



UNIVERSITAT  
POLITÈCNICA  
DE VALÈNCIA

  
ETSI Aeroespacial y Diseño Industrial

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE VALÈNCIA

Escuela Técnica Superior de Ingeniería Aeroespacial  
y Diseño Industrial

Análisis de las partículas generadas por el fenómeno de  
fuga térmica en baterías de ion-litio en diferentes estados  
de carga

Trabajo Fin de Grado

Grado en Ingeniería Mecánica

AUTOR/A: Barreiro Rius, Eva

Tutor/a: Monsalve Serrano, Javier

Cotutor/a: García Martínez, Antonio

CURSO ACADÉMICO: 2023/2024



## Resumen:

Los vehículos eléctricos se están desarrollando como una alternativa sostenible a los vehículos convencionales, equipados con motores de combustión interna. La preocupación por las emisiones contaminantes de estos motores, la necesidad de cumplir con la normativa europea, que es cada vez más restrictiva, y el aumento progresivo del precio de los combustibles han motivado durante estos últimos años el crecimiento de las ventas de vehículos eléctricos e híbridos. Los vehículos eléctricos requieren de energía eléctrica para su funcionamiento y esta debe ser almacenada y transportada en el propio vehículo. Las baterías de ion-litio son la mejor alternativa que existe actualmente para este propósito, pero han traído consigo nuevos desafíos relacionados con la seguridad. Cuando las baterías se someten a situaciones de abuso, ya sea eléctrico, mecánico o térmico, puede producirse el fenómeno conocido como fuga térmica, una reacción exotérmica descontrolada que libera una gran cantidad de energía. En este trabajo se analizarán las partículas que se generan en la combustión de las baterías durante el proceso de fuga térmica y se realizará una comparación de resultados entre baterías en diferentes estados de carga. Las baterías serán sometidas a una situación de abuso térmico hasta provocar dicho fenómeno. La reacción se producirá en un recipiente hermético del cual se extraerán las partículas que se analizarán posteriormente en el laboratorio.

Palabras clave: batería ion-litio; fuga térmica; partículas; vehículo eléctrico; seguridad

## Resum:

Els vehicles elèctrics s'estan desenvolupant com a una alternativa sostenible als vehicles convencionals, equipats amb motors de combustió interna. La preocupació per les emissions contaminants d'aquests motors, la necessitat de complir amb la normativa europea, que és cada vegada més restrictiva, i l'augment progressiu del preu dels combustibles han motivat durant els últims anys el creixement de les vendes de vehicles elèctrics i híbrids. Els vehicles elèctrics requereixen energia elèctrica per al seu funcionament i aquesta ha d'emmagatzemar-se i transportar-se al mateix vehicle. Les bateries d'ions de liti són la millor alternativa que existeix actualment per a aquest fi, però han portat nous desafiaments relacionats amb la seguretat. Quan les bateries se sotmeten a situacions d'abús, sia elèctric, mecànic o tèrmic, pot produir-se el fenomen conegut com a fuga tèrmica, una reacció exotèrmica descontrolada que allibera una gran quantitat

d'energia. A aquest treball s'analitzaran les partícules que es generen en la combustió de les bateries durant el procés de fuga tèrmica i es portarà a terme una comparació de resultats entre bateries en diversos estats de càrrega. Les bateries seran sotmeses a una situació d'abús tèrmic fins a provocar el dit fenomen. La reacció es produirà a un recipient hermètic del qual s'extrauran les partícules que s'analitzaran posteriorment al laboratori.

Paraules clau: bateria d'ions de liti; fuga tèrmica; partícules; vehicle elèctric; seguretat

Abstract:

Electric vehicles are being developed as a sustainable alternative to conventional vehicles equipped with internal combustion engines. Concerns about the polluting emissions of these engines, the need to comply with increasingly restrictive European regulations, and the progressive increase in fuel prices have motivated an increase in sales of electric and hybrid vehicles in recent years. Electric vehicles require electric energy for their operation, which must be stored and transported in the vehicle itself. Lithium batteries are currently the best available alternative for this purpose, but they have brought new challenges related to safety. When batteries are subjected to situations of abuse, whether electrical, mechanical or thermal, the phenomenon known as thermal runaway can occur. Thermal runaway is explained as an uncontrolled exothermic reaction that releases a large amount of energy. This work aims to analyse the particles generated in the combustion of batteries during this thermal runaway. The batteries are subjected to a thermal abuse situation until thermal runaway is provoked. The reaction occurs in a canister from which particles are extracted and subsequently analysed in the laboratory. A comparison of results is made between batteries at different states of charge.

Key words: lithium-ion battery; thermal runaway; particles; electric vehicle; safety

## Índice

DOCUMENTO 1: MEMORIA .....	11
CAPÍTULO 1: INTRODUCCIÓN .....	12
1. Objeto .....	12
2. Motivación y justificación .....	12
3. Antecedentes.....	14
4. Estructura.....	15
CAPÍTULO 2: CONCEPTOS PREVIOS .....	16
1. Baterías de ion-litio .....	16
1.1. Tipos de baterías .....	18
1.1.1. Baterías LCO (LiCoO <sub>2</sub> ).....	18
1.1.2. Baterías LNO (LiNiO <sub>2</sub> ) .....	18
1.1.3. Baterías NCA (LiNi <sub>0.8</sub> Co <sub>0.15</sub> Al <sub>0.05</sub> O <sub>2</sub> ).....	19
1.1.4. Baterías LMO (LiMn <sub>2</sub> O <sub>4</sub> ) .....	19
1.1.5. Baterías NMC (Li(Ni <sub>x</sub> Mn <sub>y</sub> Co <sub>1-x-y</sub> )O <sub>2</sub> ).....	19
1.1.6. Baterías LFP (LiFePO <sub>4</sub> ).....	20
1.2. Estado de carga.....	20
1.3. Protocolo de carga CCCV .....	21
2. Fuga térmica .....	22
3. Partículas .....	24
CAPÍTULO 3: METODOLOGÍA.....	26
1. Descripción.....	26
2. Celda utilizada .....	27
3. Acondicionamiento eléctrico .....	27
4. Proceso de fuga térmica.....	30
5. Recogida de las partículas .....	32
6. Análisis de las partículas .....	34
6.1. Análisis mediante microscopio electrónico.....	34
6.1.1. Análisis morfológico .....	36
6.1.2. Análisis elemental .....	36
6.2. Análisis térmico.....	36
6.2.1. Calorimetría Diferencial de Barrido .....	37
6.2.2. Análisis termogravimétrico .....	38

CAPÍTULO 4: RESULTADOS .....	39
1. Acondicionamiento eléctrico .....	39
2. Fuga térmica .....	39
3. Análisis de las partículas .....	41
3.1. Tamaño .....	41
3.2. Morfología .....	43
3.3. Composición .....	45
3.4. Análisis térmico .....	47
CAPÍTULO 5: CONCLUSIONES .....	52
Referencias .....	54
ANEXO 1: CÓDIGOS DE MATLAB .....	63
DOCUMENTO 2: PLIEGO DE CONDICIONES .....	71
1. Introducción .....	72
2. Condiciones de realización del trabajo experimental .....	72
2.1. Condiciones de la sala de ensayos .....	72
2.1.1. Almacenamiento y preparación de las celdas .....	72
2.1.2. Realización de los ensayos .....	73
2.1.3. Recogida de muestras y gestión de residuos .....	74
2.2. Condiciones del laboratorio de microscopía electrónica .....	74
3. Condiciones del puesto de trabajo en oficina .....	75
3.1. Equipo .....	76
3.1.1. Ordenador portátil .....	76
3.1.2. Teclado .....	76
3.1.3. Mesa de trabajo .....	76
3.1.4. Asiento de trabajo .....	76
3.2. Entorno .....	77
3.2.1. Dimensiones .....	77
3.2.2. Iluminación .....	77
3.2.3. Reflejos y deslumbramientos .....	77
3.2.4. Instalación eléctrica .....	77
3.2.5. Primeros auxilios .....	78
3.3. Condiciones ambientales .....	78
3.3.1. Temperatura .....	78

3.3.2.	Humedad.....	78
3.3.3.	Corrientes de aire.....	78
3.3.4.	Ruido .....	78
3.4.	Interconexión ordenador/persona .....	79
DOCUMENTO 3: PRESUPUESTO .....		80
1.	Introducción.....	81
2.	Precios elementales.....	81
2.1.	Materiales fungibles .....	81
2.2.	Mano de obra .....	82
2.3.	Laboratorio de microscopía electrónica .....	82
2.4.	Amortización de los equipos y programas informáticos .....	83
3.	Cuadro de precios descompuestos .....	85
3.1.	Proceso experimental en el laboratorio .....	85
3.2.	Análisis de muestras en el Servicio de Microscopía Electrónica .....	86
3.3.	Procesado y análisis de los resultados obtenidos.....	87
4.	Presupuesto total.....	89

## Índice de ilustraciones

Ilustración 1. Estructura de una batería cilíndrica .....	16
Ilustración 2. Movimiento de cargas durante la descarga de la batería .....	17
Ilustración 3. Protocolo de carga CCCV .....	21
Ilustración 4. Condiciones de abuso .....	23
Ilustración 5. Metodología del proyecto.....	26
Ilustración 6. Batería LG INR18650-MH1 .....	27
Ilustración 7. Fuente bidireccional Arbin LBT21084HC .....	28
Ilustración 8. Montaje para el acondicionamiento eléctrico.....	28
Ilustración 9. Montaje experimental.....	30
Ilustración 10. Celda preparada en el interior del canister .....	31
Ilustración 11. Canister y ARC.....	32
Ilustración 12. Celda recogida tras el ensayo .....	33
Ilustración 13. Partículas separadas por secciones .....	34
Ilustración 14. Microscopio electrónico de barrido de emisión de campo Zeiss .....	35
Ilustración 15. Muestras para FESEM en portamuestras de carbono.....	35
Ilustración 16. Netzsch DSC 214 Polyma .....	37
Ilustración 17. Netzsch TG 209 F1 Libra .....	38
Ilustración 18. Resultados de temperatura y presión para el ensayo de fuga térmica ....	40
Ilustración 19. Distribución de las partículas en las diferentes secciones .....	43
Ilustración 20. Imágenes de la superficie de las partículas.....	44
Ilustración 21. Mapas de colores de la composición química para cada sección .....	45
Ilustración 22. Composición elemental superficial .....	46
Ilustración 23. Resultados de la calorimetría diferencial de barrido .....	47
Ilustración 24. Resultados del análisis termogravimétrico .....	49

## Índice de tablas

Tabla 1. Características de la celda utilizada .....	27
Tabla 2. Tamaños de las secciones .....	33
Tabla 3. Capacidad nominal de las celdas .....	39
Tabla 4. Temperaturas máximas medidas por los diferentes termopares .....	40
Tabla 5. Masa inicial, masa final y masa de las partículas recogidas .....	41
Tabla 6. Distribución de la masa de las partículas en las diferentes secciones .....	42
Tabla 7. Resumen de los resultados obtenidos en el análisis termogravimétrico.....	51
Tabla 8. Cuadro de precios elementales materiales fungibles .....	82
Tabla 9. Cuadro de precios elementales mano de obra.....	82
Tabla 10. Cuadro de precios elementales FESEM .....	83
Tabla 11. Periodos máximos de amortización .....	83
Tabla 12. Amortización de equipos y programas informáticos .....	84
Tabla 13. Cuadro de precios elementales amortización de equipos .....	85
Tabla 14. Cuadro de precios descompuestos proceso experimental en el laboratorio ...	86
Tabla 15. Cuadro de precios descompuestos Servicio de Microscopía Electrónica.....	87
Tabla 16. Cuadro de precios descompuestos procesado y análisis de los resultados .....	87
Tabla 17. Cuadro de precios descompuestos redacción del proyecto.....	88
Tabla 18. Presupuesto total.....	89

## Índice de ecuaciones

Ecuación 1. Semirreacción de oxidación para un ánodo de grafito.....	17
Ecuación 2. Semirreacción de reducción para un cátodo de óxido de cobalto y litio ...	17
Ecuación 3. Estado de carga .....	20
Ecuación 4. Cálculo del estado de carga para una corriente constante .....	20
Ecuación 5. Tasa C .....	22
Ecuación 6. Cálculo de la corriente de carga para una determinada tasa C .....	22
Ecuación 7. Cálculo de la corriente de descarga para una determinada tasa C.....	22
Ecuación 8. Intensidad de descarga necesaria para una tasa 1C .....	29
Ecuación 9. Expresión del método de Coulomb para una corriente constante.....	29
Ecuación 10. Expresión del método de Coulomb para un 75 % de SOC.....	29
Ecuación 11. Expresión del método de Coulomb para un 50 % de SOC.....	30
Ecuación 12. Tiempo de descarga para un 75 % de SOC.....	30
Ecuación 13. Tiempo de descarga para un 50 % de SOC.....	30
Ecuación 14. Cálculo de las cuotas de amortización.....	84

## Índice de siglas

ARC: calorímetro de aceleración de ratio del ing. *Accelerating Rate Calorimeter*

CCCV: corriente constante voltaje constante del ing. *Constant Current Constant Voltage*

DSC: calorimetría diferencial de barrido del ing. *Differential Scanning Calorimetry*

DTG: derivada de la curva termogravimétrica del ing. *Derivative Thermogravimetric*

EDS: detector de energía dispersiva de Rayos X del ing. *Energy Dispersive X-Ray Spectroscopy*

FESEM: microscopio electrónico de barrido de emisión de campo del ing. *Field-Emission Scanning Electron Microscopy*

LCO: óxido de cobalto y litio del ing. *Lithium Cobalt Oxide*

LFP: litio ferrofosfato del ing. *Lithium Ferrum Phosphate*

LMO: óxido de manganeso y litio del ing. *Lithium Manganese Oxide*

LNO: óxido de níquel y litio del ing. *Lithium Nickel Oxide*

NCA: óxido de níquel, litio, cobalto y aluminio del ing. *Lithium Nickel Cobalt Aluminium Oxide*

NMC: óxido de níquel, manganeso y cobalto del ing. *Lithium Nickel Manganese Cobalt Oxide*

ODS: Objetivos de Desarrollo Sostenible

PM: material particulado del ing. *Particulate Matter*

PNIEC: Plan Nacional Integrado de Energía y Clima

SOC: estado de carga del ing. *State of Charge*

TGA: análisis termogravimétrico del ing. *Thermogravimetric Analysis*

UFP: partícula ultrafina del ing. *Ultrafine Particle*

UPV: Universitat Politècnica de València

## **Tabla de símbolos**

$A$ : cuota de amortización

$\text{CO}_2$ : dióxido de carbono

$d$ : duración del proyecto

$E^0$ : potencial de reducción

$I$ : intensidad

$I_c$ : intensidad de carga

$I_d$ : intensidad de descarga

$\text{Li}^+$ : ion de litio

$P_{\text{máx}}$ : periodo máximo de amortización

$Q$ : capacidad de la batería

$Q_n$ : capacidad nominal

$t_c$ : tiempo de carga

$t_d$ : tiempo de descarga

$V_c$ : coste de adquisición

## **DOCUMENTO 1: MEMORIA**

## CAPÍTULO 1: INTRODUCCIÓN

### 1. Objeto

El presente trabajo tiene como objetivo el estudio de las partículas que se generan durante el proceso de fuga térmica en baterías de ion-litio. Durante la fuga térmica, entendida como un proceso descontrolado de liberación de calor y rápido aumento de temperatura [1], se emiten gases y partículas cuyo análisis es necesario para poder entender en profundidad este fenómeno.

