

ESPECIAL
I+D+i



Frances H. Arnold

Premio Nobel de Química 2018

ENTREVISTA Dra. M^a Elena Arroyo de Dompablo Investigadora principal del Grupo de Diseño Computacional de Materiales Inorgánicos de la Universidad Complutense de Madrid

“Necesitamos sistemas de almacenamiento de energía más baratos, seguros, sostenibles y eficientes”

Si bien es verdad que la energía no se crea ni se destruye, también lo es que en algún lugar se tiene que almacenar para poderse utilizar. Buscar nuevos materiales para crear baterías es el objetivo de la doctora Elena Arroyo de Dompablo y su grupo de Química Computacional de la Universidad Complutense de Madrid (UCM), que centran sus estudios en el calcio como elemento base.

Has estado en casi todos los escalones de la Complutense...

Gran parte de mi trabajo de investigación lo he desarrollado en la UCM donde, desde 2010, soy profesora titular, pero anteriormente estuve adscrita como becaria, ayudante, profesora contratada... Y también como investigadora Ramón y Cajal.

Pero también has viajado mucho...

Creo que para avanzar hay que moverse, ampliar conocimientos, actualizarse, intercambiar ideas, colaborar... Siempre que he podido he realizado estancias en prestigiosos laboratorios de Alemania, Francia o Estados Unidos. En mi carrera ha sido fundamental un periodo de tres años, del 2000 al 2002, en el Instituto Tecnológico de Massachusetts, el MIT, que es donde aprendí la especialidad en la que trabajo ahora, ya que es uno de los centros punteros a nivel mundial.

¿El diseño computacional de materiales inorgánicos?

Sí, en este caso dirigidos al almacenamiento de la energía.

Ya... ¿lo podrías explicar para los profanos en la materia?

El desafío energético de la sociedad actual involucra diversos aspectos interrelacionados, incluyendo la independencia energética, la sostenibilidad medioambiental y la economía. En este marco, es necesario disponer de soluciones de almacenamiento energético eficientes, fiables y económicas. Los sistemas electroquímicos de almacenamiento de energía, como las baterías de ion-litio, se consi-

deran una de las tecnologías clave.

¿Estamos hablando de las baterías de los coches eléctricos?

En parte sí, pero es mucho más que eso. Algunas fuentes de energías renovables son intermitentes, como la solar o la eólica, lo que quiere decir que hay que almacenar la energía en baterías estacionarias y distribuirla a través de la red eléctrica para poder consumirla a demanda. Las baterías de ion-litio son una posible solución. Independientemente de su aplicación (vehículos eléctricos, energías renovables o electrónica portátil) estas baterías presentan algunas limitaciones tecnológicas, económicas y medioambientales. Entre ellas, la disponibilidad de las materias primas. Las baterías de ion-litio de mayor densidad energética utilizan electrodos positivos que contienen cobalto y níquel que, como el litio, son poco abundantes y caros. Así, son necesarios sistemas de almacenamiento de energía alternativos, que sean más baratos (basados en elementos abundantes), seguros, sostenibles y con mejores prestaciones. Por eso estamos investigando baterías que en lugar de en litio estén basadas en sodio, aluminio, magnesio... En este contexto aparece el proyecto Calcium Rechargeable Battery Technology (CARBAT), financiado por el programa H2020-FETOPEN de la Unión Europea, que tiene como reto tecnológico el desarrollo de nuevas baterías avanzadas basadas en calcio y que proporcionen una mayor densidad energética que las baterías de ion-litio actualmente comercializadas. La densidad energética es un parámetro esen-

