **3. PERTINENCIA EN RELACIÓN CON EL PLAN ESTRATÉGICO NACIONAL DE CIENCIA, TECNOLOGÍA E INNOVACIÓN (PENCYT) 2015-2019**

La Política Nacional de Ciencia y Tecnología e Innovación 2015-2019 de Panamá, específicamente en las actividades contenidas en los Programas 1 y 4 del Plan Estratégico, resalta la necesidad de ejecutar proyectos de investigación sobre los sistemas de actuales de producción y su relación con los recursos agua/suelo y la implementación de la política energética; así como la promoción de una cultura de ciencia e investigación para generar capacidades propias en Panamá [12].

En este sentido, la Secretaria Nacional de Ciencia y Tecnología y la Universidad Tecnológica de Panamá, han desarrollado distintos programas académicos a efecto de desarrollar capacidades técnicas en lo referente a investigación científica y a su vez capturar recursos humanos competentes que puedan hacer contribución al desarrollo tecnológico científico del País, a efecto de cumplir con lo señalado en el PENCYT. Uno de estos programas pertenece al área de las ciencias físicas, que busca fortalecer y/o crear recursos humanos con capacidades técnicas especializadas tanto para la modelación de diferentes fenómenos físicos como el diseño y/o mejora de procesos eléctricos/electrónicos. En relación a la visión del PENCYT, esta propuesta impulsará en primera instancia el conocimiento científico-técnico especializado, mediante desarrollo de recubrimientos protectores de UNCD/N-UNCD en la interfase de la matriz comprendida entre los electrodos, electrolitos y las paredes internas de las capsulas de LIBs, de tal manera que el ciclo galvánico carga/descarga no tenga impacto adverso en el rendimiento del sistema y por lo tanto promueva la durabilidad de las LIBs. Este hecho incrementa la fase de uso de la LIBs, coadyuvando a la preservación ambiental bajo dos enfoques: 1) emisión toxico nula por la perpetuidad del sistema LIBs 2) desarrollo y/o mejora de los sistemas de almacenamiento de energía existentes, mediante la incorporación de una nueva generación de LIBs, recubiertos de láminas de UNCD and N-UNCD, en el mercado de la industria electrónica y energética e inclusive automotriz (autos eléctricos), así como su potencial uso en el rubro medico (caso de los marcapasos u otros implantes que requieren baterías de más larga vida que las usadas actualmente).

En vista del contexto científico y tecnológico descrito arriba, se incluye en la presente propuesta la participación de estudiantes pertenecientes al programa de ciencias físicas en calidad de maestría, a efecto de que por un lado puedan desarrollar sus respectivos trabajos de graduación y por el otro se especialicen en esta nueva línea, contribuyendo de esta manera a que Panamá se ponga a la vanguardia en los esfuerzos mundiales para la mitigación del cambio climático, mediante la formación de recursos humanos especializados en tópicos científicos y tecnológicos in situ (pasantía en UTD y México, sedes de la empresas promotoras del recubrimiento UNCD) relativos a la promoción de ciencia y tecnología que contrarresten y/o solucionen la realidad no solamente del territorio nacional sino a nivel mundial por la envergadura y/o impacto que la implementación del proyecto pueda representar. Aspecto que da cumplimiento a lo señalado en el artículo 1 de la Ley 50 del 2005 y al PENCYT precitado, en lo que respecta a Panamá como País.

### **4. BENEFICIOS Y PRINCIPALES BENEFICIARIOS**

El principal beneficio de la propuesta es la generación de conocimiento científico-técnico de los fenómenos que intervienen en el transporte de carga en las LIBs recubiertas con UNCD/N-UNCD según sea el caso, comparadas con el funcionamiento de las LIBs con componentes no recubiertos con láminas de UNCD/N-UNCD, aunado al desarrollo comercial que el producto resultante de esta propuesta pueda tener en el mercado. La investigación básica y aplicada de este proyecto permitirá diseñar y fabricar un prototipo LIB con componentes cubiertos con láminas de UNCD/N-UNCD y demostrar la superior eficiencia, esperada de resultados anteriores [9], comparadas con LIBs actualmente en el mercado con componentes sin recubrimiento de UNCD/N-UNCD. Como efecto colateral a corto plazo se prevé la implementación de LIBs con componentes recubiertos con UNCD/N-UNCD en dispositivos médicos insertables en el cuerpo humano (e.g.,

desfibrilador/marcapaso) con órdenes de magnitud de más larga vida que los dispositivos implantados actualmente, para eliminar el reemplazo requerido en dispositivos actuales en periodos de 7-8 años. El proyecto proveerá a mediano plazo resultados de valor de la investigación pertinente en el almacenamiento energético a gran escala, como paso importante para impactar los mercados nacionales y/o regionales de energía, así como la industria de automóviles inteligentes por el incremento demostrado del ciclo de vida en carga/descarga de las LIBs con componentes recubiertos con UNCD/N-UNCD.

Por otro lado, el hecho de que dos Instituciones líderes como son UTD and UTP and dos países líderes en ciencia y tecnología en América (USA y Panamá), se prevé que el principal beneficiario será tanto la comunidad científica nacional e internacional, la industria biomédica, los mercados de energía renovables e híbridos, la industria de automóviles inteligentes durante la transición del uso y desuso de combustibles fósiles. De lograrse la implementación de la propuesta, Panamá estará contribuyendo activamente a la generación de nuevos conocimientos de ciencia y tecnología, así como a la mitigación y/o adaptación al cambio climático a través de la generación de esta nueva generación de LIBs con componentes recubiertos con láminas de UNCD/N-UNCD.

## **5. IMPACTO ESPERADO**

El resultado esperado es el de producir una nueva generación de LIBs con densidad de energía igual o mayor que las actuales LIBs, pero con una mayor vida de carga y descarga y muy importante, más seguridad contra destrucción producida por calentamiento descontrolado de las LIBs actuales, como sucedió en una LIB en un teléfono celular de Samsung en el 2016, que resultó en una pérdida de hasta 2 billones de dólares para la compañía. El objetivo principal de este proyecto es el desarrollo técnico de metodologías con miras al desarrollo de una industria de nuevas LIBs con componentes cubiertos con UNCD/N-UNCD para impactar el mercado mundial de LIBs.

El aprendizaje de las metodologías para el desarrollo de nuevas tecnologías, incluyendo el aspecto científico al igual que el aspecto tecnológico, para impactar la comercialización de una nueva generación de LIBs proveerá un beneficio colateral, en la cual Panamá será elemento activo en la creación de esta nueva tecnología de LIBs. Tanto el diseño y desarrollo de procesos de fabricación de las nuevas LIBs con componentes cubiertos con UNCD/N-UNCD, como las discusiones proyectadas con fabricantes de LIBs para comercialización, incluye la contribución de la ciencia fundamental y aplicada; hecho que guarda relación mutua con lo señalado por el Dr. Auciello durante el VI Congreso de Ingeniería Ciencias y Tecnología llevado a cabo en la ciudad de Panamá durante el mes de octubre del presente año, “hay un constante cambio de enfoque entre la ciencia aplicada y la ciencia básica en el desarrollo de nuevas tecnologías con miras a productos”.