En concreto, se realizarán ensayos con baterías en tres estados de carga para evaluar el efecto de este parámetro en las partículas generadas. Utilizando un calorímetro de aceleración de ratio (ARC), se someterán las baterías a un abuso térmico hasta provocar la fuga térmica. Se estudiará la morfología de las partículas y su composición utilizando un microscopio electrónico de barrido de emisión de campo y sus características térmicas mediante un análisis termogravimétrico (TGA) y un análisis de calorimetría diferencial de barrido (DSC).

Cabe mencionar que a lo largo de este trabajo se ha optado por utilizar el término “batería” como sinónimo de celda. Se ha tomado esta decisión, ya que, desde el punto de vista lingüístico, el término “batería” alude tanto a una única “celda recargable” como a un conjunto de estas interconectadas entre sí [2]. Para referirse a un “conjunto de celdas” como podría ser el sistema de almacenamiento de energía de un vehículo eléctrico, se utilizará el término “paquete de baterías”.

Con este proyecto se pretende colaborar en la investigación de la seguridad en baterías, dado su creciente interés como forma de almacenamiento de energía, aportando datos que permitan caracterizar la fuga térmica y servir de guía para el postratamiento de las partículas.

### 2. Motivación y justificación

En 2015 se aprobó en Europa la Agenda 2030 para el Desarrollo Sostenible, un plan de acción en favor de las personas, el planeta y la prosperidad [3]. Como parte de este plan, se aprobaron los Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS), diecisiete puntos interrelacionados entre sí que incorporan los desafíos globales a los que nos enfrentamos día a día y que contemplan aspectos como la transición hacia ciudades más sostenibles,

la acción por el clima y un modelo energético asequible y no contaminante [4]. Más adelante, en 2019 la Unión Europea presentó el Pacto Verde Europeo, un plan de crecimiento a largo plazo para lograr que Europa sea climáticamente neutra de aquí a 2050. Convertirse en climáticamente neutra significa reducir todo lo posible las emisiones de gases de efecto invernadero y compensar las emisiones restantes mediante la captura del dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) emitido [5]. En línea con este plan de crecimiento, se han aprobado medidas nacionales tales como el Plan Nacional Integrado de Energía y Clima 2021-2030 (PNIEC), que persigue una reducción de un 23 % de las emisiones de gases de efecto invernadero respecto a 1990 [6].

El sector del transporte representó cerca de una cuarta parte de las emisiones totales de CO<sub>2</sub> en la Unión Europea durante 2019 y el 71.1 % de estas provenían del transporte por carretera. Los coches son el principal contaminante, dado que son responsables del 60.6 % del total de las emisiones del transporte, esto supone casi una quinta parte de las emisiones totales de la UE [7]. Además, este sector es el único en el que las emisiones de CO<sub>2</sub> han aumentado en las últimas tres décadas, un incremento del 33.5 % entre 1990 y 2019. Para alcanzar el objetivo de neutralidad climática del Pacto Verde Europeo sería necesario reducir estas emisiones en un 90 % respecto a los niveles de 1990 [8].

La Comisión Europea emitió en 2020 una comunicación acerca de la estrategia de movilidad sostenible e inteligente en la que señalaba los vehículos eléctricos y de bajas emisiones como parte de la solución [9]. Desde 2019 se ha triplicado el número de registros de vehículos eléctricos aumentando de un 3.5 % a un 11.6 % y en 2020 se han reducido las emisiones medias de CO<sub>2</sub> de los nuevos vehículos en un 12 % respecto al año anterior [10]. A pesar de que, considerando las emisiones de los vehículos eléctricos en la totalidad de su ciclo de vida, no sea tan evidente que supongan una notable mejoría respecto a vehículos que funcionan con gasóleo, el futuro de la movilidad pasa por el desarrollo de estos [8].

Con el aumento de la producción y venta de coches eléctricos se prevé que la demanda mundial de pilas y baterías se multiplique por catorce de aquí a 2030 [11] y las baterías de ion-litio son las que mejores prestaciones tienen actualmente y, por ello, las preferidas para equipar los vehículos eléctricos. El éxito de las baterías de ion-litio en la movilidad eléctrica va a depender del coste, la densidad energética y el ciclo de vida de estas, pero también de la seguridad [12]. Es necesario estudiar los riesgos que supone la operación

de baterías de ion-litio en automóviles, entre ellos la fuga térmica y las partículas que se liberan durante esta.

Este trabajo pretende determinar la influencia del estado de carga de la batería en el proceso de fuga térmica y en la morfología, composición y oxidación térmica de las partículas que se generan.

### 3. Antecedentes

El estudio de combustión de baterías es un campo de reciente incorporación en el Instituto Universitario CMT-Clean Mobility & Thermofluids de la Universitat Politècnica de València (UPV). A pesar de ello, los trabajos realizados hasta la fecha han hecho posible este proyecto.

Respecto a la caracterización del fenómeno de fuga térmica en baterías con diferentes químicas hay que destacar el trabajo de Antonio García, Javier Monsalve-Serrano, Rafael Lago Sari y Santiago Martínez-Boggio [13]. Por otro lado, cabe mencionar los estudios realizados acerca de análisis de partículas que, aunque aplicados en el campo de análisis de emisiones en motores de combustión interna alternativos, han servido de base para este trabajo [14].

En otros centros e instituciones se han desarrollado trabajos que sí que se centran específicamente en el análisis de las partículas emitidas durante la fuga térmica en baterías. Vinay Premnath, Yanyu Wang, Nolan Wright, Imad Khalek y Steven Uribe [15] observaron la influencia de la química de la batería y el mecanismo de inicio de la fuga térmica en las emisiones, utilizando celdas al 100 % de carga; Yan Wang, Hewu Wang, Yajun Zhang, Li Cheng, Yu Wu, Xuning Feng, Languang Lu y Minggao Ouyang [16] estudiaron en profundidad las características térmicas y la morfología de las partículas emitidas por una batería prismática al 97 % de carga; y Huaibin Wang, Qinzheng Wang, Changyong Jin, Chengshan Xu, Yanhong Zhao, Yang Li, Chonglin Zhong y Xuning Feng [17] centraron su trabajo en el análisis elemental de las partículas emitidas y su morfología.

Por último, Yajie Yang, Deyu Fang, Afshin Maleki, Shadi Kohzadi, Yanran Liu, Yafei Chen, Runze Liu, Guanyue Gao y Jinfang Zhi [18] caracterizaron las partículas emitidas analizando su distribución por tamaños y composición y realizaron análisis de biotoxicidad.

#### 4. Estructura

La estructura de este trabajo pretende aportar claridad en la comprensión del objeto de estudio, para ello se ha optado por dividir el proyecto en cinco capítulos con sus respectivos subapartados. El capítulo actual sirve como introducción al trabajo y presenta el objeto de este, una breve justificación y la relación de trabajos que se han utilizado como guía e inspiración. El siguiente capítulo es el dedicado al marco teórico. En este se describe qué son las baterías, su funcionamiento y algunos conceptos necesarios para entender el trabajo realizado. También se incluye un apartado acerca del fenómeno de la fuga térmica y otro sobre la peligrosidad de las partículas.

En el capítulo tres, encontramos una descripción de la metodología, desde la puesta a punto de las celdas hasta el análisis de las partículas recogidas. Cada fase del proyecto comprende un subapartado del capítulo. En el capítulo cuatro, se exponen y analizan todos los resultados obtenidos. Este capítulo se ha organizado tomando como modelo el capítulo anterior y separando los resultados según la fase a la que correspondían. Por último, en el capítulo cinco, se exponen las conclusiones del trabajo.

Al final del documento encontramos un anexo donde se han incluido los códigos de Matlab realizados para analizar los datos obtenidos en el proceso experimental. En el anexo, se incluyen los códigos organizados según la fase experimental a la que pertenecen siguiendo el mismo orden que en los capítulos tres y cuatro.

## CAPÍTULO 2: CONCEPTOS PREVIOS

### 1. Baterías de ion-litio

Las baterías de ion-litio se empezaron a comercializar en 1991 y actualmente son el sistema de almacenamiento de energía más utilizado, esto es debido a su alta densidad energética, su elevada eficiencia y su prolongado tiempo de vida. Este tipo de batería se utiliza en múltiples aplicaciones, dada su gran versatilidad. Encontramos baterías de ion-litio en dispositivos electrónicos, en aplicaciones médicas y en el sector de la automoción entre otros [19].

Podemos distinguir cuatro partes fundamentales que constituyen las baterías de ion-litio: el cátodo, el ánodo, el separador y el electrolito. En el cátodo y en el ánodo se encuentran los portadores de carga, iones y electrones, que posibilitan el almacenamiento y la liberación de energía en la batería. Cuando la batería está descargada, los iones de litio se encuentran intercalados en el material activo del cátodo y, al cargarla, se desplazan al ánodo. El separador actúa como barrera para evitar un cortocircuito interno, normalmente se utiliza un material poroso que permite el intercambio de iones entre el ánodo y el cátodo. El electrolito tiene el papel de conducir los iones, a través de este se mueven por el interior de la batería, pero a su vez es un aislante eléctrico que evita la autodescarga de la celda y el cortocircuito. Suele ser una solución mezcla de un carbonato orgánico y una sal de litio, ya que en las baterías de ion-litio no se puede utilizar agua dada su reactividad a este material. En algunas baterías encontramos también electrolitos sólidos o gelatinosos [20][21].

Las baterías de litio se fabrican en diferentes geometrías siendo las cilíndricas y las prismáticas las más comunes en los vehículos eléctricos. En el caso de las celdas cilíndricas, el cátodo y el ánodo se disponen en forma de láminas enrolladas sobre sí mismas y entre ellas se coloca el separador impregnado de electrolito [2][21].

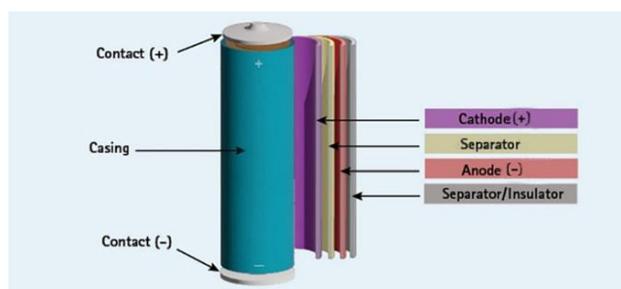
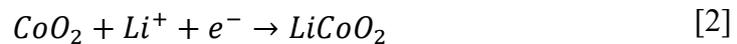


Ilustración 1. Estructura de una batería cilíndrica [22]

Todas las baterías de ion-litio siguen el mismo principio de funcionamiento. Cuando la batería está cargada y se conecta a un circuito externo, se genera una corriente eléctrica gracias a las reacciones químicas que tienen lugar en el cátodo y en el ánodo, los dos electrodos. Cada uno de ellos experimenta una semirreacción. En el ánodo de la batería, tiene lugar una semirreacción de oxidación, el litio intercalado en el material activo del ánodo se oxida y libera electrones [2]. La reacción típica en el ánodo para un compuesto de litio intercalado en grafito es la siguiente [23]:



Los electrones generados utilizan el circuito externo para llegar al cátodo y así producen trabajo útil. En el cátodo, participan en la semirreacción complementaria de reducción. Los iones de litio se desplazan a través del electrolito y se intercalan en el cátodo, compensando el exceso de carga negativa de los electrones. Para un cátodo de óxido de cobalto y litio la reacción es la siguiente [23]:



Ambas reacciones continúan hasta que todos los iones llegan al cátodo, una vez esto sucede cesa el flujo de electrones y la batería está totalmente descargada [2].

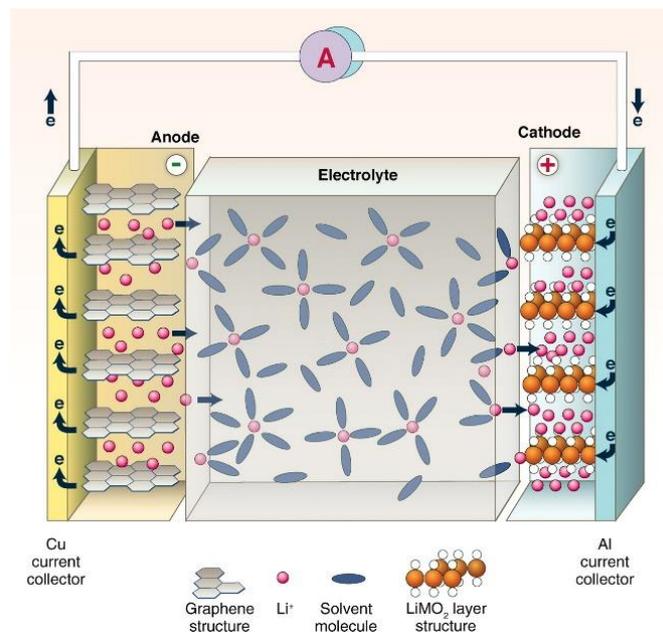


Ilustración 2. Movimiento de cargas durante la descarga de la batería [24]

La oxidación del litio sucede de forma espontánea, ya que el litio es el metal con menor potencial de reducción [ $E^0(\text{Li}^+/\text{Li}) = -3.04 \text{ V}$ ] y, por lo tanto, tiene una gran tendencia a liberar un electrón. Por el contrario, para reducir el litio y cargar la batería es necesario un aporte de energía. Cuando se conecta la batería a una fuente de energía, se producen las reacciones inversas en los electrodos, los electrones entran en el ánodo y provocan la reducción del litio y los iones que se encontraban en el cátodo son atraídos de vuelta para compensar la carga negativa de los electrones [25]. El proceso continúa hasta que todos los iones llegan al ánodo y completan la carga de la batería. Una vez cargada, vuelve a estar lista para su uso.

### 1.1. Tipos de baterías

Las baterías de ion-litio se identifican comúnmente según la composición de su cátodo, el material activo de este determina la química de la batería. Los compuestos que se utilizan son compuestos de intercalación que permiten la inserción reversible de los iones de litio en su estructura [26]. La variación en los materiales utilizados permite fabricar baterías con diferentes características para adaptarse a múltiples aplicaciones [27].

#### 1.1.1. Baterías LCO ( $\text{LiCoO}_2$ )

Las baterías de óxido de cobalto y litio fueron las primeras en comercializarse en 1991 y han sido utilizadas durante mucho tiempo en dispositivos electrónicos como ordenadores y tabletas. Se caracterizan por su alta densidad energética, su largo ciclo de vida y la facilidad en su fabricación. Sin embargo, son baterías con poca estabilidad térmica y de precio elevado, ya que el cobalto es un material con una disponibilidad limitada y, por lo tanto, tiene un elevado coste [26].

El óxido de cobalto y litio tiene una estructura cristalina de capas entre las cuales se insertan los iones de litio. Esta estructura puede verse deformada si se somete a ciclos profundos de carga y descarga perjudicando el rendimiento de la celda, para mejorar las características de estas baterías se utilizan revestimientos de diversos óxidos metálicos ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{B}_2\text{O}_3$ ,  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{ZrO}_2$ ) [27].

#### 1.1.2. Baterías LNO ( $\text{LiNiO}_2$ )

Estas baterías tienen la misma estructura cristalina que las LCO y una capacidad específica similar, pero gracias a la ausencia de cobalto son más económicas. Su

estabilidad térmica resulta incluso peor que la de las LCO por lo que no son muy utilizadas. Para tratar de mejorar su rendimiento y prestaciones se añadió cobalto, manganeso y aluminio a su estructura [26][27].