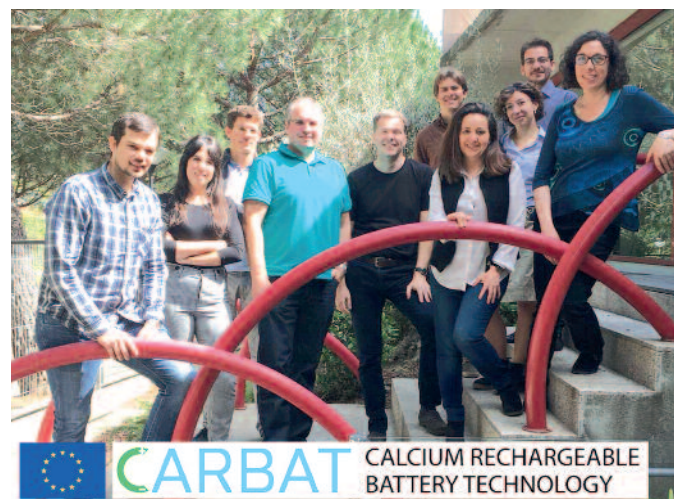
cial para los vehículos eléctricos, más energía significa mayor autonomía. Junto con la UCM, en CARBAT participan el Consejo Superior de Investigaciones Científicas (ICMAB-Barcelona), la Universidad Tecnológica de Chalmers (Suecia) y el Instituto Fraunhofer (Alemania), sumando 25 investigadores entre químicos, físicos e ingenieros.

Así, ¿el calcio es el futuro?

El litio es muy escaso en la corteza terrestre, mientras que el calcio es el quinto elemento más abundante, por lo que usar calcio supondría un abaratamiento en los costes de la batería. Otra ventaja es que el calcio, al contrario que el litio o el sodio, podría utilizarse en su forma metálica como electrodo negativo, lo que permitiría aumentar la energía suministrada por la batería. Para desarrollar baterías basadas en calcio es fundamental encontrar y optimizar un material que funcione como electrodo positivo. Hasta el momento hemos obtenido resultados prometedores con algunos compuestos inorgánicos, que se recogen en dos patentes mundiales en colaboración con la empresa Toyota Motor Europe. Pero falta todavía mucha investigación y recursos. La Unión Europea es consciente de que es un tema muy importante de cara a la sostenibilidad del planeta y está invirtiendo en tecnologías emergentes. También tenemos la suerte de que el diseño computacional agiliza mucho el trabajo.

¿A qué te refieres?

Hoy en día existen múltiples técnicas computacionales que permiten simular distintos sistemas (moleculares,



Algunos miembros del proyecto CARBAT. De izquierda a derecha: R. Araujo, L. Cabana, A. Ponrouch, A. Würsig, P. Johansson, A. Black, M.E. Arroyo de Dompablo, R. Verelli, A. Torres y M. R. Palacín.

Los sistemas electroquímicos de almacenamiento de energía, como las baterías de ion-litio, se consideran una de las tecnologías clave

fluidos, sólidos, o incluso dispositivos) a escala macro- o microscópica. Muchas propiedades de los materiales pueden predecirse y entenderse a partir de los resultados de los cálculos basados en principios cuánticos. En nuestro caso, mediante este tipo de cálculos evaluamos las propiedades electroquímicas relevantes (capacidad, voltaje, potencia, ciclabilidad...) antes de sintetizar y probar los materiales. Computacionalmente podemos tardar un par de semanas en disponer de una estimación de los parámetros para un material, mientras que experimentalmente hablamos de un mínimo de seis meses.

Baterías más limpias, más económicas... ¡harían un mundo mejor!

Sí, yo creo que ese debería ser el objetivo. Pero ya no solo de nuestra investigación, sino de todo lo que hacemos en

nuestra vida. Entre las funciones de la Universidad se encuentran la difusión, la valorización y la transferencia del conocimiento al servicio de la sociedad. Creo que la Universidad debería tener un papel más activo y cercano a la sociedad actual. Por ejemplo, iniciativas desarrolladas en la Universidad pueden trasladarse a otros ámbitos sociales, como un convenio que hemos firmado con el Club Baloncesto Alcorcón con el objetivo de desarrollar un programa de mentoría similar al existente en algunas universidades, pero para clubes deportivos locales. Otro ejemplo, la organización del primer Ágora Internacional en educación, investigación y empleo, con el que pretendemos integrar estos tres niveles propiciando la creación de redes de colaboración que permitan realizar cambios significativos en la vida de las personas gracias a la ciencia.