La formación de capital humano con el conocimiento adquirido en este proyecto proveerá una base muy fuerte para la formación y/o reforzamiento de emprendedores científicos, que contribuyan a la comercialización de productos como las LIBs que tienen que pasar por estrictos controles de calidad, a efecto de encontrar oportunidades de mejora y/o optimización de los procesos metodológicos en todas sus etapas. Desde este punto de vista, siendo el aspecto concerniente a verificación de producto terminado (batería LIBs recubierta con UNCD/N-UNCD), un ítem relevante para el territorio nacional es de gran importancia que la investigación y desarrollo se lleve a cabo en el LPMC.

## **6. OBJETIVOS DEL PROYECTO**

### **Objetivo general**

El desarrollo tecnológico para la nueva generación de baterías LIBs por medio de recubrimientos de componentes con láminas de UNCD/N-UNCD.

## Objetivos específicos

1. Desarrollar los procesos para recubrimientos de las paredes internas de las cápsulas de LIBs con láminas aislantes de UNCD con gran resistencia al ataque químico de Li. Estos estudios permitirán optimizar el proceso de recubrimiento de aluminio (Al) (demostrado en estudios realizados en el laboratorio de Dr. Auciello, por la Dra. De Obaldia en los últimos 7 meses), usando las técnicas de MPCVD y HFCVD, lo cual permitirá reemplazar los metales costosos usados en las LIBs actualmente en el mercado, por Al, el cual es el metal menos costoso en el mercado mundial hoy y el más liviano, lo cual permitirá reducir el peso de las nuevas.
2. Optimizar el proceso de crecimiento de láminas de N-UNCD con conductividad eléctrica, para recubrimiento de electrodos de LIBs, mediante el uso de técnicas Microwave plasma Chemical Vapor Deposition (MPCVD) y Hot Filament Chemical Vapor Deposition (HFCVD) para la respectiva elaboración de recubrimientos de ánodos y cátodos de LIBs para protección de ataque químico de Li para minimizar o eliminar la degradación en l capacidad específica de energía observada en LIBs actuales. Los estudios incluirán caracterización de procesos electroquímicos que afectan el funcionamiento de las LIBs.
3. Fabricar los electrodos del ánodo y el cátodo de sus elementos químicos primarios.
4. Fabricar el primer prototipo de LIB, usando los materiales y técnicas descritas arriba (electrodos recubiertos con conductor eléctrico N-UNCD y paredes internas de las cápsulas de LIBs recubiertos con aislante UNCD).
  - a. Determinar los componentes del ánodo y cátodo de mayor compatibilidad para el recubrimiento con láminas de N-UNCD.
  - b. Realizar la caracterización del funcionamiento de LIBs simultáneamente en UTD LPMC, mediante el monitoreo de los siguientes parámetros: voltaje; corriente o intensidad; resistencia interna; potencia a diferentes temperaturas; capacidad de carga y descarga; tolerancia a la temperatura; energía específica y densidad de energía; densidad de potencia y potencia específica; rendimiento; constante de carga/descarga; durabilidad de ciclos y efecto memoria.
5. Realizar cualificaciones de las LIBs para determinar especificaciones en UTD y LPMC
6. Divulgar nacionalmente e internacionalmente los hallazgos de la investigación por congresos nacionales e internacionales, talleres de capacitación a pares nacionales, y publicaciones de artículos en revistas indexadas.
7. Establecer a largo plazo una red de colaboración internacional de la que UTP sea un participante activo de la temática de la nueva generación de LIBs con componentes recubiertos con láminas de UNCD/N-UNCD.sus recursos y esfuerzos para dar solución al problema definido en su proyecto de I+D.
8. Incrementar el capital capacitado formando 2 estudiantes o personal de la UTP en las técnicas de ciencias de los materiales por medio de pasantías a UTD.

## 7. COLABORADORES DEL PROYECTO

### Investigador principal (IP): Dra. Elida de Obaldia\* - UTP – Investigadora invitada UTD

1. Coordinar las actividades del proyecto
2. Emplear estudiantes de doctorado de física ó miembro del staff de la UTP.
3. Emplear estudiantes de maestría científica como asistente de investigación.
4. Garantizar el uso adecuado del equipo adquirido.
5. Establecer la coordinación entre los grupos de UTP y UTD.
6. Entrenar a los estudiantes de la UTP, durante sus pasantías a UTD, en el crecimiento y la caracterización estructural y morfológica de las baterías de ion-litio.
7. Mantener un sitio virtual para la comunicación entre equipo.
8. Planear un taller en Panamá sobre almacenamiento de energía que sirva para el kick off meeting entre los grupos.
9. Servir de mentor a los estudiantes de maestría trabajando en el proyecto.
10. Llevar el estado financiero del proyecto.
11. Ejecutar el recubrimiento de electrodos y caja de LIBs con UNCD y caracterización estructural y morfológica.
12. Elaborar y presentar los avances de la investigación a Senacyt.

13. Realizar las gestiones de propiedad intelectual con las instituciones participantes del proyecto, que permitan asegurar que la UTP participe en la propuesta de patentes que se generen de esta investigación.
14. Participar en la divulgación de los resultados de la investigación. La Dra. De Obaldía pasa de 6 a 7 meses en UTD como investigadora invitada y tiene acceso a los equipos de deposición y caracterización de láminas de UNCD y N-UNCD así como la fabricación y mediciones de la LIBs.  
Dedicación mensual: 50 %.

**Co-investigador 1 (Co-IP 1): Dra. Vanessa Quintero – UTP**

1. Determinar el equipo de mediciones de los LIBs y adquirirlos en la etapa II.
2. Determinar los procesos de mediciones de las baterías.
3. Participar en una pasantía en UTD.
4. Garantizar el uso adecuado del equipo adquirido.
5. Servir de mentor a los estudiantes de maestría trabajando en el proyecto.
6. Desarrollar la metodología para las mediciones de las LIBs.
7. Determinar los procesos de cualificación de las baterías.
8. Coordinar y ejecutar las mediciones de las baterías.
9. Analizar las mediciones de las baterías fabricadas en el laboratorio del Dr. Auciello.
10. Contribuir en la organización de taller de almacenamiento de energías y divulgación de los resultados del proyecto.  
Dedicación mensual: 50 %.

**Co-investigador 2 (Co-IP 2): Dr. Orlando Auciello - Universidad de Texas en Dallas.**

1. Dirección y coordinación de las actividades de crecimiento de láminas de UNCD/ N-UNCD y caracterización de los electrodos y la caja de LIBs en UTD.
2. Servir de mentor a los integrantes del proyecto.
3. Analizar periódicamente los resultados del proyecto y determinar curso a seguir.
4. Coordinar con empresas la implementación de tecnología.
5. Darle seguimiento a cualquier patente o licencia que se logre de este proyecto  
Dedicación mensual: 20 %.

**Co-investigador: 3 (Co-IP): Dr. Eleicer Ching Grupo Nacional: UTP -**

1. Coordinar las actividades en el LPMC, incluyendo espacios y otras actividades.
2. Garantizar el uso adecuado del equipo adquirido.
3. Servir de mentor a los estudiantes de maestría trabajando en el proyecto.
4. Contribuir en la organización de taller de almacenamiento de energías y divulgación de los resultados del proyecto.  
Dedicación mensual: 10 %.