#### 1.1.3. Baterías NCA ( $\text{LiNi}_{0.8}\text{Co}_{0.15}\text{Al}_{0.05}\text{O}_2$ )

Como resultado del dopaje del cátodo LNO se desarrollaron las baterías NCA. Estas baterías tienen una elevada capacidad de descarga y mayor vida útil que las LCO [26]. No son tan seguras como otros cátodos y únicamente son utilizadas en vehículos eléctricos de la marca Tesla. Al tener un coste de fabricación elevado su utilización en otras aplicaciones a parte de la automoción está limitada [26].

#### 1.1.4. Baterías LMO ( $\text{LiMn}_2\text{O}_4$ )

El cátodo  $\text{LiMn}_2\text{O}_4$  presenta una estructura de espinela que mejora el flujo de iones en el electrodo, gracias a esto su resistencia interna es más baja y permite cargar y descargar estas baterías a mayor velocidad. Su estabilidad térmica es mejor que la de las baterías LCO, pero tienen menor capacidad y una vida útil más corta [26]. Al usar manganeso en vez de cobalto y níquel son más respetuosas con el medio ambiente y más económicas que las anteriores [28].

#### 1.1.5. Baterías NMC ( $\text{Li}(\text{Ni}_x\text{Mn}_y\text{Co}_{1-x-y})\text{O}_2$ )

Las baterías de óxido de litio, níquel, manganeso y cobalto combinan las propiedades del níquel y el manganeso para conseguir las mejores características. El níquel aporta una gran capacidad específica pero su estabilidad térmica es baja, por el contrario, el manganeso tiene la ventaja de formar una estructura de espinela para conseguir una resistencia interna menor, pero ofrece una baja energía específica [26].

La proporción de los distintos metales varía según el fabricante, los electrodos ricos en níquel aumentan la densidad energética mientras que reducir el cobalto abarata los costes. Existen actualmente multitud de combinaciones para este cátodo que se nombran según la proporción de cada elemento, la batería NMC111 está compuesta por partes iguales de níquel, manganeso y cobalto, la NMC811 corresponde al óxido  $\text{LiNi}_{0.8}\text{Co}_{0.1}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_2$  y encontramos también las NMC622, NMC523 y NMC712, entre otras. Todas estas baterías tienen actualmente una gran demanda y son las más adecuadas para los vehículos eléctricos [26].

### 1.1.6. Baterías LFP (LiFePO<sub>4</sub>)

Las baterías LFP ofrecen un buen rendimiento electroquímico, además de una alta corriente de descarga y una larga vida útil [26]. Están formadas por fosfatos con una estructura de olivino, que es muy estable térmicamente [27]. Al utilizar hierro son más baratas y respetuosas con el medio ambiente que las baterías con cátodos de cobalto o níquel [28].

Como puntos débiles encontramos su mala conducción electrónica y de iones de litio, que es posible mejorar utilizando partículas de menor tamaño y un revestimiento de carbono. El coste de transformación asociado a la fabricación de nanopartículas de LiFePO<sub>4</sub> recubiertas de carbono eleva el precio de estas baterías [28].

### 1.2. Estado de carga

El estado de carga (SOC) es uno de los parámetros más importantes de una batería, describe la cantidad de energía disponible en la celda. Se puede definir como la ratio entre la capacidad de la batería en el momento actual,  $Q(t)$ , y la capacidad nominal,  $Q_n$ . La capacidad nominal viene dada por el fabricante y representa la máxima carga que puede almacenarse en la celda. El SOC se expresa habitualmente en forma de porcentaje [29][30].

$$SOC(t) = \frac{Q(t)}{Q_n} \quad [3]$$

Existen diferentes métodos para estimar el SOC de una batería, pero el método de Coulomb es probablemente el más común [29]. En este método se calcula la capacidad restante de la batería teniendo en cuenta la carga transferida. Para ello, se utiliza un valor de SOC inicial,  $SOC(t-1)$ , y la integral de la corriente de descarga,  $I(t)$ , a lo largo del tiempo. La ecuación para una corriente constante es la siguiente [30]:

$$SOC(t) = SOC(t-1) + \frac{I(t)}{Q_n} \times \Delta t \quad [4]$$

Cuando se trata de una corriente entrante en la batería, es decir, durante la carga de la celda, el signo de la corriente será positivo. Cuando la corriente sea saliente, el signo de esta será negativo.

Estimar correctamente el SOC puede impedir que las baterías se sobrecarguen y sobredescarguen, y así evitar daños permanentes en la estructura interna que puedan comprometer la seguridad [31].

### 1.3. Protocolo de carga CCCV

La forma en la que se carga una batería influye directamente en el buen funcionamiento de esta a lo largo del tiempo. Exponer las celdas a sobrecargas o velocidades de carga elevadas disminuye la vida útil de las mismas [2]. Para evitar que esto suceda existen diferentes protocolos de carga, pero el protocolo CCCV (del ing. *Constant Current Constant Voltage*) se considera el protocolo estándar para baterías de ion-litio [32].

El protocolo CCCV realiza la carga de la batería en dos fases. En la primera fase, la celda se carga manteniendo la corriente constante hasta que el voltaje alcanza un valor máximo predefinido, este voltaje máximo dependerá de la química de la batería y no debe superar el voltaje máximo de la celda [33]. A continuación, en la segunda fase, se mantiene constante el voltaje y la corriente va disminuyendo exponencialmente. La carga termina cuando el valor de la corriente desciende por debajo de un valor umbral predefinido que se conoce como corriente de corte. En ocasiones se regula el final de la carga estableciendo un tiempo de carga máximo en lugar de una corriente de corte [32].

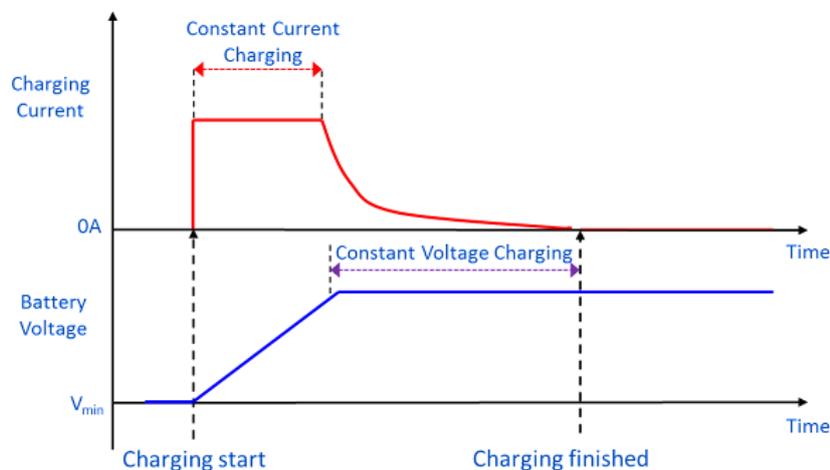


Ilustración 3. Protocolo de carga CCCV [34]

La duración de la carga depende principalmente de la corriente de carga y de la capacidad de la batería. Para caracterizar la velocidad del proceso independientemente de la capacidad se utiliza la tasa C. Una tasa de 1C significa que la corriente de carga utilizada será la necesaria para cargar la batería en una hora. A medida que aumenta la tasa C, el tiempo de carga de la batería,  $t_c$ , disminuye [35].

$$\text{Tasa } C = \frac{1}{t_c (h)} \quad [5]$$

La corriente de carga necesaria,  $I_c$ , se puede obtener dividiendo la capacidad nominal de la batería entre el tiempo de carga equivalente a la tasa C seleccionada [33].

$$I_c (A) = \frac{Q_n(Ah)}{t_c(h)} \quad [6]$$

La tasa C puede aplicarse de la misma forma al proceso de descarga, una tasa de 1C nos indica que una batería totalmente cargada tardará una hora en descargarse, durante este tiempo la corriente que suministrará,  $I_d$ , dependerá de la capacidad de la batería y podrá calcularse de la misma forma que la corriente de carga [33].

$$I_d (A) = \frac{Q_n(Ah)}{t_d(h)} \quad [7]$$

## 2. Fuga térmica

La fuga térmica es uno de los problemas más importantes que enfrenta la utilización a gran escala de baterías de ion-litio en vehículos eléctricos, se trata de una reacción en cadena durante la cual se produce la descomposición sucesiva de los materiales de la batería. Este proceso provoca un aumento descontrolado de la temperatura que resulta en la generación de fuego y humo o incluso la explosión de la celda. La fuga térmica puede iniciarse por una situación de abuso en la batería o de forma inesperada por un fallo autoinducido [36].

Las condiciones de abuso a las que puede ser sometida la celda se clasifican en abuso mecánico, abuso eléctrico y abuso térmico. El abuso mecánico se produce cuando la celda sufre una colisión o penetración, en estos casos es común que se produzca un cortocircuito interno que libera calor e inicia una condición de abuso térmico. El abuso eléctrico puede

ser provocado por una sobrecarga, una sobredescarga o un cortocircuito externo. El cortocircuito externo rara vez conduce a la fuga térmica, pero durante la sobrecarga y la sobredescarga las corrientes elevadas aumentan el riesgo de explosión. Por último, el abuso térmico se considera la causa directa de la fuga térmica y se ocasiona tras un abuso eléctrico o mecánico o por un sobrecalentamiento [37][38].

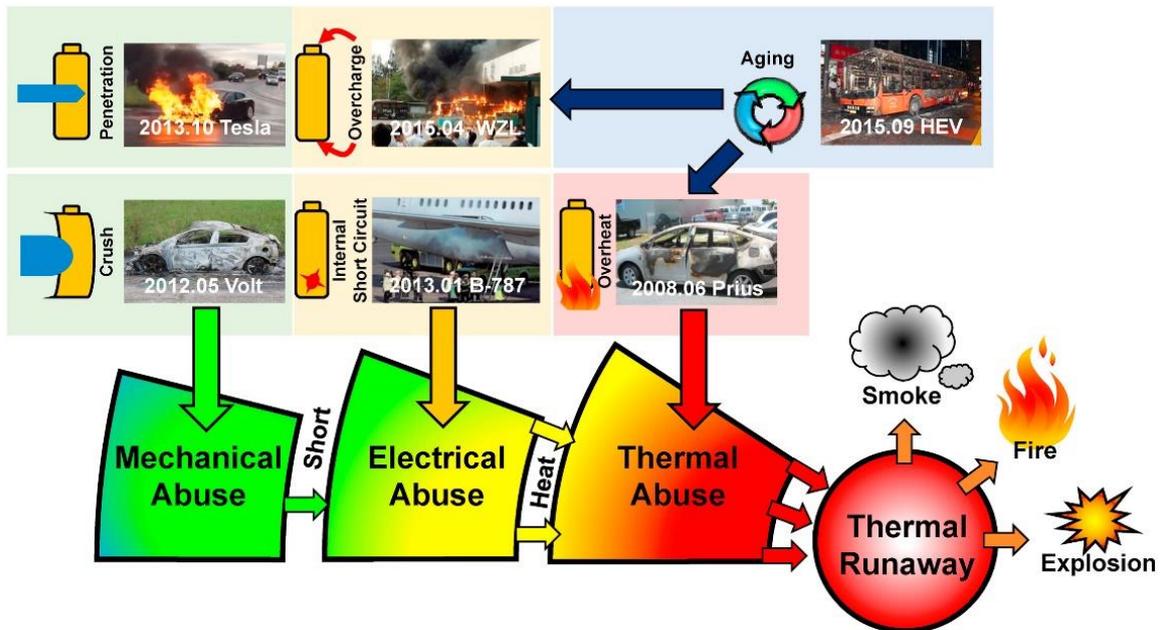


Ilustración 4. Condiciones de abuso [36]

El proceso de fuga térmica se inicia cuando la batería se somete a una situación de abuso y comienza a aumentar la temperatura. El electrolito de la batería está compuesto por un disolvente y una sal de litio, el disolvente es una sustancia tradicionalmente estable pero la presencia de la sal de litio cataliza su descomposición en especies volátiles ante el aumento de la temperatura. El electrolito líquido comienza a transformarse en gas y aumenta la presión en el interior de la celda. A medida que la temperatura aumenta, se va produciendo la descomposición de otros materiales de la batería en una reacción en cadena y los gases generados escapan por la válvula de venteo. Cuando el separador colapsa, se produce un cortocircuito interno de gran magnitud que libera una gran cantidad de energía y puede iniciar la combustión de los gases venteados o provocar una explosión [36][38].

El cortocircuito interno es la característica más común de la fuga térmica, se produce cuando el cátodo y el ánodo entran en contacto tras el colapso del separador. Al producirse el cortocircuito interno, se libera la energía electroquímica almacenada en la celda. Un

abuso térmico o mecánico puede provocar el cortocircuito interno inmediatamente, pero este también puede suceder de forma espontánea por defectos de fabricación. Normalmente, para que un cortocircuito interno espontáneo provoque la fuga térmica, es necesario un tiempo largo de incubación y, por lo tanto, podrá ser detectado a tiempo por el sistema de gestión de la batería [36].

El riesgo de fuga térmica puede reducirse mejorando las propiedades intrínsecas de las baterías, desarrollando sistemas de protección ante situaciones de abuso y con un control efectivo de las señales de alerta [36]. Además, un conocimiento mayor de las características de este fenómeno y de la influencia de diferentes parámetros en su activación y magnitud facilitarían el desarrollo de nuevas medidas de seguridad.

La fuga térmica produce emisiones de gases y partículas que pueden suponer un riesgo para la salud humana [18]. Los gases que se emiten están compuestos principalmente por hidrógeno, dióxido de carbono, monóxido de carbono y otros hidrocarburos que tienden a arder por el calentamiento de la batería [39]. Las partículas generadas son producto de la combustión y la expulsión de los materiales del cátodo y el ánodo, su composición es variable y depende de diversos factores, como la química de la batería, la composición del electrolito y el estado de carga [16].

### 3. Partículas

Las partículas se definen como una mezcla heterogénea y compleja de sustancias orgánicas e inorgánicas de tamaño y composición química muy variable. Son los contaminantes del aire más peligrosos para la salud humana. Las partículas de un diámetro aerodinámico igual o inferior a las 10 micras (PM10) pueden penetrar en el sistema respiratorio, las de menor tamaño, de 2.5 micras de diámetro o inferior (PM2.5), pueden llegar a los alveolos pulmonares y agravar patologías. Además de PM10 y PM2.5 las partículas ultrafinas, inferiores a 0.1 micras (UFP) pueden incluso alcanzar el flujo sanguíneo y por tanto afectar a diversos órganos, al sistema nervioso central y al sistema reproductor entre otros [40].

Las partículas emitidas durante la fuga térmica aumentan su peligrosidad al expulsarse a elevadas temperaturas y acompañadas de chispas. Además, al tener una gran energía cinética, se dispersan y pueden entrar en contacto con materiales combustibles [41]. Para mejorar la seguridad de las baterías y mejorar el control de incendios, es importante

conocer las características de la distribución del tamaño de las partículas y, para aplicar un tratamiento adecuado de los residuos, es necesario conocer también su composición elemental.

## CAPÍTULO 3: METODOLOGÍA

### 1. Descripción

La realización de este proyecto se ha dividido en varias etapas. En primer lugar, se ha realizado el acondicionamiento eléctrico de las baterías. El objetivo de este es inducir la irreversible pérdida de capacidad que sucede tras el primer ciclo de carga y descarga [42], para así conseguir las características eléctricas especificadas por el fabricante y las mismas condiciones iniciales en todas las celdas. Tras el acondicionamiento se cargan y descargan las celdas al 100 %, 75 % y 50 % de su máxima capacidad. Se han elegido estos estados de carga, ya que son representativos del funcionamiento normal del paquete de baterías en vehículos eléctricos.

