

## **Modellazione, simulazione ed ottimizzazione di elettrodi per batterie litio-aria**

Le batterie litio-aria rappresentano una delle più recenti tecnologie per l'accumulo di energia elettrica. Vista l'elevata energia per unità di massa ed il basso costo, le batterie litio-aria si propongono come una delle più competitive tecnologie per applicazioni mobili e stazionarie nell'immediato futuro. Tuttavia, rimangono ancora delle problematiche da risolvere, specialmente nell'elettrodo positivo in cui lo ione litio si combina con ossigeno gassoso ed elettroni per formare perossido di litio.

Questa tesi si propone di assistere lo sviluppo dell'elettrodo positivo attraverso simulazioni di trasporto e reazione seguendo un approccio tipico dell'ingegneria chimica. In particolare, si dovranno identificare le frazioni volumetriche ottimali della fase carboniosa (che trasporta elettroni), liquida (che trasporta gli ioni litio ed un mediatore redox) e porosa (che trasporta ossigeno), il diametro ottimale dei pori (per evitare ostruzioni dovute alla precipitazione di perossido di litio) nonché eventuali design strutturati (3D printing), al fine di ridurre le resistenze di trasporto e massimizzare la densità di potenza elettrica generata. Le simulazioni saranno svolte attraverso l'utilizzo del software Comsol Multiphysics e, in minor misura, Matlab. Non sono necessarie conoscenze elettrochimiche pregresse, bensì è richiesta conoscenza dei fenomeni di trasporto di materia e capacità di sviluppo di modelli matematici, con conoscenze base di programmazione e lingua inglese.

Il lavoro di tesi offre la possibilità di ampliare le conoscenze del tesista nell'ambito dei fenomeni di reazione e trasporto, della modellazione ingegneristica avanzata, dei sistemi elettrochimici per l'accumulo di energia e dei mezzi porosi, fornendogli strumenti utili per sbocchi lavorativi nel campo della progettazione, ricerca e sviluppo e nell'ambito accademico.

La tesi è svolta in collaborazione con le università di Oxford ed Imperial College London per quanto concerne gli aspetti sperimentali della ricerca.

Per informazioni aggiuntive rivolgersi a:

Dr. Antonio Bertei, [antonio.bertei@for.unipi.it](mailto:antonio.bertei@for.unipi.it) Prof. Cristiano Nicolella, [cristiano.nicolella@unipi.it](mailto:cristiano.nicolella@unipi.it)