**Grupo Nacional: UTP - Estudiante de doctorado o personal de la UTP – 80% de tiempo dedicado**

1. Participar en pasantía en UTD.
2. Obtener certificación para trabajar en el cuarto limpio de la UTD.
3. Aprender los métodos de deposición y caracterización de las láminas de UNCD.
4. Optimizar los procesos de deposición.
5. Aprender el proceso de ensamblaje de las baterías
6. Llevar un diario detallado de las actividades y resultados experimentales.
7. Analizar los resultados experimentales.
8. Contribuir en la organización de taller de almacenamiento de energías y participar en las actividades de transferencia de conocimiento que arroje el proyecto.

**Grupo Nacional: UTP Estudiante de maestría científica ó personal de la UTP- 50% de tiempo dedicado**

1. Ejecutar las caracterizaciones de las LIBs en el LPMC.
  2. Garantizar el uso adecuado del equipo adquirido.
  3. Llevar un diario detallado de las mediciones.
  4. Participar en una pasantía en UTD de ser necesario para adquirir datos experimentales.
  5. Participar del taller de almacenamiento de energías y divulgación de los resultados del proyecto.
  6. Participar en pasantía en UTD para la capacitación en la manufactura de las baterías.
- Dedicación mensual: 50 %.

**Grupo Internacional: Universidad de Texas en Dallas Dr. Jesús Alcantar**

1. Coordinar y ejecutar las actividades del recubrimiento y caracterización de los electrodos y la caja de LIBs en UTD.
  2. Entrenar a los participantes del grupo en el recubrimiento y caracterización de UNCD.
  3. Participar en las actividades de transferencia de conocimiento del proyecto
  4. Llevar diario de los experimentos y resultados.
  5. Asistir en el crecimiento y mediciones de los productos del proyecto.
- Dedicación mensual: 20 %.

**Grupo Internacional: Universidad de Texas en Dallas Michelle Salazar**

1. Determinar los tipos de electrodos a utilizar en las baterías.
  2. Ejecutar las actividades de recubrimiento y caracterización de los electrodos y la caja de las LIBs en UTD.
  3. Ejecutar el desarrollo del prototipo de LIBs con componentes recubiertos con láminas de UNCD/N-UNCD.
  4. Participar en las actividades de transferencia de conocimiento del proyecto.
  5. Llevar diario de los experimentos y resultados.
- Dedicación mensual: 80 %.

## **8. METODOLOGÍA**

### **Materiales y métodos**

#### Etapa I:

#### Taller de almacenamiento energético y primera reunión – UTP.

Se espera fortalecer la alianza con una reunión entre los miembros del equipo internacional y nacional en Panamá para plantear las tareas pertinentes del proyecto y el calendario de actividades. Además, se establecerán las normas de las comunicaciones, así como los riesgos y las mitigaciones de éstos. Se coordinará el calendario de actividades de los 24 meses que durará el programa. Esta reunión se llevará a cabo en la UTP, Panamá. En esta ocasión se brindará un taller didáctico sobre almacenamiento energético, donde se invitará un experto y se contará con la contribución del grupo. Este taller estará abierto al público y servirá para reclutar el estudiante de maestría y asistente de laboratorio. Productos de la actividad:

1. Cuadro detallado de todas las actividades con su duración, enlaces entre actividades, duraciones de cada actividad, personal responsable. Hitos de las etapas del proyecto, en la plataforma de Xcel o Project Management.
2. Lista de los riesgos potenciales del proyecto y sus mitigaciones.
3. Taller al público didáctico sobre las baterías en general y las nuevas baterías con recubrimiento de UNCD.
4. Lista de los participantes del proyecto incluyendo estudiante de maestría científica y asistente de laboratorio.

Adquisición de insumos para el laboratorio:

Se necesitan adquirir consumos como sustratos, electrodos, nano diamantes, productos protectores para la fabricación de batería entre otros.

Productos de esta actividad:

1. Lista y presupuesto de insumos, uso de equipo con costo adicional en la UTD.

Pasantía de estudiante de doctorado o personal de la UTP en UTD:

El estudiante de doctorado o personal de la UPT realizará una pasantía en UTD bajo la tutela de la Dra. Elida de Obaldía e invitado por el Dr. Orlando Auciello, donde aprenderá las técnicas de deposición y caracterización de UNCD y N-UNCD.

Productos de esta actividad:

1. Evidencia de las destrezas del estudiante certificados por el Dr. Auciello.

Optimización de UNCD en los sustratos de Aluminio y Acero Inoxidable:

El objetivo del recubrimiento de N-UNCD de los electrodos es hacer más duraderas las baterías. Por esto es necesario que el envase también sea recubierto de UNCD para evitar corrosión por parte de los materiales activos en la batería. Por esto se procede a optimizar el recubrimiento de UNCD en envases de Aluminio, por su bajo costo, y acero inoxidable que es el estándar. Para ello se deposita una capa de HfO<sub>2</sub> utilizando el método de deposición de capas atómicas (ALD por sus siglas en inglés) y luego se recubre con UNCD. Estos serán expuestos a un baño conteniendo una solución de nanopartículas de diamante de 2-5 nm de diámetro en metanol en un sonicador, para que las ondas sonoras muevan las partículas violentamente para enterrarlas en la superficie de la lámina de NG. Estas nanopartículas de diamante proveerán las semillas sobre las cuales crecerán las láminas de UNCD cuando los sustratos sean expuestos en los sistemas de MPCVD y HFCVD. En el sistema de MPCVD, un plasma es creado por impacto de energía de microondas en una mezcla de gases de Ar (79 sccm) / CH<sub>4</sub> (2 sccm)/N<sub>2</sub> (20 sccm), [9, 13] lo que produce rompimiento de las moléculas de CH<sub>4</sub> en átomos de C y radicales CH<sub>x</sub> (x=1, 2, 3) que inducen el crecimiento de las láminas de N-UNCD sobre la lámina de NG sobre Cu, mientras que las moléculas de N<sub>2</sub> se rompen en átomos de N que se insertan en los bordes de grano de la lámina de N-UNCD satisfaciendo vínculos químicos abiertos de átomos de C y proveyendo electrones para conducción. En el sistema HFCVD, los átomos de C y N se producen cuando las moléculas se rompen al pegar sobre la superficie caliente (2200 °C) de los filamentos. El mismo proceso se utilizará para la optimización del recubrimiento de aluminio.

En esta etapa se utilizarían los equipos del laboratorio del Dr. Auciello para optimizar el proceso de recubrimiento de Al (como el metal que se piensan utilizar en la caja de LIBs) con lámina aislante de UNCD. La caracterización de las láminas de UNCD y N-UNCD se llevará a cabo con equipo de difracción de Rayos X, Espectroscopia de Raman, Microscopio de barrido electrónico y Fotones de Rayos X y microscopía de barrido electrónico. (todos estos equipos están disponible en UTD).