A continuación, utilizando un calorímetro de aceleración de ratio, se provoca la fuga térmica y posteriormente se recogen las partículas. Una vez obtenidas se separan por tamaños y se preparan las muestras para analizar. Utilizando un microscopio electrónico de barrido de emisión de campo, se estudia su morfología y composición y, para determinar las características térmicas de las muestras, se realiza una calorimetría diferencial de barrido y un análisis termogravimétrico.



*Ilustración 5. Metodología del proyecto*

## 2. Celda utilizada

Las baterías utilizadas para este proyecto son el modelo INR18650-MH1 de la marca LG. Se trata de celdas cilíndricas de 18 mm de diámetro y 65 mm de longitud con una capacidad nominal de 3.2 Ah. Estas baterías son de tipo NMC811, ya que el material activo de su cátodo es  $\text{Ni}_{0.8}\text{Mn}_{0.1}\text{Co}_{0.1}$ . Se utilizan un total de tres baterías para el desarrollo del proyecto.



*Ilustración 6. Batería LG INR18650-MH1 [43]*

A continuación, se detallan las características de la batería proporcionadas por el fabricante.

<b>Parámetro</b>	<b>Valor</b>
Capacidad nominal	3200 mAh
Voltaje nominal	3.63 V
Voltaje máximo	4.20 V
Voltaje mínimo	2.50 V
Corriente máxima de descarga	10 A
Material activo del cátodo	$\text{Ni}_{0.8}\text{Mn}_{0.1}\text{Co}_{0.1}$
Material activo del ánodo	Grafito
Peso	Máx. 49 g
Condiciones de carga estándar	
Corriente constante	0.5 C
Corriente de corte	50 mA

*Tabla 1. Características de la celda utilizada*

## 3. Acondicionamiento eléctrico

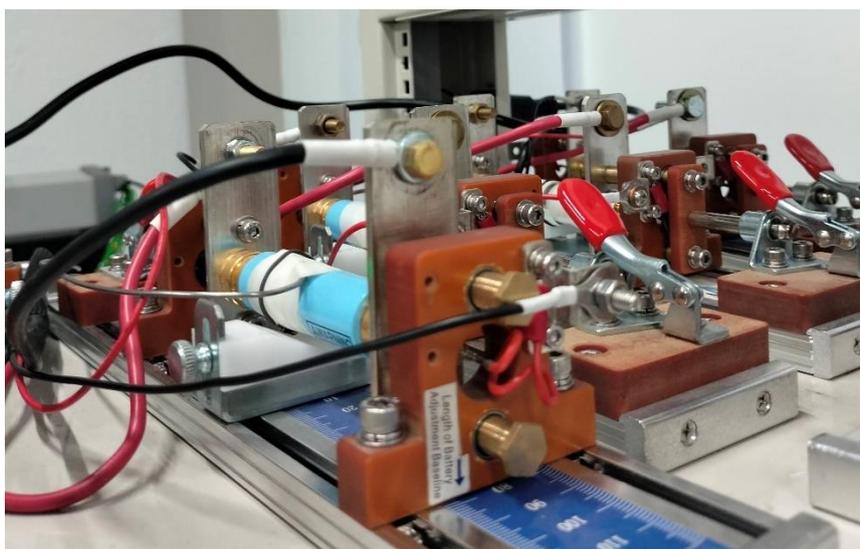
El acondicionamiento eléctrico de las celdas se ha realizado utilizando una fuente de alimentación bidireccional, este tipo de fuentes permite tanto la carga como la descarga

de las celdas. La fuente disponible en el laboratorio es el modelo LBT21084HC de la marca Arbin Instruments. Esta fuente cuenta con cuatro canales para el ensayo de baterías y permite medir la corriente, el voltaje y la resistencia interna de la celda en cualquier momento.



*Ilustración 7. Fuente bidireccional Arbin LBT21084HC [44]*

Las celdas se colocan en un soporte diseñado para el ensayo de baterías que asegura una medida precisa de la corriente y el voltaje. La conexión a la fuente se realiza mediante cuatro cables, dos conectados al terminal positivo de la batería y dos, al terminal negativo; con una pareja de cables se mide el voltaje y con la otra, la intensidad.



*Ilustración 8. Montaje para el acondicionamiento eléctrico*

El proceso de acondicionamiento se programa utilizando el software de la propia marca que permite la creación de ciclos de carga y descarga definiendo valores como la tasa C, la corriente de corte, el voltaje máximo, la duración y el número de ciclos. En primer lugar, se carga la batería utilizando el protocolo CCCV a una tasa de 1C hasta el voltaje máximo de la celda, 4.2 V, y con una corriente de corte de 50 mA. Tras la carga, se procede a descargar completamente la batería para determinar su capacidad nominal. El valor de la capacidad nominal se corresponde con el área bajo la curva de la intensidad de descarga y se obtiene integrando esta. Este ciclo se repite tres veces hasta conseguir una desviación en los valores de la capacidad nominal menor al 2 %.

Una vez realizado el acondicionamiento se preparan las celdas al 100 %, al 75 % y al 50 % de su capacidad máxima. Para conseguir los estados de carga seleccionados es necesario primero cargar las celdas al 100 % y después descargarlas durante cierto tiempo según el estado de carga deseado. El tiempo necesario se ha calculado utilizando el método de Coulomb y una velocidad de descarga de 1C. En primer lugar, se ha determinado la intensidad de descarga necesaria para la tasa 1C sabiendo que esta equivale a descargar totalmente la batería en una hora.

$$I_d(A) = \frac{Q_n (Ah)}{t_d (h)} = \frac{3.2 Ah}{1 h} = 3.2 A \quad [8]$$

Una vez calculada la intensidad de descarga se puede aplicar la expresión del método de Coulomb para obtener el tiempo.

$$SOC (t) = SOC (t - 1) + \frac{I (t)}{Q_n} \times \Delta t \quad [9]$$

Donde  $SOC (t)$  es el estado de carga deseado expresado en forma decimal;  $SOC (t-1)$  es el estado de carga inicial, en nuestro caso el 100 %, expresado también sobre uno;  $Q_n$  es la capacidad nominal de la batería, 3.2 Ah; y la  $I$  es la intensidad calculada antes, que al ser una corriente saliente se expresará con signo negativo. Sustituyendo en la expresión anterior para los estados de carga deseados nos queda:

$$0.75 = 1 + \frac{-3.2 A}{3.2 Ah} \times \Delta t_{SOC \ 75 \%} \quad [10]$$

$$0.5 = 1 + \frac{-3.2 A}{3.2 Ah} \times \Delta t_{SOC\ 50\ \%} \quad [11]$$

Y al despejar el tiempo obtenemos:

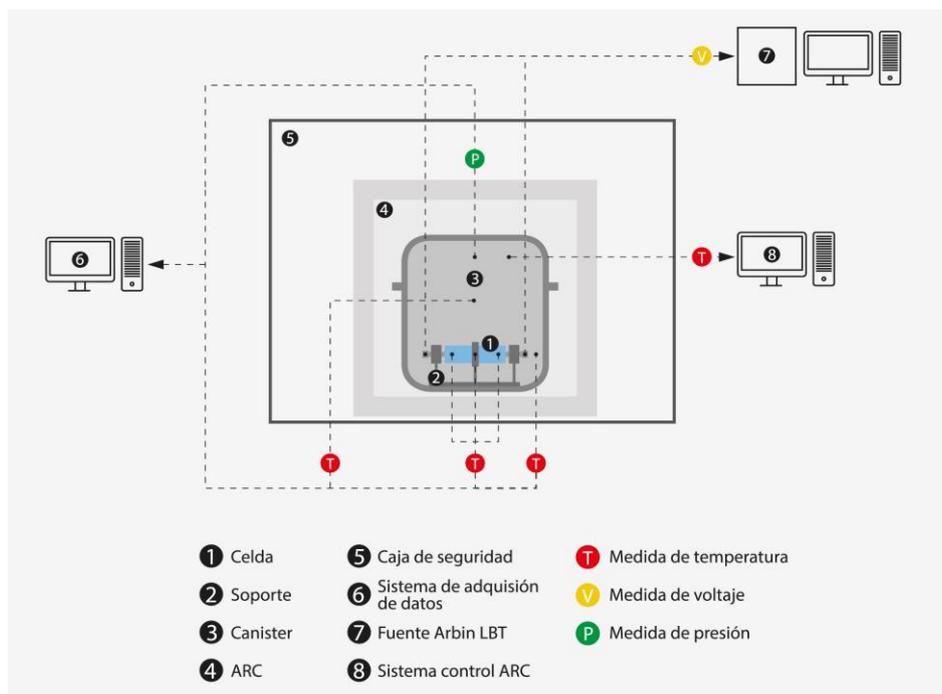
$$\Delta t_{SOC\ 75\ \%} = (1 - 0.75) * \frac{3.2 Ah}{3.2 A} = 0.25 h = 15 min \quad [12]$$

$$\Delta t_{SOC\ 50\ \%} = (1 - 0.5) * \frac{3.2 Ah}{3.2 A} = 0.5 h = 30 min \quad [13]$$

Por lo tanto, para conseguir una celda al 75 % de su capacidad, será necesario descargarla durante 15 minutos a una velocidad de 1C y, para un SOC del 50 %, serán necesarios 30 minutos.

#### 4. Proceso de fuga térmica

La fuga térmica de las baterías tiene lugar en la sala de ensayos del laboratorio. El montaje experimental permite provocar la fuga térmica mediante un abuso térmico en un recipiente hermético del que luego es posible extraer las partículas generadas. En el siguiente esquema, se pueden ver en detalle los componentes utilizados y los puntos de medida.



*Ilustración 9. Montaje experimental*

Previamente a la realización del ensayo, se preparan las celdas retirando la envoltura de plástico que las protege para evitar que contamine las partículas obtenidas. Tras esto, se pesa cada celda y se conectan los termopares. Para evitar cortocircuitos con los termopares, se cubren las celdas con cinta térmica. En cada celda se colocan tres termopares de medida de tipo N: uno en el centro, otro en el extremo negativo y otro en el extremo positivo. Además de estos puntos de medida, se colocan también un termopar próximo a la válvula de venteo de la celda y otro para medir la temperatura del ambiente durante el ensayo. El sistema de control del ARC incorpora un último termopar para controlar el calentamiento del calorímetro. Estos termopares tienen una resolución de 0.01 °C y una tasa de error del 0.7 % para asegurar un registro meticuloso de la temperatura. El sensor de presión se conecta directamente a la tapa del canister.



*Ilustración 10. Celda preparada en el interior del canister*

La celda se coloca en un soporte que la mantiene en la misma posición durante todo el ensayo. En el soporte se sujetan también mediante dos tornillos los cables de medida del voltaje. Estos cables se conectan a la fuente bidireccional Arbin LBT21084HC para medir el voltaje durante todo el ensayo. El soporte se coloca en el interior del canister que se cierra herméticamente, de esta forma se consigue que los gases y las partículas de la combustión queden retenidos en su interior permitiendo que puedan ser extraídos sin

problema al terminar el ensayo. En la tapa del canister, encontramos las salidas para los termopares de medida y el sensor de presión, que se conectan al sistema de adquisición de datos. El canister está diseñado específicamente para pruebas de fuga térmica y es capaz de aguantar presiones de hasta 40 bares.

El canister se introduce en el calorímetro que se encuentra en el interior de la caja de seguridad. El calorímetro utilizado es el ARC THT EV+ de Thermal Hazards Technologies. Las paredes y la tapa del ARC tienen resistencias eléctricas que actúan como barreras adiabáticas y calientan el ambiente interno de la cámara, lo que permite al ARC trabajar a una temperatura controlada con un 0.2 % de error. El calorímetro cuenta con una salida por donde se extraen todos los cables de medida. Desde el ordenador del sistema, se controla el calorímetro para provocar la fuga térmica.



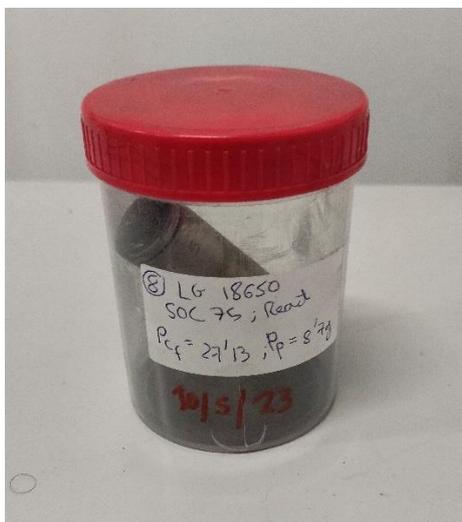
*Ilustración 11. Canister y ARC*

El abuso térmico se provoca calentando la batería a 2.5 °C/min. Durante todo el calentamiento se monitoriza la temperatura a una frecuencia de 10 Hz y, cuando se detecta un rápido aumento de esta, se detiene el calentamiento del calorímetro, ya que se considera que se ha iniciado la fuga térmica. La presión se mide a una frecuencia de 200 Hz. Una vez finaliza la combustión de la celda el ensayo se termina y se procede a la recogida de las partículas.

## 5. Recogida de las partículas

La recogida de las partículas se efectúa tras la fuga térmica. Cuando el canister se ha enfriado lo suficiente, los gases generados se extraen a través de la salida habilitada para

ello y se retira la tapa. Las partículas generadas se encuentran bajo una malla metálica situada en la parte inferior del depósito, para extraerlas se desplaza la malla y con ayuda de un cepillo metálico se capturan todas las partículas generadas. Además de las partículas, se recupera del canister la batería ensayada para volver a pesarla y controlar la pérdida de masa.



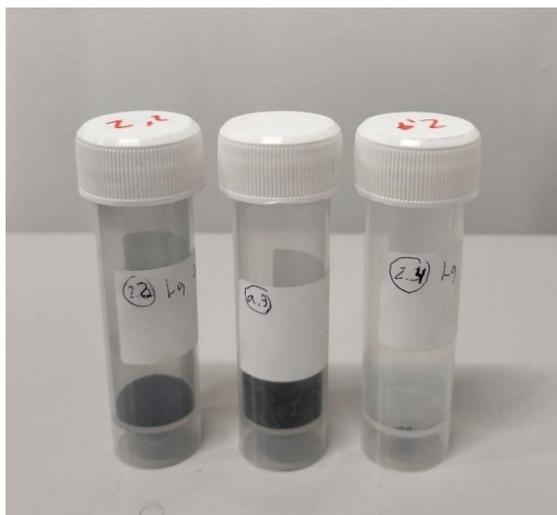
*Ilustración 12. Celda recogida tras el ensayo*

Las partículas se recogen en un frasco de polipropileno de 50 mL y se pesan en la balanza. Una vez pesadas se utilizan tamices metálicos de diferentes tamaños de malla para separar las partículas por secciones. Los tamices utilizados tienen orificios de 2 mm, 1.6 mm, 1 mm, 0.45 mm y 0.1 mm y las secciones resultantes se detallan a continuación.

<b>Sección</b>	<b>Tamaño</b>
1	<100 $\mu$ m
2	100-450 $\mu$ m
3	450 $\mu$ m-1mm
4	1-1.6mm
5	1.6-2mm
6	>2mm

*Tabla 2. Tamaños de las secciones*

Cada sección se almacena en un frasco de polipropileno de 30 mL y se pesa antes de realizar más análisis. Clasificar las partículas según su tamaño permite observar la influencia de este parámetro en los análisis térmicos y en la composición [45].