Productos de esta actividad:

1. Metodología para la fabricación de envases de Aluminio.
2. Metodología para la fabricación de envases de acero inoxidable.

Etapa II

Compra de Equipo e insumo:

El equipo para las mediciones eléctricas de las baterías y la cualificación de estas estará alojado en el Laboratorio Pierre Marie Curie (LPMC). Estos equipos se comprarán con la asesoría de la Dra. Vanessa Quintero y consisten en equipo de caracterización de capacitancia e impedancia, equipo de medición del circuito corto y equipo para la cualificación de las baterías.

Productos de la actividad:

1. Cotización y compra del equipo de mediciones de las baterías para el LPMC.

Fabricación de electrodos – UTD:

Polvo de partículas esféricas de grafito natural (natural graphite-NG) de aproximadamente 25 µm de diámetro se producirán usando escamas de NG transformadas en partículas haciendo molienda de las escamas con pelotas metálicas

microscópicas. Las partículas de NG serán recubiertas con aceite derivado de petróleo. Los ánodos de LIBs se fabricarán esparciendo estiércol líquido conteniendo las partículas de NG, de tal manera que el estiércol estará formado por 92 wt% de partículas de NG, 8 wt% PVDF (KF9130), dispersado en N-methyl-2-pyrrolidone, sobre una lámina metálica de cobre (Cu). El ánodo fabricado con el proceso descrito arriba se secará durante una noche en una cámara en vacío (~ 10<sup>-3</sup> Tor) at 75 C. El espesor de la capa de NG será de aproximadamente 75 μm, de acuerdo al procesado desarrollado por el grupo del Dr. Auciello. Un electrodo de metal de Li será usado como cátodo para completar la fabricación de Li/NG mitad de célula de LIB. Los ánodos fabricados serán recubiertos con láminas eléctricamente conductoras de N-UNCD para protección de corrosión por iones de Li. Los ánodos y cátodos serán integrados en la LIB separados por membranas microporosas de polypropylene (Celgard 2325), incluyendo un electrolito formado con 1.2M LiPF<sub>6</sub> disuelto en solventes de ethylene carbonate (EC) y ethyl methyl carbonate (EMC) con una proporción de 3:7 por peso.

Productos de esta etapa:

1. Prototipo de ánodo y catado
2. Metodología para la fabricación de ánodos y catados para LiBs.

#### Optimización de Procesos de Recubrimiento de UNCD – UTD:

Los ánodos de NG/Cu fabricados con el proceso descrito arriba serán expuestos a un baño conteniendo una solución de nanopartículas de diamante de 2-5 nm de diámetro en metanol en un sonicador, para que las ondas sonoras muevan las partículas violentamente para enterrarlas en la superficie de la lámina de NG. Estas nanopartículas de diamante proveerán las semillas sobre las cuales crecerán las láminas de N-UNCD cuando los NG/Cu ánodos sean expuestos en los sistemas de MPCVD y HFCVD. En el sistema de MPCVD, un plasma es creado por impacto de energía de microondas en una mezcla de gases de Ar (79 sccm) / CH<sub>4</sub> (2 sccm)/N<sub>2</sub> (20 sccm), [9, 13] lo que produce rompimiento de las moléculas de CH<sub>4</sub> en átomos de C y radicales CH<sub>x</sub> (x=1, 2, 3) que inducen el crecimiento de las láminas de N-UNCD sobre la lámina de NG sobre Cu, mientras que las moléculas de N<sub>2</sub> se rompen en átomos de N que se insertan en los bordes de grano de la lámina de N-UNCD satisfaciendo vínculos químicos abiertos de átomos de C y proveyendo electrones para conducción. En el sistema HFCVD, los átomos de C y N se producen cuando las moléculas se rompen al pegar sobre la superficie caliente (2200 C) de los filamentos. El mismo proceso se utilizará para la optimización del recubrimiento de aluminio.

En esta etapa se utilizarían los equipos del laboratorio del Dr. Auciello para optimizar el proceso de recubrimiento de Al (como el metal que se piensan utilizar en la caja de LIBs) con lámina aislante de UNCD. La caracterización de las láminas de UNCD y N-UNCD se llevará a cabo con equipo de difracción de Rayos X, Espectroscopia de Raman, Microscopio de barrido electrónico y Fotones de Rayos X y microscopía de barrido electrónico. (todos estos equipos están disponible en UTD).

Se planea que el estudiante de maestría científica asignado a este proyecto participe en una pasantía de 4 a 6 meses durante el periodo de optimización y manipulación y análisis de datos.

Productos de esta etapa:

1. Metodología para la fabricación de ánodos.
2. Metodología para la fabricación de cátodos.
3. Optimización del proceso de fabricación de UNCD dopado con Nitrógeno.
4. Optimización del proceso de recubrimiento de ánodos.
5. Optimización del proceso de recubrimiento de cátodos.
6. Manipulación y análisis de datos adquiridos con los sistemas de caracterización para la retroalimentación de las optimizaciones.
7. Reporte de la pasantía del estudiante panameño cruzando su maestría científica.

#### Ensamblaje de las Baterías LIBs - UTD :

Las LIBs se ensamblarán usando un proceso metódico manual de ensamblaje. Este proceso involucra varias etapas, y se requiere equipo especializado, actualmente en funcionamiento en UTD. Una vez optimizado el proceso, se llevará a cabo un diseño de experimento para determinar la combinación de materiales y procesos que producen las mejores LIBs. El laboratorio del Dr. Auciello en UTD también tiene los equipos para mediciones automáticas de capacidad de energía simultáneamente para hasta 8 LIBs de 1 inch de diámetro, lo cual permitirá hacer mediciones para optimizar el funcionamiento de las LIBs en corto tiempo. Cabe mencionar que este proceso lo llevará a cabo, en su mayoría, la estudiante de doctorado (Michelle Salgado) como parte de la tesis de su doctorado.

Productos de esta etapa:

1. Fabricación del primer prototipo de LiB.
2. Metodología para las mediciones preliminares de las LiBs.
3. Diseño de experimento para optimizar el funcionamiento de las LiBs.
4. Manipulación y análisis de datos adquiridos con los sistemas de caracterización para la retroalimentación de las optimizaciones.
5. Reporte de la pasantía del estudiante de maestría.

#### Mediciones Sistemáticas de las LIBs - UTD/ UTP:

Para determinar las características reales de un producto, este se debe someter a un proceso de cualificación. Este proceso requiere de mediciones sistemáticas y de suficientes ejemplares para determinar la variación estadística en los procesos de fabricación. También requiere mediciones en condiciones extremas de funcionamiento para determinar la seguridad y confiabilidad de las LIBs. Esta etapa se realizará en Panamá. Productos de estas etapas:

1. Baterías producidas en UTD con recubrimiento de UNCD
2. Caracterización de los parámetros de las LiBs producidas en UTD.
3. Cualificación de las baterías LiBs.
4. Resultados de la caracterización y cualificación

#### Divulgación de los resultados del Proyecto:

Los resultados de este proyecto se esperan divulgar como artículos científicos en revistas indexadas en Scopus a la vez que en conferencias internacionales de impacto como el Material Research Society en Boston, MA. También se divulgarán los resultados en congresos nacionales como APANAC y el ESTC de la UTP. Los estudiantes y personal de la UTP que se capacitaron en el laboratorio de la Universidad de Texas en Dallas, darán un seminario sobre las destrezas obtenidas durante la capacitación.

En esta etapa también se realizará la gestión para aplicar a patentes sobre cualquier propiedad intelectual que haya surgido de este proyecto.

Productos de esta etapa:

1. Presentación de los resultados en la APANAC y/ó ESTC
2. Presentación de los resultados en Fall MRS
3. Capacitación a la comunidad universitaria por el personal de la UTP que realizó pasantías en los Estados Unidos.
4. Borrador avanzado de un artículo para someter a una revista indexada
5. Seguimiento a la gestión de la propiedad intelectual de ser aplicable.

#### **Actividades a desarrollar por etapa**

Para efectos del desarrollo de los estudios propuestos, este proyecto se ha dividido en dos etapas, tal como se describe a continuación:

#### **Actividades de la Etapa I (6 meses):**

- 1- **Adquisición de insumos y equipo:** se formalizará una lista de insumos con sus respectivas cotizaciones y se llevará a cabo la adquisición de dichos insumos. Se espera tener los insumos antes de la culminación de la primera

- etapa.
- 2- **Reclutamiento del personal:** Se realizarán entrevistas a los candidatos y la posterior selección de los candidatos. Para este proyecto se requieren dos posiciones. Para primera posición se requiere un personal capacitado, con una maestría en física o ciencias afines y con experiencia en coordinar y analizar experimentos. El segundo candidato es preferiblemente un estudiante de las maestrías científicas cuyo interés resida en hacer una tesis sobre las LIBs.
  - 3- **Reunión de planificación y lanzamiento del proyecto:** Se realizará una reunión en los previos de la UTP para planificar en detalle las acciones del proyecto. La lista de acciones, con sus duraciones y sus responsables, en una plataforma común, será el resultado de la reunión.
  - 4- **Ciclo de conferencias en Panamá sobre Fundamentos de las Baterías de Lito:** Los participantes de esta convocatoria se reunirán en Panamá para presentar un ciclo de conferencias, abierto al público, sobre las ciencias de las baterías de Lito. El ciclo de conferencia se llevará a cabo en el marco de los ciclos de conferencias de la DI y se promocionará por medio de afiches y redes sociales. Se espera una participación de aproximadamente 20 personas entre profesionales y estudiantes.
  - 5- **Optimización del recubrimiento de UNCD en sustratos de Aluminio (Al) y Acero Inoxidable (SS):** Se realizarán varios crecimientos de UNCD en sustratos de Al y SS para optimizar la cobertura la calidad de las películas de UNCD. Se espera tener un proceso reproducible al finalizar la primera etapa.
  - 6- **Caracterización del UNCD en los sustratos de Al y SS:** Se realizarán mediciones de UNCD en el Raman, XRD, XPS y SEM. Esta data se presentará en el reporte técnico de la primera etapa.
  - 7- **Optimización del recubrimiento de N-UNCD (UNCD conductor) en sustratos de Silicio modificados:** Se realizarán varios crecimientos de N-UNCD en sustratos de Silicio modificados para optimizar la cobertura la calidad de las películas de N-UNCD. Se espera tener un proceso reproducible al finalizar la primera etapa.
  - 8- **Caracterización del N-UNCD en los sustratos de Silicio modificado:** Se realizarán mediciones del N-UNCD en el Raman, XRD, XPS y SEM. Esta data se presentará en el reporte técnico de la primera etapa.
  - 9- **Entrenamiento del estudiante de doctorado en la fabricación y caracterización de UNCD en la Universidad de Texas en Dallas (UTD):** El estudiante de doctorado ó miembro de la UTP realizará una pasantía de 3 meses en la primera etapa del proyecto donde se entrenará en el uso del cuarto limpio de nanotecnología, se entrenará en los equipos de deposición de UNCD, y en los equipos de caracterización de XRD, Raman y SEM. Se espera mostrar evidencia de las nuevas destrezas del estudiante.
  - 10- **Elaboración del informe técnico y financiero de la etapa I.**

#### **Actividades de la Etapa II (18 meses):**

- 1- **Adquisición de equipos de caracterización de las baterías para el laboratorio PMC de la UTP:** Se estudiarán las especificaciones, se cotizará el equipo y se procederá a la compra del mismo.
- 2- **Fabricación del ánodo base:** Se fabricará el ánodo utilizado NG de 25  $\mu\text{m}$  de diámetro obtenidas del grafito natural. Estas se recubrirán en estiercol líquido con PVDF en un sustrato de cobre y siguiendo los procedimientos de secado y curamiento de la muestra. Se espera obtener el procedimiento para la fabricación de este electrodo.
- 3- **Fabricación de la celda media con ánodo fabricado en casa y cátodo de Litio:** La fabricación de la celda media requiere que el ánodo sea montado en una celda moneda con un cátodo metálico, separadores y el electrolito. Esto se debe ejecutar en una cámara de gas inerte. El procedimiento para la confección la celda media será el resultado de esta etapa. Se realizarán mediciones eléctricas del ánodo como control. Este procedimiento se utilizará sobre ánodos recubiertos con N-UNCD.
- 4- **Optimización del recubrimiento de N-UNCD sobre el ánodo:** Se procederá a realizar múltiples crecimientos del N-UNCD en los ánodos fabricados en la actividad 2 de esta etapa para obtener un procedimiento optimizado. Las mediciones se llevarán a cabo primero con el análisis de Raman que determinará la calidad del UNCD, XRD para determinar la cristalización y SEM para determinar la morfología. Se procederá a optimizar el proceso con las variables