*Ilustración 13. Partículas separadas por secciones*

Una vez realizado todo el procedimiento, se limpia el canister en profundidad para evitar contaminar los siguientes ensayos. Para ello, se utiliza el cepillo metálico y un desengrasante, se desinfecta todo el recipiente y se deja secar antes de volver a utilizarlo.

## 6. Análisis de las partículas

### 6.1. Análisis mediante microscopio electrónico

El análisis morfológico y elemental de las partículas se realiza en el Servicio de Microscopía Electrónica de la Universitat Politècnica de València utilizando un microscopio electrónico de barrido de emisión de campo (FESEM). Un microscopio electrónico de barrido de emisión de campo emite un haz de electrones que barre el área deseada de la muestra y, mediante diferentes detectores, es capaz de ofrecer un variado rango de informaciones procedentes de la superficie de esta. Al utilizar como fuente de electrones un cañón de emisión de campo que proporciona electrones de alta y baja energía muy focalizados, consigue una elevada resolución espacial y permite trabajar a muy bajos potenciales [46].

El microscopio utilizado es el modelo ULTRA 55 de la marca Zeiss. El equipo instalado en el Servicio de Microscopía de la UPV cuenta con un detector de electrones secundarios *in lens*, que es muy adecuado para la caracterización superficial de cualquier material, y con un detector de energía dispersiva de Rayos X (EDS) de Oxford Instruments, que permite obtener información cuantitativa y cualitativa de los elementos químicos presentes en la muestra.



*Ilustración 14. Microscopio electrónico de barrido de emisión de campo Zeiss ULTRA 55 [47]*

Las muestras se preparan en el Servicio de Microscopía. Se utilizan portamuestras de carbono, ya que se espera que este sea el elemento más representativo de las muestras al tratarse de partículas de combustión y el portamuestras no alterará este resultado. Los portamuestras de aluminio no se consideran adecuados, ya que no es seguro que se vaya a encontrar este elemento en la composición de las partículas, y utilizar un portamuestras de este material podría interferir en la composición obtenida.



*Ilustración 15. Muestras para FESEM en portamuestras de carbono*

Para fijar las muestras a los portamuestras se utiliza cinta de doble cara de carbono. Se coloca un trozo de cinta en el portamuestras y, con una espátula, se dejan caer las partículas para que se adhieran. Antes de introducir las muestras en el microscopio, se

utiliza un soplador de aire para eliminar las partículas que no se han adherido y así evitar que ensucien el equipo.

#### 6.1.1. Análisis morfológico

El análisis morfológico se realiza con el detector de electrones secundarios *in lens* y a un potencial de 1.5 kV. Al tratarse de partículas de composición no homogénea, se seleccionan al menos cinco puntos en cada muestra para comprender mejor la morfología de la sección estudiada.

Para cada punto se capturan imágenes con distintos niveles de aumento. En primer lugar, se toman imágenes a 170 aumentos, con esta fotografía se pretende obtener una imagen completa de las partículas de la sección estudiada. El siguiente nivel es de 300 aumentos y permite ampliar hasta observar toda la superficie de una partícula pequeña o centrarse en una zona específica de partículas más grandes. Por último, se capturan las imágenes con 1000 aumentos para observar con mayor detalle las características más pequeñas de las partículas.

#### 6.1.2. Análisis elemental

El análisis elemental se realiza con el detector de energía dispersiva de Rayos X y a un potencial de 20 kV. El potencial de aceleración se elige en función de los niveles de energía de los elementos esperados en la muestra y debe ser tres veces superior al nivel de energía máximo de los posibles elementos. Los análisis se realizan con una resolución de 250  $\mu\text{m}$  y en la zona central de la muestra, coincidiendo con la primera posición seleccionada para las imágenes de la morfología. Para cada punto analizado, se obtiene una imagen de mapa de colores de la composición química de la superficie de la muestra y un informe que incluye el porcentaje en peso de cada elemento.

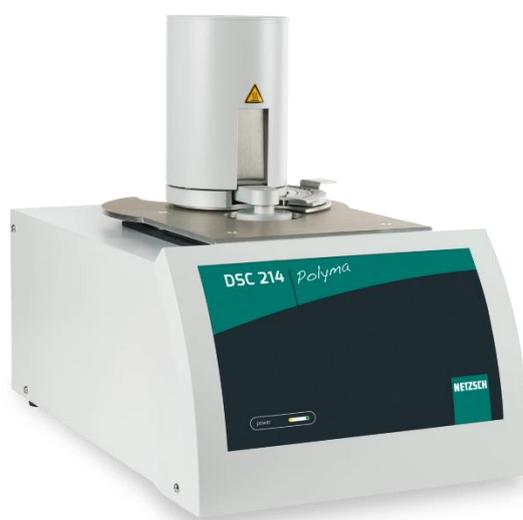
### 6.2. Análisis térmico

El análisis térmico de las partículas se realiza para estudiar cómo cambian las propiedades de estas en función de la temperatura. Se trata de ensayos donde se aplica calor a las muestras y se registra la respuesta física o química que se provoca. En este proyecto se han realizado dos análisis diferentes: una calorimetría diferencial de barrido y un análisis termogravimétrico. Ambos ensayos se realizan en las instalaciones del instituto, ya que se dispone de los equipos necesarios para ello.

### 6.2.1. Calorimetría Diferencial de Barrido

La calorimetría diferencial de barrido es una técnica que permite determinar la cantidad de calor que absorbe o libera una muestra cuando se somete a un calentamiento o enfriamiento a velocidad constante en un determinado intervalo de temperaturas. Esta técnica es de especial interés para conocer la estabilidad térmica de las partículas [48].

El equipo utilizado es el DSC 214 Polyma de la marca Netzsch. Este modelo únicamente alcanza temperaturas de hasta 600 °C, por lo que su utilidad queda reducida a evaluar el inicio de la oxidación térmica de las partículas.



*Ilustración 16. Netzsch DSC 214 Polyma [49]*

El ensayo se programa en el software que incluye la propia máquina y que permite definir las velocidades de calentamiento y enfriamiento, los tiempos de espera y el rango de temperaturas. Se inicia el análisis con un precalentamiento hasta una temperatura de 50 °C a una velocidad de 20 °C/min y se mantiene esa temperatura durante 30 minutos. Tras el precalentamiento, se aumenta la temperatura hasta 600 °C manteniendo la misma velocidad de calentamiento. Cuando se alcanza la temperatura máxima, comienza el enfriamiento hasta alcanzar los 25 °C. Para realizar la prueba, se disponen dos cápsulas metálicas: una de ellas contiene la muestra que se analiza y la otra está vacía y sirve como referencia. Este análisis se ha realizado para una muestra de cada una de las secciones obtenidas.

### 6.2.2. Análisis termogravimétrico

Un análisis termogravimétrico registra la pérdida de masa de una muestra a medida que se incrementa la temperatura hasta unos 1200 °C aproximadamente, de esta forma se obtienen las curvas denominadas TG o termogramas y las curvas de análisis termogravimétrico diferencial (DTG) que se corresponden con la derivada respecto al tiempo de las anteriores [50].

El equipo utilizado para el análisis es el TG 209 F1 Libra de la marca Netzsch, este equipo permite llegar a calentamientos de 1100 °C suficiente para estudiar la oxidación térmica de las partículas.



*Ilustración 17. Netzsch TG 209 F1 Libra [51]*

Los crisoles utilizados en este análisis son de alúmina, ya que es necesario que aguanten temperaturas elevadas. El ensayo se inicia precalentando a una velocidad de 20 °C/min hasta alcanzar 50 °C, una vez alcanzada esta temperatura se mantiene durante 30 minutos para asegurar que se elimina toda el agua presente en la muestra. Una vez eliminada, se continúa el calentamiento hasta alcanzar 1100 °C también a una velocidad de 20 °C/min. Finalmente, se enfría la muestra hasta los 25 °C. Este análisis se ha realizado con cinco muestras diferentes de cada sección granulométrica para determinar la significación estadística de las mediciones de pérdida de masa y masa residual.

## CAPÍTULO 4: RESULTADOS

A continuación, se muestran los resultados obtenidos en los ensayos realizados. El procesado de los datos experimentales se ha realizado con Matlab R2022b. Los resultados se presentan organizados según la fase experimental a la que corresponden y de forma que sea posible comparar entre las tres celdas ensayadas para observar la influencia del estado de carga en las partículas generadas.

### 1. Acondicionamiento eléctrico

Se muestran a continuación los resultados obtenidos durante el acondicionamiento eléctrico. Cada celda se sometió a tres ciclos de carga y descarga y con los datos obtenidos se ha calculado la capacidad nominal, para ello, se ha integrado la corriente de descarga a lo largo del tiempo para cada celda y ciclo realizado.

		<b>Celda nº 1</b>	<b>Celda nº 2</b>	<b>Celda nº 3</b>
<b>Capacidad nominal (Ah)</b>	<b>1<sup>er</sup> ciclo</b>	3.097	3.106	3.096
	<b>2<sup>o</sup> ciclo</b>	3.080	3.092	3.076
	<b>3<sup>er</sup> ciclo</b>	3.094	3.112	3.099
<b>Media (Ah)</b>		3.091	3.103	3.090
<b>Desviación típica (Ah)</b>		9.407E-03	1.026E-02	1.250E-02
<b>Coefficiente de variación (%)</b>		0.304	0.331	0.404

*Tabla 3. Capacidad nominal de las celdas*

El coeficiente de variación de la capacidad nominal de cada celda es considerablemente inferior al 2 % buscado. Los resultados permiten determinar una capacidad nominal media del modelo INR18650 de 3.095 Ah, esto supone un valor ligeramente inferior al indicado por el fabricante (3.2 Ah).

### 2. Fuga térmica

Durante el proceso de fuga térmica se midió la temperatura de las celdas, la temperatura del aire y la presión en el interior del canister. La temperatura de las celdas se registró con tres termopares colocados en contacto con la celda en tres puntos diferentes. Al realizar el análisis de los datos obtenidos se ha observado que los termopares de los extremos ofrecen unas medidas de temperatura muy inferiores a las registradas por el termopar

central que resultan incoherentes con los resultados observados en la literatura [52][53]. En la siguiente tabla se han recogido las temperaturas máximas captadas por los diferentes termopares colocados en cada celda. Las celdas se identifican según su estado de carga.

Estado de carga	Temperatura máxima (°C)			
	Termopar central	Termopar extremo positivo	Termopar extremo negativo	Aire
100 %	703.81	270.23	268.22	493.37
75 %	633.83	279.47	275.34	454.94
50 %	666.14	284.12	273.76	430.43

Tabla 4. Temperaturas máximas medidas por los diferentes termopares

Podemos ver en la tabla cómo la temperatura máxima registrada por los termopares de los extremos es incluso inferior a la temperatura máxima que alcanza el aire en el interior del canister. Estos resultados se deben probablemente a un mal funcionamiento de los termopares de medida y se ha decidido no incluirlos en el trabajo por no ser representativos.

En las siguientes gráficas se muestran los resultados de temperatura del termopar central y del aire y la presión registrada para cada una de las celdas.

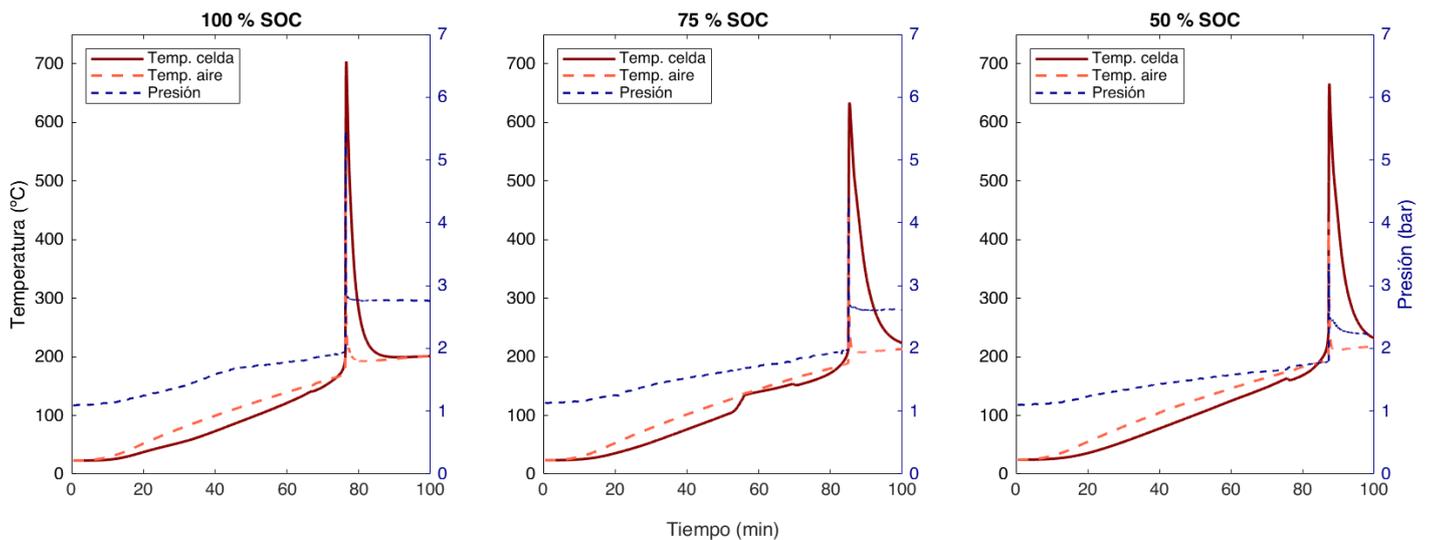


Ilustración 18. Resultados de temperatura y presión para el ensayo de fuga térmica según el estado de carga de las celdas

Como se puede ver en las gráficas, el proceso de fuga térmica se inicia antes y a menor temperatura cuanto mayor es el estado de carga de la batería. Una mayor carga acelera el inicio de las reacciones de descomposición de los materiales de la celda al someter a esta a un aumento de la temperatura. La presión máxima alcanzada en el interior del canister también es mayor a medida que aumenta el SOC, la agresividad del proceso de fuga térmica aumenta con el estado de carga.

La temperatura máxima de la celda durante el proceso presenta un caso atípico para la celda al 50 % de carga, se observa un proceso exotérmico que alcanza temperaturas más elevadas que en la batería cargada al 75 %. Sin embargo, si analizamos la temperatura del aire, podemos ver que esta sí que es menor para la celda al 50 % de carga. Teniendo en cuenta que la evolución de la presión también sigue la misma tendencia, mayor para un mayor estado de carga, se puede entender que el resultado atípico podría deberse a un desplazamiento del termopar durante el ensayo o a una medida errónea del mismo.

### 3. Análisis de las partículas

#### 3.1. Tamaño

La masa de las partículas recogidas se midió previamente a la separación por tamaños. En la siguiente tabla se muestran la masa inicial de cada celda, la masa final tras la fuga térmica y la masa de las partículas recogidas.

	<b>Estado de carga</b>		
	<b>100 %</b>	<b>75 %</b>	<b>50 %</b>
<b>Masa inicial celda (g)</b>	44.77	44.57	44.58
<b>Masa final celda (g)</b>	16.49	27.13	34.06
<b>Masa partículas recogidas (g)</b>	17.15	8.70	1.41

*Tabla 5. Masa inicial, masa final y masa de las partículas recogidas para cada estado de carga*

Podemos ver cómo la masa final de la celda disminuye a medida que aumenta el estado de carga. El proceso de fuga térmica es más agresivo cuanto más cargada se encuentra la batería y, por lo tanto, una mayor cantidad de masa es venteadada al exterior. Esta relación

se observa también en la masa de las partículas recogidas, se obtienen más partículas cuando el estado de carga es mayor.