- de la mezcla de gases y la temperatura.
- 5- **Fabricación del cátodo base:** Se fabricará el cátodo utilizando  $\text{LiCoO}_2$  sobre aluminio siguiendo los procedimientos establecidos en la literatura. La materia prima para la fabricación del cátodo se obtendrá ya con la composición adecuada. Se espera obtener el procedimiento para la fabricación de este electrodo.
  - 6- **Fabricación de la celda media con cátodo fabricado en casa:** La fabricación de la celda media requiere que el cátodo sea montado en una celda moneda con un ánodo metálico, separadores y el electrolito. Esto se debe ejecutar en una cámara de gas inerte. El procedimiento para la confección la celda media será el resultado de esta etapa. Se realizarán mediciones eléctricas del cátodo como control. Este procedimiento se utilizará sobre cátodos recubiertos con N-UNCD.
  - 7- **Optimización del recubrimiento de N-UNCD sobre el cátodo:** Se procederá a realizar múltiples crecimientos del N-UNCD en los cátodos fabricados en la actividad 5 de esta etapa para obtener un procedimiento optimizado. Las mediciones se llevarán a cabo primero con el análisis de Raman que determinará la calidad del UNCD, XRD para determinar la cristalización y SEM para determinar la morfología. Se procederá a optimizar el proceso con las variables de la mezcla de gases y la temperatura.
  - 8- **Elaboración de informe intermedio al octavo (8) mes de la etapa II.**
  - 9- **Confeccionamiento de baterías (cátodo, ánodo y electrolito) con recubrimiento de UNCD.** Una vez obtenidos los resultados de las medias celdas de ambos el ánodo y el cátodo, se procederá a fabricar una batería completa con el ánodo y el cátodo recubiertos con N-UNCD siguiendo los procedimientos obtenidos en las actividades 4 y 6 de esta etapa. El procedimiento para la fabricación de estas baterías, incluye las proporciones de los componentes utilizados, así como la mecánica misma de la construcción de la batería recargable.
  - 10- **Caracterización de la batería con UNCD:** Para la caracterización de las baterías se utilizará un Analizador de Baterías (carga/descarga) para determinar la capacitancia, y la resistencia interna, que limita el poder específico será medido con un galvanómetro. Se determinará los parámetros y procedimiento necesario para la caracterización de las baterías con el equipo adquirido. Se tabulará y analizará los datos de esta caracterización.
  - 11- **Pasantía del estudiante de doctorado:** La labor del estudiante de doctorado que estará haciendo una pasantía extendida en la UTD ser's de optimizar los parámetros de recubrimiento del cátodo y ánodo con N-UNCD utilizando el HFCVD sistema de deposición y midiendo las características estructurales, eléctricas y morfológicas con Raman, XRD, SEM y 4 probe.
  - 12- **Pasantía del estudiante de maestría:** Este estudiante ayudará a determinar los parámetros para el ensamblaje de las baterías, que incluye la parte mecánica y química a la vez de la caracterización de las baterías medias y la batería completa que será el tema de su tesis.
  - 13- **Pasantía de la Dra. Vanessa Quintero:** Ella es especialista en el estado de "salud" de las baterías de litio, y determinará el tipo de caracterización adecuado para las baterías. Este ejercicio se hará en UTD, y los conocimientos se transferirán al equipo Nacional encargado de la caracterización de las baterías. Esta actividad está directamente ligada a las mediciones sistemáticas de las baterías.
  - 14- **Cualificación de las baterías:** Se preparan varias muestras con las mismas condiciones para hacer un análisis estadístico del proceso de fabricación basado en las mediciones anteriormente determinadas. Los datos serán tabulados y analizados. Este trabajo se realizará en el LPMC.
  - 15- **Presentaciones en 2 congresos:** uno nacional y uno internacional en modalidad de ponencia o poster según lo determine los organizadores del congreso.
  - 16- **Presentación en ciclo de conferencia de los estudiantes que realizaron pasantías.** Estos ciclos de conferencias tendrán como audiencia la comunidad universitaria para la transferencia de conocimientos científicos, y el público en general, como experiencia vivida y el potencial de futuros científicos en formación.
  - 17- **Elaborar el primer borrador de un artículo científico que se someterá a una revista indexada en Scopus.**
  - 18- **Elaboración de informe técnico y financiero de la etapa II e informe final.**

## 9. RESULTADOS ESPERADOS:

Como resultado de la ejecución de las actividades descritas en la sección anterior, se espera obtener los siguientes productos:

### **Resultados de la Etapa I:**

- 1- Insumos y equipo de laboratorio adquiridos. Se detallará la lista de insumos adquiridos para los laboratorios y sus costos.
- 2- Dos estudiantes reclutados. Se proveerá los CV y los planes de trabajo del personal reclutado.
- 3- Reunión de lanzamiento. Se proveerá el detalle del plan de trabajo elaborado en la reunión con descripciones de las tareas, duraciones y responsables.
- 4- Ciclo de conferencias sobre los “Fundamentos y aplicaciones de las baterías de Litio”. Se presentará la agenda del ciclo de conferencia, los afiches de divulgación del mismo, y fotos de la conferencia con los expositores y participantes.
- 5- Resultados del recubrimiento de UNCD en Aluminio y Acero Inoxidable
- 6- Se presentaran los resultados de la caracterización del UNCD en los sustratos de Al y SS por medio de un reporte técnico.
- 7- Se presentaran los resultados de la optimización de N-UNCD en Silicio modificado por medio de un reporte técnico que demuestre las variable utilizadas para la optimización.
- 8- Se presentarán los resultados de la caracterización de N-UNCD en Silicio modificado que incluye Raman and SEM en un reporte técnico.
- 9- Estudiante entrenado en el crecimiento de UNCD en el sistema de vacio de HFCVD y equipo de caracterización Raman, XRD and SEM: se presentará certificación de las destrezas adquiridas.
- 10- Informe técnico y financiero de la etapa I entregado a la **SENACYT**.

### **Resultados de la Etapa II:**

- 1- Insumo y equipo de caracterización de baterías para el LPMC adquiridos. Se presentará la cotización y los detalles del equipo adquirido y prueba de pertenencia para la caracterización de las baterías de litio.
- 2- Fabricación del ánodo base en el laboratorio del Dr. Auciello. Se presentará un reporte con los resultados de la fabricación del ánodo que incluye la caracterización estructural y morfológica.
- 3- Fabricación y caracterización de las celdas medias del ánodo. Se presentará el informe técnico de la caracterización de la media celda incluyendo los procedimientos determinados.
- 4- Optimización del recubrimiento de N-UNCD en el ánodo. Se presentará un informe técnico de las variables utilizadas para la optimización y los resultados de la caracterización morfológica y eléctrica del electrodo.
- 5- Fabricación del cátodo base en el laboratorio del Dr. Auciello. Se presentará un reporte con los resultados de la fabricación del ánodo que incluye la caracterización estructural y morfológica.
- 6- Fabricación y caracterización de las celdas medias del cátodo. Se presentará el informe técnico de la caracterización de la media celda incluyendo los procedimientos determinados
- 7- Optimización del recubrimiento de N-UNCD en el cátodo. Se presentará un informe técnico de las variable utilizadas para la optimización y los resultados de la caracterización morfológica y eléctrica del electrodo.
- 8- Entrega de informe intermedio al octavo mes de ejecución.
- 9- Documentación técnica de la construcción de baterías con ánodo y cátodo recubiertos con N-UNCD por medio de la caracterización eléctrica
- 10- Documento técnico detallando la caracterización de batería UNCD y los resultados
- 11- Documentación de la pasantía del estudiante de doctorado sobre la labor de optimizar los parámetros de recubrimiento del cátodo y ánodo con N-UNCD utilizando el HFCVD sistema de deposición y midiendo las características estructurales, eléctricas y morfológicas con Raman, XRD, SEM y 4 probe.
- 12- Documentación de la pasantía del estudiante de maestría sobre la labor realizada en el ensamblaje de las baterías y la caracterización de las baterías en UTD.
- 13- Documentación de la pasantía de la Dra. Vanessa Quintero que incluye el reporte técnico de los procedimientos para las mediciones de las baterías de litio.
- 14- Base de datos con los resultados de la cualificación y construcción de las baterías con las mismas condiciones para la cualificación de estas
- 15- Documentación de la presentación de los resultados en un congreso nacional y un congreso internacional, incluyendo el nombre del congreso, enlace del

- congreso y evidencia de la publicación del abstracto a presentar en la conferencia.
- 16- Foto documentación y memoria del ciclo de conferencias de los estudiantes que realizaron pasantía (Recomendación.2)
  - 17- Borrador avanzado de manuscrito remitido para publicación en una revista indexada
  - 18- Informe técnico y financiero de la etapa II e informe final, entregado a la **SENACYT**

## **10. ESTRATEGIA DE DIVULGACIÓN DEL PROYECTO:**

Los resultados obtenidos serán divulgados en congresos científicos a nivel nacional e internacional y se someterán las propuestas de artículos a revistas indexadas de circulación internacional para su aprobación. Algunos de los congresos internacionales donde esperamos participar son: American Chemical Society meeting (ACS), Materials Research Society Meeting (MRS), Battery and Fuel Cell Technology conference.