En los tres ensayos se puede ver que la masa inicial de la celda es considerablemente mayor a la suma de la masa final y la masa de las partículas recogidas. Esta diferencia se explica teniendo en cuenta que no se ha considerado en el cálculo la masa de los gases generados durante la fuga térmica, ya que se encuentra fuera del alcance de este proyecto. Además, a pesar de que se realizó la recogida tratando de recuperar la totalidad de las partículas generadas, se perdieron algunas muestras que quedaron adheridas en el cepillo utilizado y en las paredes del canister.

Tras la recogida las partículas se tamizaron y una vez divididas por secciones se volvieron a pesar. En la siguiente tabla se puede ver un resumen de la distribución de la masa de las partículas en las diferentes secciones. La masa de cada sección se ha expresado como el porcentaje sobre la masa total de partículas recogidas.

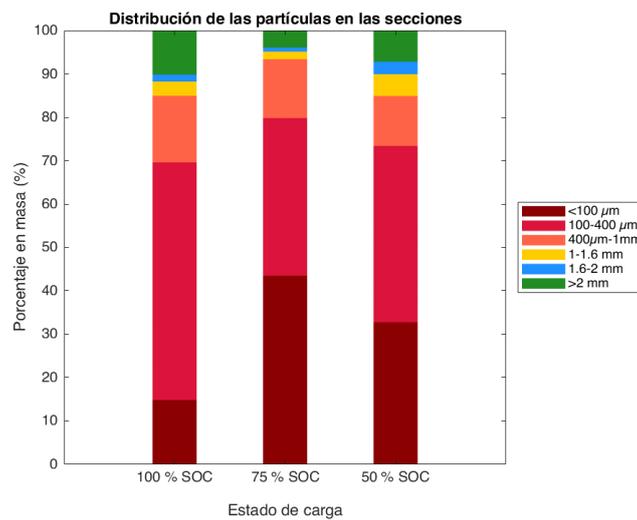
Sección	Estado de carga		
	100 %	75 %	50 %
<100 $\mu\text{m}$	14.81 %	43.49 %	32.76 %
100-400 $\mu\text{m}$	54.78 %	36.29 %	40.63 %
400 $\mu\text{m}$ -1 mm	15.34 %	13.57 %	11.51 %
1-1.6 mm	3.29 %	1.76 %	5.01 %
1.6-2 mm	1.58 %	0.93 %	2.87 %
> 2 mm	10.17 %	3.93 %	7.20 %

*Tabla 6. Distribución de la masa de las partículas en las diferentes secciones para cada estado de carga*

La celda cargada al 100 % es la muestra que menos partículas menores de 100  $\mu\text{m}$  expulsó y, por el contrario, es la muestra con mayor porcentaje de partículas mayores de 2 mm. La celda cargada al 75 % ha sido la que más partículas menores a 100  $\mu\text{m}$  ha expulsado, pero vemos que esta tendencia creciente no se confirma en la celda cargada al 50 %. En los tres estados de carga se observa que la sección con menor cantidad de partículas es la que integra las muestras entre 1.6 y 2 mm, pero el número varía considerablemente entre un estado de carga y otro. En general, los datos obtenidos parecen indicar que no existe

una linealidad clara entre el estado de carga y la distribución del tamaño de las partículas generadas.

En la siguiente gráfica se ha representado de forma visual la distribución de las partículas en las diferentes secciones y se puede observar claramente cómo las partículas menores de 1 mm suponen al menos el 85 % de la masa total en todos los estados de carga.

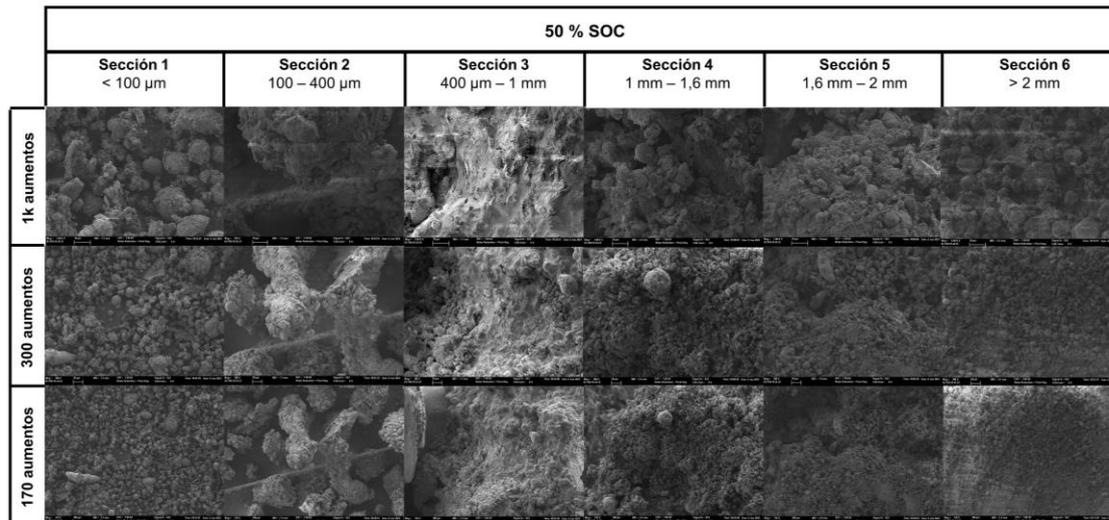
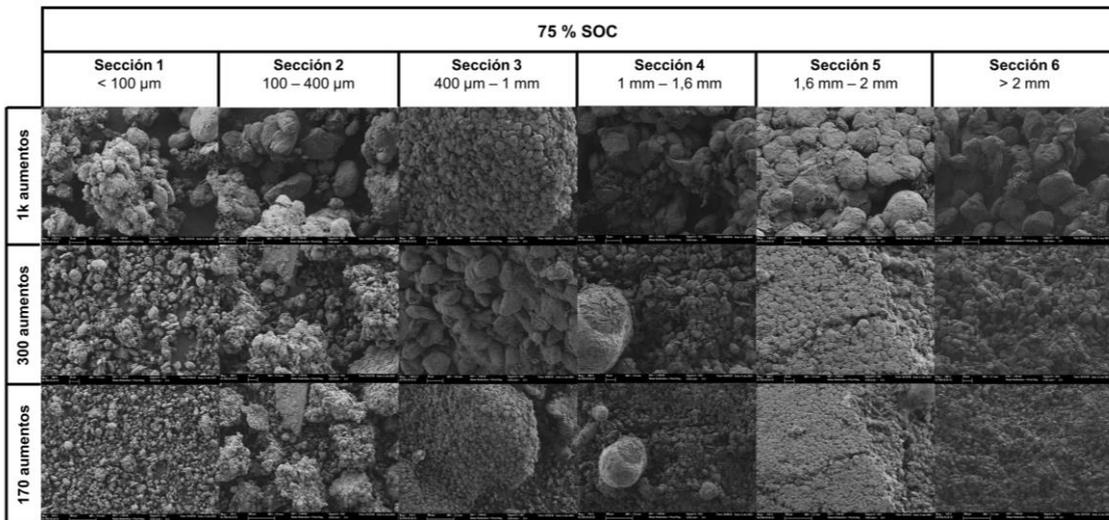
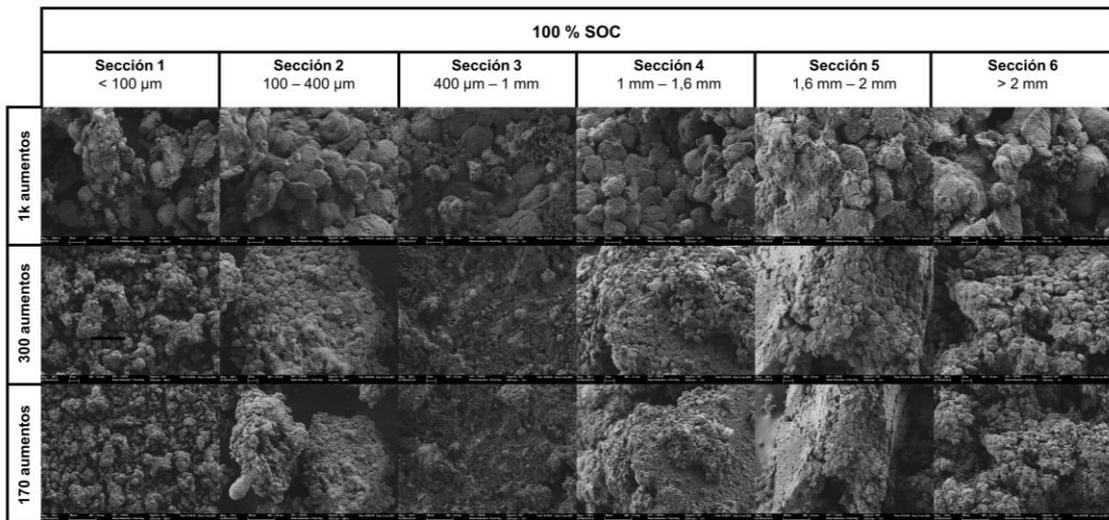


*Ilustración 19. Distribución de las partículas en las diferentes secciones según el estado de carga*

La gran cantidad de partículas pequeñas puede relacionarse con la propia estructura de las celdas cilíndricas donde encontramos capas de cátodo y ánodo que no están bien compactadas. Además, la velocidad de eyección de las partículas, que está directamente influenciada por el estado de carga, puede afectar a su pulverización. Así, un mayor SOC produce una eyección más rápida de las partículas al tener un proceso de fuga térmica más violento, lo que aumenta la conglomeración de partículas y, en consecuencia, el tamaño de estas, como se puede apreciar en las partículas de la muestra al 100 % de SOC.

### 3.2. Morfología

Una vez tamizadas las partículas se tomó una pequeña muestra de cada sección de las celdas ensayadas y se analizó mediante microscopio electrónico. Se tomaron cinco fotografías de cada una de las muestras a tres aumentos diferentes, 1000, 300 y 170. Finalmente, en los resultados únicamente se incluye la foto central de cada muestra a los diferentes aumentos por ser la más representativa. En la siguiente ilustración se muestran las imágenes seleccionadas.

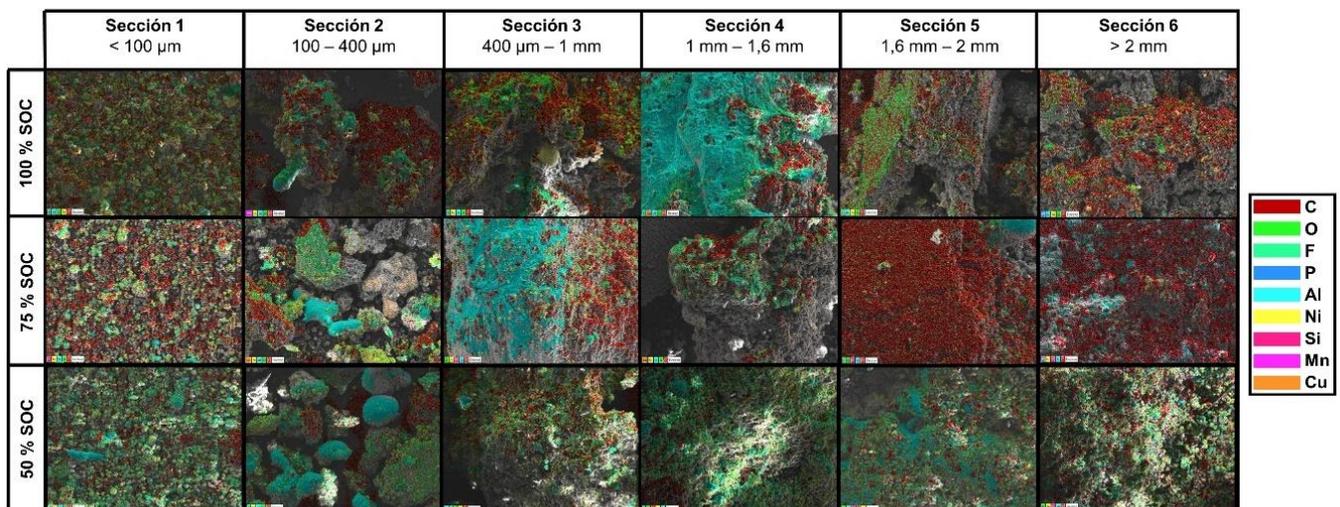


*Ilustración 20. Imágenes de la superficie de las partículas tomadas mediante microscopio electrónico para cada estado de carga y sección a tres aumentos diferentes*

En las imágenes mostradas podemos ver que las partículas están formadas por un conglomerado de partículas más pequeñas independientemente de la sección de tamaño analizada. Este conglomerado otorga a las partículas una estructura porosa y una superficie heterogénea. En la imagen de la sección 2 de la celda al 100 % de carga tomada a 170 aumentos, se puede observar una protuberancia de color más luminoso que se identifica como más pesada que el resto de la superficie. Esta imagen y las correspondientes a las secciones 2 y 3 de la celda al 75 % de SOC y a la sección 2 de la celda al 50 % de SOC, que muestran también protuberancias luminosas, permiten suponer que las partículas están compuestas por núcleos metálicos recubiertos por formaciones esféricas de carbono [54].

### 3.3. Composición

En el mismo microscopio electrónico utilizado para estudiar la morfología de las partículas se tomaron imágenes para obtener información acerca de la composición de la superficie de estas. Analizar la composición de las muestras es de gran utilidad para profundizar en la comprensión de la morfología de las partículas. En la siguiente ilustración se muestran los mapas de colores obtenidos para cada sección y estado de carga.

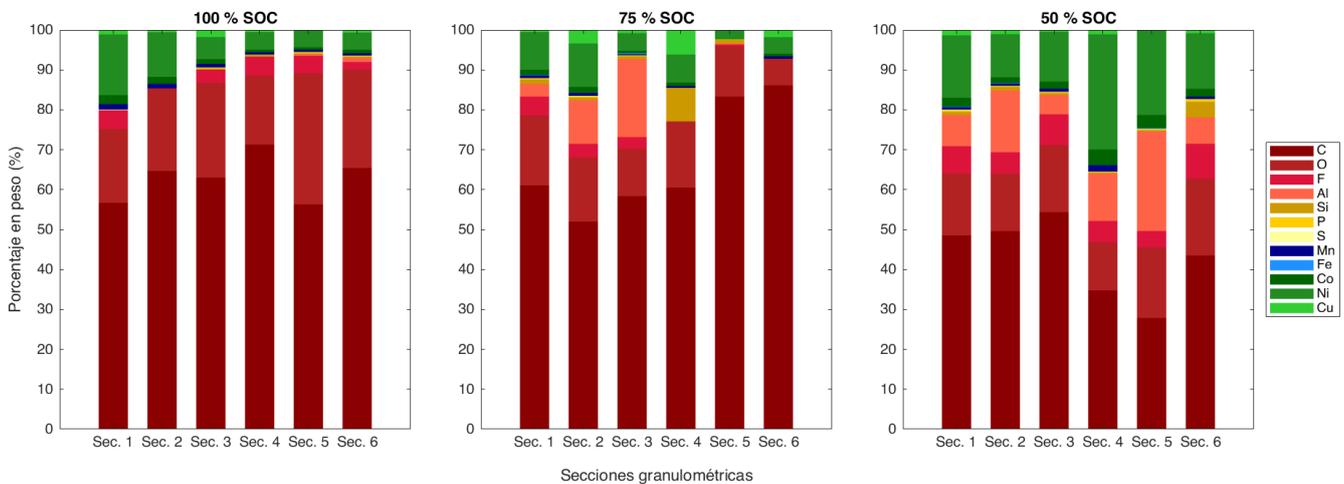


*Ilustración 21. Mapas de colores de la composición química para cada sección y estado de carga*

Las imágenes confirman que las esferas que recubren la superficie de las partículas son de carbono, algo esperado, dado que se trata de partículas procedentes de una combustión. En la imagen correspondiente a la sección 2 de la celda al 100 % de SOC se observa la

protuberancia mencionada antes, se trata de un conglomerado de oxígeno y aluminio también rodeado de carbono. Se identifican también en las imágenes correspondientes a la sección 4 de la celda al 100 % de SOC, las secciones 2 y 3 de la celda al 75 % de carga y la sección 2 de la celda al 50 % de SOC los núcleos metálicos antes comentados que resultan principalmente de aluminio. Además, se identifican otros metales como níquel, manganeso, cobalto y cobre.

En las siguientes gráficas se muestra la composición elemental de la superficie de las partículas. Para cada celda se incluye el porcentaje en peso de los elementos identificados en cada sección analizada.



*Ilustración 22. Composición elemental superficial de las secciones de cada celda ensayada*

El porcentaje de carbono es menor en las muestras correspondientes a la celda al 50 % de carga, esto puede atribuirse a la peor combustión que se dio en esta batería durante el proceso de fuga térmica. En las secciones 5 y 6 de la celda al 75 % de SOC, vemos que el porcentaje de carbono es superior al 80 %, las partículas recogidas de estas secciones eran grandes conglomerados y en los mapas de colores ya podíamos ver que toda su superficie estaba compuesta por este material. En las tres secciones más pequeñas, que suponían más del 80 % de la masa total de partículas recogidas, sí que se observa la tendencia decreciente de la cantidad de carbono a medida que disminuye el estado de carga.

Al reducirse la cantidad de carbono, podemos ver que aumenta el porcentaje de materiales catódicos en las muestras. Es importante señalar que los porcentajes en peso de níquel,

manganeso y cobalto obtenidos son bastante cercanos a las proporciones molares del cátodo NMC811 de las celdas ensayadas, lo que sigue la conservación de elementos [17].

El porcentaje de oxígeno se mantiene constante en las celdas al 75 % y 50 % de carga mientras que es superior en la batería totalmente cargada. Por el contrario, el aluminio apenas aparece en la celda al 100 % de SOC, pero lo encontramos en bastante proporción en la celda a mitad de carga.

### 3.4. Análisis térmico

El proceso de oxidación térmica provoca una pérdida de masa y liberación de energía. En la siguiente imagen se muestran los resultados de la calorimetría diferencial de barrido, donde se ha medido la liberación de energía de las partículas para cada sección y estado de carga. Las partículas correspondientes a la sección 6 no se pudieron analizar, ya que eran demasiado grandes para los recipientes utilizados por el equipo.

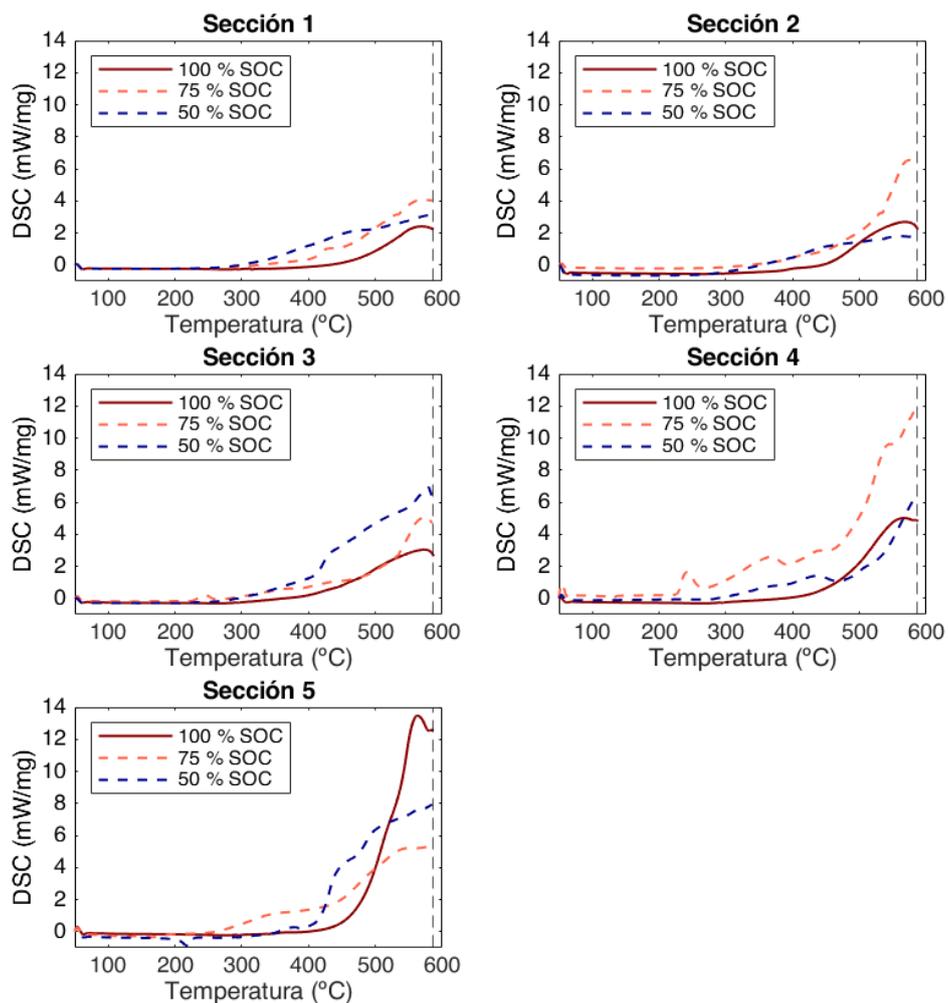


Ilustración 23. Resultados de la calorimetría diferencial de barrido según la sección y el SOC

La calorimetría diferencial de barrido únicamente pudo realizarse hasta los 600 °C, dadas las limitaciones del equipo, pero fue suficiente para observar el inicio de la oxidación térmica de las partículas. En las gráficas se puede ver que sobre los 250 °C comienza la liberación de energía en las partículas de las secciones 1 y 2, mientras que en el resto de las secciones se inicia sobre los 200 °C, aproximadamente. A medida que aumenta la temperatura, se incrementa la liberación de energía hasta producirse un pico alrededor de los 600 °C, lo que puede tomarse como el inicio de la oxidación térmica.

Si nos fijamos en los resultados de la celda cargada al 100 %, podemos ver que la cantidad máxima de energía liberada por miligramo aumenta considerablemente en las dos secciones más grandes y que tiene su máximo en la sección 5. Por el contrario, en las baterías al 50 % y 75 % de carga, vemos que, aunque también aumente la energía liberada con la sección estudiada, el pico se produce en la sección 4. Al tratarse de muestras muy heterogéneas, era esperable que los resultados fuesen dispares y no mostrasen una tendencia clara al variar el estado de carga.

El análisis termogravimétrico sí que pudo realizarse hasta una temperatura de 1100 °C y permite observar el proceso completo de pérdida de masa de las partículas. Para este análisis, se tomaron cinco muestras de cada sección y batería. Al igual que en el análisis DSC, las partículas de la sección 6 no pudieron analizarse por ser demasiado grandes. Además, en la batería al 50 % de SOC, no había suficientes partículas para tomar cinco muestras de las secciones 4 y 5 y únicamente se analizaron dos muestras de la sección 4 y una única muestra de la sección 5.

En la siguiente ilustración se muestran los resultados obtenidos. Se ha representado con una línea continua la media de la masa residual de las cinco muestras tomadas y se ha incluido un área sombreada para mostrar la desviación estándar. También se incluyen las curvas DTG representadas con un trazo discontinuo, al igual que en el caso anterior el trazo principal se corresponde con la media de los datos y el área sombreada con la desviación estándar. En el caso de la sección 5 de la celda al 50 % de carga se representan los datos de la única muestra analizada sin incluir la desviación estándar.

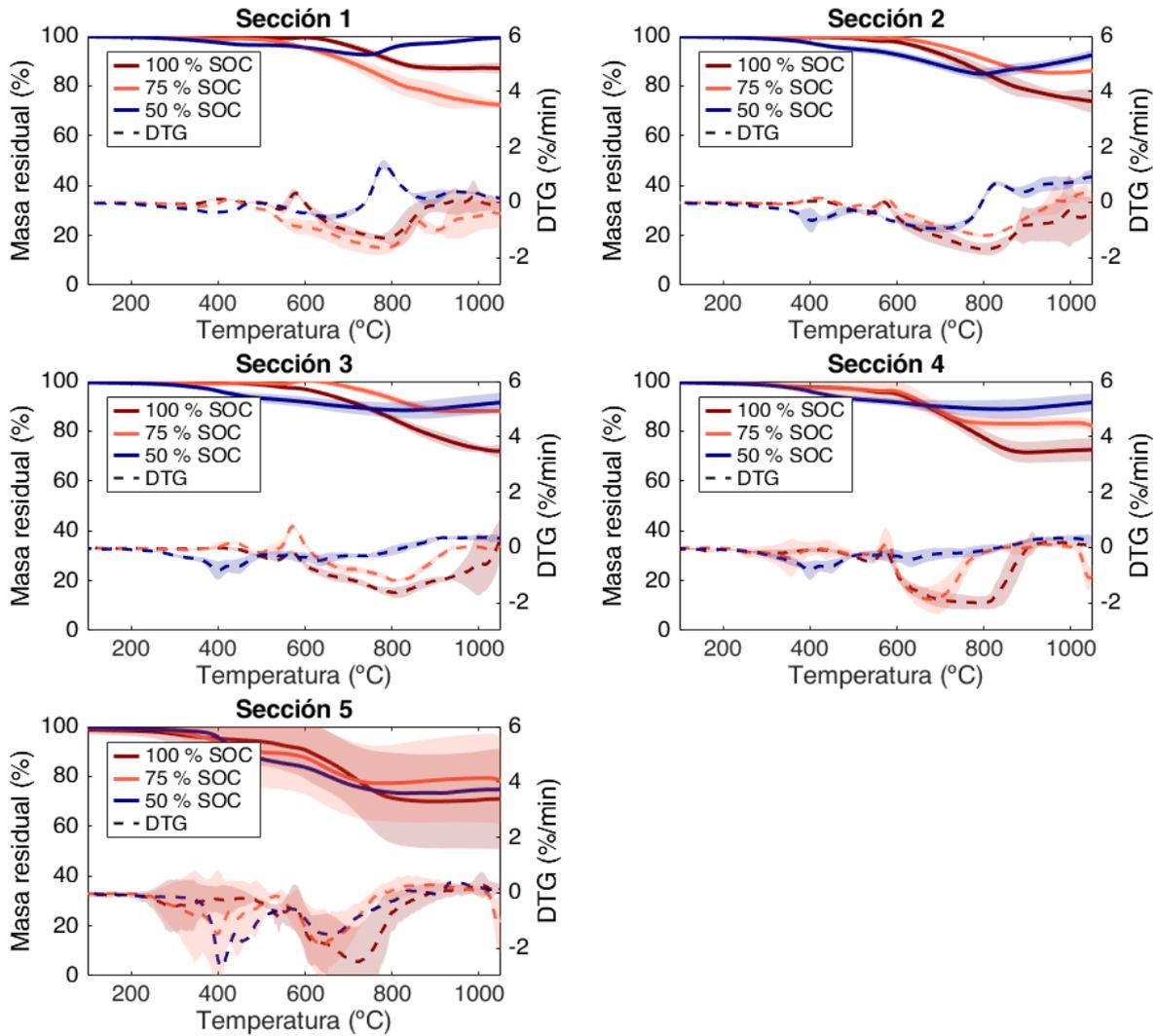


Ilustración 24. Resultados del análisis termogravimétrico según la sección y el SOC

Se puede ver en las gráficas que las partículas expulsadas por la batería cargada al 100 % perdieron más masa que el resto de las partículas emitidas, la única excepción la encontramos en la sección 1 donde son las partículas de la celda al 75 % de SOC las que mayor masa perdieron. De estos resultados se puede deducir que el estado de carga afecta directamente a la oxidación de las partículas. Los resultados para la celda al 50 % de carga confirman esta relación, ya que las partículas de esta celda son las que menor masa perdieron en todas las secciones salvo la quinta.

La explicación de que las partículas emitidas por celdas con mayor estado de carga tiendan a perder un mayor porcentaje de masa durante el análisis termogravimétrico podría atribuirse a la mayor concentración de carbono en su composición. Como se ha

explicado anteriormente, la disminución del estado de carga produce una peor combustión durante la fuga térmica y se reduce la cantidad de carbono en las partículas generadas.

A continuación, se muestra en la tabla un resumen de los valores de masa residual de cada muestra para cada estado de carga y sección. Se incluye la media de los datos, la desviación estándar y el coeficiente de variación para cada sección.

	<b>100 % SOC</b>				
<b>Sección</b>	<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>4</b>	<b>5</b>
<b>Porcentaje de masa residual (%)</b>	86.2	81.1	73.1	67.0	86.6
	86.8	73.7	76.4	71.0	80.2
	83.6	70.1	70.7	71.4	62.9
	90.3	68.9	78.0	74.0	38.8
	87.1	74.7	73.0	79.9	87.5
<b>Media (%)</b>	86.8	73.7	74.2	72.7	71.2
<b>Desviación estándar (%)</b>	2.3	4.7	2.9	4.7	20.6
<b>Coeficiente de variación (%)</b>	2.7	6.4	3.9	6.5	28.9
	<b>75 % SOC</b>				
<b>Sección</b>	<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>4</b>	<b>5</b>
<b>Porcentaje de masa residual (%)</b>	72.8	86.7	86.2	81.1	57.1
	70.6	86.3	89.7	82.9	89.0
	73.3	85.6	86.5	79.1	59.9
	71.4	86.6	89.4	84.7	88.4
	70.1	86.1	88.9	79.8	94.3
<b>Media (%)</b>	71.6	86.3	88.1	81.5	77.7
<b>Desviación estándar (%)</b>	1.3	0.4	1.6	2.2	17.7
<b>Coeficiente de variación (%)</b>	1.8	0.4	1.8	2.8	22.7

	<b>50 % SOC</b>				
<b>Sección</b>	<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>4</b>	<b>5</b>
<b>Porcentaje de masa residual (%)</b>	99.5	90.9	92.5	95.9	75.2
	99.4	95.7	97.9	93.8	N.M.
	99.5	93.4	86.8	N.M.	N.M.
	99.1	99.1	93.1	N.M.	N.M.
	99.4	96.6	91.5	N.M.	N.M.
<b>Media (%)</b>	99.4	95.7	92.4	94.8	-
<b>Desviación estándar (%)</b>	0.1	3.6	3.9	1.4	-
<b>Coefficiente de variación (%)</b>	0.1	3.8	4.2	1.5	-

*Tabla 7. Resumen de los resultados obtenidos en el análisis termogravimétrico.*

*N.M. - No hay suficientes muestras para el ensayo*

El coeficiente de variación del porcentaje de masa residual alcanza valores superiores al 25 % para algunos de los datos analizados, se obtiene un 28.9 % para los datos de la sección 5 de la celda al 100 % de SOC y un 22.7 % para la misma sección de la batería al 75 % de carga. El tamaño de las partículas de esta sección dificultó la preparación de las muestras, ya que no se podían incluir muchas partículas en cada crisol para el análisis TGA. Las partículas de mayor tamaño se corresponden con conglomerados de partículas y la composición heterogénea de estas induce a resultados dispares en los diferentes análisis.