Al mismo tiempo se espera visitar empresas fabricantes de LIBs y empresas que usan LIBs para mostrar los resultados y discutir intereses que estas empresas puedan tener e incorporar la nueva tecnología de LIBs desarrolladas en el proyecto propuesto aquí.

Por otro lado, se aprovechará las estancias de los investigadores internacionales en Panamá para que juntos con los nacionales se realice un taller sobre los Fundamentos de las baterías de Litio.

Los estudiantes participantes de esta convocatoria realizarán un ciclo de conferencia al finalizar sus pasantías y cuyo evento se divulgue vía afiches y redes sociales para la transferencia de conocimientos.

De tener ideas o procesos patentables, se procederá a seguir la gestión de la propiedad intelectual en conjunto entre la UTP y UTD.

## **11. CONSIDERACIONES ESPECIALES (SI APLICA)**

- La Dra. Elida de Obaldía, en su calidad de investigadora de la UTP, divide su tiempo entre la UTP y UTD. Esto facilita la ejecución de proyecto conjuntos entre UTP y UTD. La Dra. De Obaldía forma parte de grupo del LPMC, colabora con el Dr. Ching y con el Dr. Auciello en UTD.
- La joven Michelle Salgado está actualmente cruzando sus estudios de doctorado de nanotecnología en UTD y su tesis estará basada en la investigación de los materiales a ser usados para la nueva generación de LIBs y en el ensamblado y caracterización del funcionamiento de LIBs. Ella es estudiante del Dr. Aucillo y estará dedicada a este proyecto.
- Por otro lado, los equipos que se adquieran en este proyecto estarán bajo mantenimiento a partir del segundo año, ya que la Universidad Tecnológica de Panamá en reunión del Consejo General Universitario, máximo organismo de gobierno de la institución aprobó el 26 de abril del presente año incluir un renglón en el presupuesto de la universidad para el mantenimiento de los equipos del Laboratorio Pierre y Marie Curie.



### 13. PRESUPUESTO COMPLETO

	Etapa I	Etapa II	Fondos de Contraparte	
	Fondos Solicitado a SENACyT	Fondos Solicitado a SENACyT	UTP	UTD
	(B/.)	(B/.)	(B/.)	(B/.)
<b>A. Recurso Humano</b>				
1. Dra. Elida de Obaldia (50%)			1,516.00	
2. Dr. Eleicer Ching (10%)			501.60	
3. Dra. Vanessa Quintero (50%)			1,300.00	
4. UTP estudiante doctorado o staff	1,200.00	1,200.00		
5. Asistente de laboratorio- UTP	225.00	225.00		
6. Dr. Jesús Alcántar-Peña (25%)				1,145.00
7. Michelle Salgado (80%)				1,200.00
8. Dr. Orlando Auciello (20%)				2,000.00
Costo Total del Personal (mensual)	1,425.00	1,425.00	3,317.60	4,345.00
<b>Costo Total del Personal (anual) *</b>	<b>11,400.00</b>	<b>22,800.00</b>	<b>79,622.40</b>	<b>104,280.00</b>
<b>B. Viajes de misiones tecnológicas</b>	<b>13,000.00</b>	<b>18,000.00</b>		
1. Grupo Internacional	6,000.00	6,000.00		4,000.00
2. Grupo Nacional *	7,000.00	12,000.00		
<b>C. Insumo científico</b>	<b>4,000.00</b>	<b>0.00</b>		<b>4,000.00</b>
1. Insumos de materiales para el laboratorio del Dr. Auciello	4,000.00			<b>4,000.00</b>
2. Costo de equipos	0.00	17,800.00		
a. Sistema de caracterización eléctrica de LIBs		4,000.00		
b. Sistema de cualificación de LIBs.		12,000.00		
c. Vacuum chamber for sample storage		1,800.00		
<b>D. Pago por servicios para uso de equipo y analysis de muestra</b>	<b>6,000.00</b>	<b>14,000.00</b>	<b>8,000.00</b>	<b>510,000.00</b>
1. Utilización de equipo de caracterización tales como XRD, XPS, Raman y las facilidades del	6,000.00	14,000.00		10,000.00
2. Equipo disponible en UTP y UTD para crecimiento y caracterización de baterías			8,000.00	500,000.00
<b>E. Otros Gastos</b>	<b>4,720.00</b>	<b>8,280.00</b>		
Costo de administración (5%)***	1,720.00	4,280.00		
Otros gastos no cotemplados	3,000.00	4,000.00		
<b>Gran Total</b>	<b>39,120.00</b>	<b>80,880.00</b>	<b>87,622.40</b>	<b>618,280.00</b>

## Sustentación de rubros:

### A. Recursos Humanos:

#### a. Senacyt

- Se pagará un salario anual por 2 años de B/.1,200.00 para un estudiante de doctorado o un personal de la UTP que esté interesado en eventualmente hacer un doctorado en el área de nanotecnología.
- Se pagará un salario anual por 2 años de B/.225.00 para un estudiante de la maestría científica para labore como asistente de laboratorio en el LPMC a tiempo parcial.

#### b. Contraparte

- Salarios UTP: 10% Dr. Ching, 50% Dra. De Obaldía y 50% Dra (C) Quintero fueron calculados usando la página de transparencia de la UTP.
- Salarios UTD: 20% Dr. Auciello, 25% Dr. Alcantar y 80% Mgter Salgado fueron calculados por información directa del departamento.

### B. Viajes colaboradores internacionales:

- **Viáticos parciales que incluye un porcentaje del pasaje aéreo** para los 3 colaboradores internacionales (Dr. Auciello, Dr. Alcantar y Mgter. Michelle Salgado) para venir a Panamá al ciclo de conferencias en la Etapa I, y para un viaje para la divulgación de los resultados en la Etapa II. Esto representa un monto de B/. 2,000.00 por persona por viaje que representa un 60% del costo real, el restante será cubierto por la contraparte.

- **Viajes colaboradores nacionales:**

Pasantía del estudiante de doctorado en la Etapa I y II: **Viáticos parciales que incluye un porcentaje del pasaje aéreo.** Para obtener la Visa J-1 de Investigador visitante se requiere presentar en la embajada constancia de una entrada mensual de no menos de B/. 2,000.00. La diferencia entre el salario y el viático requerido por 8 meses suma un monto de B/. 6,400 al que se le suman \$1200 por el pasaje aéreo.

Movilización de la Dra. Elida de Obaldía -Etapa I y II: **Viáticos parciales que incluye un porcentaje del pasaje aéreo.** La Dra. Elida, como organizadora de los eventos en Panamá y Dallas tiene dispuestos 6 viajes entre Panamá y Dallas durante la primera etapa y la segunda etapa. El monto de B/. 4000.00 es un monto parcial para los pasajes aéreos y viáticos.

Pasantía del Estudiante de Maestría Etapa II: **Viáticos parciales que incluye un porcentaje del pasaje aéreo.** El costo del estudiante de maestría para realizar una pasantía de 3 meses es de B/. 6,500 incluyendo parte del pasaje aéreo.

Pasantía de la Dra. Vanessa Quintero – Etapa II: **Viáticos parciales que incluye un porcentaje del pasaje aéreo.** El costo de la pasantía de la Dra. Quintero sería de B/. 900.00 que incluye parte del boleto aéreo.

### C. Insumo Científico

Este monto se utilizará para la compra de insumos de materiales consumibles en el laboratorio del Dr. Auciello como semillas para las películas de diamantes, substratos, materiales, gases etc.

Se equipará el LPMC con medidores electrónicos de baterías para la caracterización de las baterías de litio.

### D. Pago por servicios para uso de equipo y análisis de muestras

#### a. Senacyt

Utilización de equipo de caracterización tales como XRD, XPS, Raman y las facilidades del cuarto limpio de UTD. Se calcula un promedio de costo de B/. 30.00 por hora y un uso de alrededor de 7 horas semanales.

Contraparte/ Uso del equipo de laboratorio del Dr. Auciello en UTD y el LPMC en la UTP.

#### b. Contraparte

**El equipo de deposición del Dr. Auciello fue adquirido por un monto de alrededor de \$350,000. Este equipo estará siendo utilizado un 90% en este proyecto. Además del equipo de deposición contamos también con el equipo de ensamblaje y caracterización de las baterías que suma \$250,000 y será utilizado 100% para este proyecto. El Dr. Aucillo también cubrirá los costos de caracterización que no están cubiertos en la convocatoria.**

### E. Otros Gastos

Los gastos administrativos por FTP son de un 5% para proyectos de

investigación. Los gastos imprevistos suman a un monto de B/. 7,000. En un proyecto de esta magnitud, se esperan gastos imprevistos. Se ha dejado un monto de 5.8% para gastos imprevistos que incluyen gastos de promoción y divulgación, seguimiento a la gestión de la propiedad intelectual entre otros.

#### 14. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. *Elevating Self-discharge - Battery University*. [cited 2017 Nov 8]; Available from: [http://batteryuniversity.com/learn/article/elevating\\_self\\_discharge](http://batteryuniversity.com/learn/article/elevating_self_discharge).
2. Parker, A.J., *The effects of solvation on the properties of anions in dipolar aprotic solvents*. Quarterly Reviews, Chemical Society, 1962. **16**(2): p. 163-187.
3. Fernandez, A.C., *Propiedades físicas de grafeno en presencia de desorden topológico*, in *Departamento de Ciencias e Ingeniería de Materiales e Ingeniería Química*. 2007, Universidad Carlos III de Madrid: UC3M - Biblioteca Archivo. p. 113.
4. Xu, K., *Nonaqueous Liquid Electrolytes for Lithium-Based Rechargeable Batteries*. Chemical Reviews, 2004. **104**(10): p. 4303-4418.
5. Douglas A. Skoog, D.M.W., *Introducción a la Química Analítica*, ed. . 1986, Barcelona, Bogotá, Buenos Aires, Caracas, México: Editorial Reverté, S.A. 117.
6. Sosa, G.G. *Algunas Aplicaciones de las reacciones redox: Baterías*. 2010 [cited 2017 Nov 08]; Available from: [http://depa.fquim.unam.mx/amyd/archivero/07.Baterias\\_8803.pdf](http://depa.fquim.unam.mx/amyd/archivero/07.Baterias_8803.pdf).
7. Hayner, C.M., X. Zhao, and H.H. Kung, *Materials for Rechargeable Lithium-Ion Batteries*. Annual Review of Chemical and Biomolecular Engineering, 2012. **3**(1): p. 445-471.
8. Peled, E. and S. Menkin, *Review—SEI: Past, Present and Future*. Journal of The Electrochemical Society, 2017. **164**(7): p. A1703-A1719.
9. Auciello, O. and A.V. Sumant, *Status review of the science and technology of ultrananocrystalline diamond (UNCD™) films and application to multifunctional devices*. Diamond and Related Materials, 2010. **19**(7-9): p. 699-718.
10. Polyakov, V.I., et al., *Photoconductive and photovoltaic properties of CVD diamond films*. Diamond and Related Materials, 2005. **14**(3): p. 594-597.
11. Statista. *Lithium consumption worldwide by battery and non-battery use 2016*. Available from: <https://www.statista.com/statistics/452006/global-consumption-of-lithium-by-battery-and-nonbattery-use/>.
12. B., J.A.M., *Política Nacional de Ciencias, Tecnología e Innovación de Panamá y Plan Nacional 2015-2019*, T.e.I.S. Secretaria Nacional de Ciencias, Editor. 2015, Editora Nova: Quad Graphics, Colombia.
13. Alcantar-Peña, J.J., et al., *Low temperature hot filament chemical vapor deposition of Ultrananocrystalline Diamond films with tunable sheet resistance for electronic power devices*. Diamond and Related Materials, 2016. **69**: p. 207-213.
14. Alcantar-Peña, J.J., et al., *Fundamentals towards large area synthesis of multifunctional Ultrananocrystalline diamond films via large area hot filament chemical vapor deposition bias enhanced nucleation/bias enhanced growth for fabrication of broad range of multifunctional devices*. Diamond and Related Materials, 2017. **78**(Supplement C): p. 1-11.

#### CLÁUSULA SEGUNDA: DESEMBOLSOS

La SENACYT se obliga a desembolsar a EL BENEFICIARIO, como monto único para la realización del proyecto contemplado en este contrato, la suma de hasta CIENTO VEINTE MIL BALBOAS CON 00/100 (B/. 120,000.00).

Este desembolso se hará efectivo a favor de EL BENEFICIARIO hasta la concurrencia del monto único y de la siguiente manera:

- **PRIMER DESEMBOLSO:** Hasta la suma de TREINTA Y NUEVE MIL CIENTO VEINTE BALBOAS CON 00/100 (B/. 39,120.00), luego del refrendo del presente Contrato y entrega de la Orden de Proceder.
- **SEGUNDO DESEMBOLSO:** Hasta la suma de OCHENTA MIL OCHOCIENTOS OCHENTA BALBOAS CON 00/100 (B/. 80,800.00), al recibido conforme del informe técnico y financiero de la Primera Etapa del Proyecto, empleando el formato provisto por la **SENACYT**.

El primer desembolso será imputable a la Partida **Presupuestaria No.** de la vigencia fiscal del año 2018.

El segundo desembolso será imputable a la Partida **Presupuestaria No.** de la vigencia fiscal del año 2019.

**FUNDAMENTO DE DERECHO:** Resolución Administrativa No. 191 de 31 de julio de 2017 de la **SENACYT**.