Para el resto de las secciones, el coeficiente de variación obtenido no supera el 7 %, por lo que la dispersión en los resultados no es elevada y la media puede considerarse representativa. Los resultados más homogéneos se obtienen para la sección 2 de la celda al 75 % de SOC y la sección 1 de la celda al 50 % de carga.

## CAPÍTULO 5: CONCLUSIONES

En este proyecto se han analizado las partículas generadas durante el proceso de fuga térmica en baterías cilíndricas de ion litio con cátodo NMC811 y se ha investigado la influencia del estado de carga en las características de estas. Se han tenido en cuenta el tamaño, la morfología y la composición de las partículas y se ha estudiado su oxidación térmica. Los resultados obtenidos permiten establecer relaciones entre el estado de carga y las características de las partículas expulsadas y profundizar en el conocimiento del fenómeno de fuga térmica. A continuación, se presentan las conclusiones extraídas del trabajo realizado.

- El proceso de fuga térmica es más violento y temprano cuanto mayor es el estado de carga. En celdas al 100 % de carga se alcanzan temperaturas casi 50 °C mayores que en celdas al 75 % o 50 % de SOC.
- La cantidad de partículas expulsadas durante la fuga térmica decrece a medida que lo hace el estado de carga. Una batería cargada al 100 % puede emitir casi el doble de partículas que una batería al 75 % de SOC y cerca de diez veces más que una batería a mitad carga.
- El porcentaje de partículas menores a 100  $\mu\text{m}$  parece decrecer a medida que aumenta el estado de carga, a su vez se expulsa una mayor cantidad de partículas grandes (a partir de 1.6 mm) cuando el estado de carga de la celda es mayor.
- Para el resto de las secciones analizadas, no se encuentra una relación lineal entre la distribución de los tamaños y el estado de carga. Sin embargo, la cantidad de partículas menores a 1 mm representa para todos los estados de carga alrededor del 80 % del total de partículas recogidas.
- Respecto a la morfología de las partículas se ha observado para todas las secciones estudiadas que a nivel microscópico las partículas están formadas por conglomeraciones de partículas más pequeñas con núcleos metálicos rodeados de carbono. Esto les otorga una estructura porosa y una superficie heterogénea.
- La composición de las partículas está influenciada directamente por el SOC, cuando el estado de carga de las baterías es mayor, encontramos en la superficie de las partículas una mayor presencia de carbono. Por el contrario, los materiales del cátodo y metales como el aluminio aumentan su concentración a medida que disminuye el estado de carga.

- La oxidación térmica de las partículas también está influenciada por el estado de carga. Las partículas que provienen de la celda totalmente cargada son en general más oxidables que las expulsadas por celdas menos cargadas. Esto se explica por la menor presencia de carbono en las partículas de las celdas en menores estados de carga.

En conclusión, el estado de carga de las celdas influye directamente en las características de las partículas generadas durante la fuga térmica. La composición de las partículas y su reducido tamaño las identifican como un riesgo para la salud y, por lo tanto, un problema en la seguridad de las baterías. Los resultados presentados en este trabajo pueden resultar de ayuda a la hora de desarrollar baterías más seguras.

Las limitaciones existentes en el proyecto realizado ofrecen la posibilidad de continuar con el estudio de este asunto. Para futuros trabajos sería interesante aumentar el número de muestras de cada estado de carga, ya que de esta forma se podría estudiar la variabilidad de los resultados y su significación estadística. Por otro lado, investigar la relación entre las características de las partículas y el cátodo de la batería permitiría elegir la química de la batería que mejores resultados ofreciese.

## Referencias

- [1] Barnett, Brian, David Ofer, Suresh Sriramulu y Richard Stringfellow. 2013. "Lithium-Ion Batteries, Safety". In: Brodd, R. (eds) *Batteries for Sustainability*. 285-318. Springer, New York, NY.  
[https://doi.org/10.1007/978-1-4614-5791-6\\_9](https://doi.org/10.1007/978-1-4614-5791-6_9). Consultado en web el 03/11/2023.
- [2] Dell, Ronald y David Anthony James Rand. 2001. *Understanding Batteries*. RSC Paperworks.
- [3] Naciones Unidas. *Transformar nuestro mundo: la Agenda 2030 para el Desarrollo Sostenible*. Resolución aprobada por la Asamblea General el 25 de septiembre de 2015.  
<http://undocs.org/es/A/RES/70/1>. Consultado en web el 10/06/2024.
- [4] Naciones Unidas. 2022. "Objetivos de Desarrollo Sostenible".  
<https://www.un.org/sustainabledevelopment/es/sustainable-development-goals/>. Consultado en web el 10/06/2024.
- [5] European Council. *5 facts about the EU's goal of climate neutrality*. Council of the European Union.  
<https://www.consilium.europa.eu/en/5-facts-eu-climate-neutrality/>. Consultado en web el 07/06/2023.
- [6] Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico. *Plan Nacional Integrado de Energía y Clima (PNIEC) 2021-2030*. Gobierno de España.  
<https://www.miteco.gob.es/es/prensa/pniec.html>. Consultado en web el 19/10/2023.
- [7] Parlamento Europeo. Emisiones de CO2 de los coches: hechos y cifras (infografía).  
<https://www.europarl.europa.eu/news/es/headlines/society/20190313STO31218/emisiones-de-co2-de-los-coches-hechos-y-cifras-infografia>. Consultado en web el 21/10/2023.
- [8] Ministerio de Transportes, Movilidad y Agenda Urbana. *Infografía sobre emisiones CO2 de los coches*. Gobierno de España.  
<https://esmovilidad.mitma.es/noticias/infografia-sobre-emisiones-co2-de-los-coches>. Consultado en web el 21/10/2023.

- [9] Comisión Europea. 2020. “Estrategia de movilidad sostenible e inteligente: encauzar el transporte europeo de cara al futuro”. *Comunicación de la comisión al Parlamento Europeo, al consejo, al comité económico y social europeo y al comité de las regiones*.  
<https://eur-lex.europa.eu/legal-content/ES/TXT/HTML/?uri=CELEX:52020DC0789&from=EN>. Consultado en web el 21/10/2023.
- [10] European Environment Agency. Average carbon dioxide emissions from new cars registered in Europe decreased by 12 % in 2020. European Union.  
<https://www.eea.europa.eu/highlights/average-carbon-dioxide-emissions-from>. Consultado en web el 21/10/2023.
- [11] Parlamento Europeo. 2022. Nuevas medidas europeas para que las baterías sean más sostenibles y éticas.  
<https://www.europarl.europa.eu/news/es/headlines/priorities/economia-circular/20220228STO24218/nuevas-medidas-europeas-para-que-las-baterias-sean-mas-sostenibles-y-eticas>. Consultado en web el 23/10/2023.
- [12] Manthiram, Arumugam. 2011. “Materials Challenges and Opportunities of Lithium Ion Batteries”. *The Journal of Physical Chemistry Letters*. Volumen 3, páginas 176-184.  
<https://pubs.acs.org/doi/full/10.1021/jz1015422>. Consultado en web el 23/10/2023.
- [13] García, Antonio, Javier Monsalve-Serrano, Rafael Lago Sari y Santiago Martínez-Boggio. 2022. “Influence of environmental conditions in the battery thermal runaway process of different chemistries: Thermodynamic and optical assessment”. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 184. Article 122381.  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0017931021014800>. Consultado en web el 31/05/2023.
- [14] García, Antonio, Javier Monsalve-Serrano, David Villalta y María Gabriela Guzmán. 2023. “Evaluation of different injectors-swirl configurations on combustion and emissions characteristics in a medium-duty compression ignition diesel engine”. *International Journal of Engine Research*. Volumen 24, páginas 1999-2012.

<https://journals.sagepub.com/doi/full/10.1177/14680874221106988>.

Consultado en web el 31/05/2023.

- [15] Premnath, Vinay et al. 2022. “Detailed characterization of particle emissions from battery fires”. *Aerosol Science and Technology*. Volumen 56, páginas 337-354.

<https://doi.org/10.1080/02786826.2021.2018399>.

Consultado en web el 31/05/2023.

- [16] Wang, Yang et al. 2021. “Thermal oxidation characteristics for smoke particles from an abused prismatic Li(Ni<sub>0.6</sub>Co<sub>0.2</sub>Mn<sub>0.2</sub>)O<sub>2</sub> battery”. *Journal of Energy Storage* 39. Artículo 102639.

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352152X21003807>.

Consultado en web el 31/05/2023.

- [17] Wang, Huaibin et al. 2023. “Detailed characterization of particle emissions due to thermal failure of batteries with different cathodes”. *Journal of Hazardous Materials*. Artículo 131646.

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304389423009299>.

Consultado en web el 01/06/2023.

- [18] Yang, Yajie et al. 2021. “Characterization of Thermal-Runaway Particles from Lithium Nickel Manganese Cobalt Oxide Batteries and Their Biototoxicity Analysis”. *ACS Applied Energy Materials*. Volumen 4, páginas 10713-10720.

<https://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/acsaem.1c01711>.

Consultado en web el 01/06/2023.

- [19] Quintero, Vanessa. 2021. “Baterías De Ion Litio: Características y Aplicaciones”. *Revista de I+D Tecnológico*. Volumen 17, páginas 14-22.

<https://doi.org/10.33412/idt.v17.1.2907>. Consultado en web el 27/10/2023.

- [20] Chen, Yuqing, et al. 2021. “A review of lithium-ion battery safety concerns: The issues, strategies, and testing standards”. *Journal of Energy Chemistry*. Volumen 59, páginas 83-99.

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2095495620307075#section-cited-by>. Consultado en web el 06/11/2023.

- [21] Meier, Richard J. y Patrick M. Kennedy. 2016. *Lithium ion batteries more dangerous or just more common? And a Simple Analysis to Narrow the Possible Failure Modes*.  
<http://www.kennedy-fire.com/pdf/lithium-ion-batteries-2016.pdf>. Consultado en web el 25/11/2023.
- [22] Fire Engineering. 2023. "Lithium-Ion Batteries: The 18650"  
<https://www.fireengineering.com/firefighting/lithium-ion-batteries-the-18650/>. Consultado en web el 11/12/2023.
- [23] Espino, Gustavo. 2019. "Baterías recargables de ion litio: El Nobel en Química del 2019 para un modelo energético más sostenible". *UBUScientia*.  
<http://ubuscientia.blogspot.com/2019/10/baterias-recargables-de-ion-litio-el.html>. Consultado en web el 11/12/2023.
- [24] Dunn, Bruce, Haresh Kamath y Jean-Marie Tarascon. 2011. "Electrical Energy Storage for the Grid: A Battery of Choices". *Science*. Volumen 334, páginas 928-935.  
<https://www.science.org/doi/epdf/10.1126/science.1212741?src=getftr>. Consultado en web el 14/12/2023.
- [25] García Bello, Débora. 2020. "Así funcionan las baterías de litio". *Cuaderno de Cultura Científica*.  
<https://culturacientifica.com/2020/02/20/asi-funcionan-las-baterias-de-litio/>. Consultado en web el 14/12/2023.
- [26] Miao, Yu, Patrick Hynan, Annette von Jouanne y Alexandre Yokochi. 2019. "Current Li-Ion Battery Technologies in Electric Vehicles and Opportunities for Advancements". *Energies*. Volumen 12.  
<https://www.mdpi.com/1996-1073/12/6/1074>. Consultado en web el 22/03/2024.
- [27] Nitta, Naoki, Feixiang Wu, Jung Tae Lee y Gleb Yushin. 2015. "Li-ion battery materials: present and future". *Materials Today*. Volumen 18, páginas 252-264.  
<https://doi.org/10.1016/j.mattod.2014.10.040>. Consultado en web el 22/03/2024.

- [28] Manthiram, Arumugam. 2011. "Materials Challenges and Opportunities of Lithium Ion Batteries". *The Journal of Physical Chemistry Letters*. Volumen 2, páginas 176-184.  
<https://pubs.acs.org/doi/epdf/10.1021/jz1015422>.  
Consultado en web el 23/03/2024.
- [29] Rojas, Oscar E. y Muhammad A. Khan. 2022. "A review on electrical and mechanical performance parameters in lithium-ion battery packs". *Journal of Cleaner Production*. Volumen 378.  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0959652622039531#bib18>.  
Consultado en web el 24/02/2024.
- [30] Chang, Wen-Yeau. 2013. "The State of Charge Estimating Methods for Battery: A Review". *International Scholarly Research Notices*. Volumen 2013.  
<https://www.hindawi.com/journals/isrn/2013/953792/>.  
Consultado en web el 23/02/2024.
- [31] Kong Soon, Ng, Chin-Sien Moo, Yi-Ping Chen y Yao-Ching Hsieh. 2009. "Enhanced coulomb counting method for estimating state-of-charge and state-of-health of lithium-ion batteries". *Applied Energy*. Volumen 86, páginas 1506-1511.  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0306261908003061>.  
Consultado en web el 07/03/2024.
- [32] Keil, Peter y Andreas Jossen. 2016. "Charging protocols for lithium-ion batteries and their impact on cycle life - An experimental study with different 18650 high-power cells". *Journal of Energy Storage*. Volumen 6. Páginas 125-141.  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352152X16300147#section-cited-by>. Consultado en web el 09/04/2024.
- [33] Sauer, Dirk Uwe. 2009. "BATTERIES: Charge-Discharge Curves". *Encyclopedia of Electrochemical Power Sources, Elsevier*. Páginas 443-451.  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780444527455000526>.  
Consultado en web el 11/04/2024.
- [34] TDK-Lambda Americas Blog. 2016. "Constant Voltage, Constant Current Battery Charging".

<https://www.us.lambda.tdk.com/resources/blogs/20160526.html>. Consultado en web el 11/04/2024.

- [35] MIT Electric Vehicle Team. 2008. *A Guide to Understanding Battery Specifications*.  
[https://web.mit.edu/evt/summary\\_battery\\_specifications.pdf](https://web.mit.edu/evt/summary_battery_specifications.pdf). Consultado en web el 11/04/2024.
- [36] Feng, Xuning et al. 2018. “Thermal runaway mechanism of lithium ion battery for electric vehicles: A review”. *Energy Storage Materials*. Volumen 10, páginas 246-267.  
<https://doi.org/10.1016/j.ensm.2017.05.013>. Consultado en web el 15/03/2024.
- [37] Duh, Yih-Shing et al. 2021. “Characterization on thermal runaway of commercial 18650 lithium-ion batteries used in electric vehicles: A review”. *Journal of Energy Storage*. Volumen 41.  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352152X21006095?via%3Dihub>. Consultado en web el 15/03/2024.
- [38] Premnath, Vinay et al. 2022. “Detailed characterization of particle emissions from battery fires”. *Aerosol Science and Technology*. Volumen 56, páginas 337-354.  
<https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/02786826.2021.2018399>. Consultado en web el 15/03/2024.
- [39] Zhang, Qingsong et al. 2022. “In situ Raman investigation on gas components and explosion risk of thermal runaway emission from lithium-ion battery”. *Journal of Energy Storage*. Volumen 56, parte A.  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352152X2201893X>. Consultado en web el 10/06/2024.
- [40] Ministerio para la transición ecológica y el reto demográfico. *Calidad y evaluación ambiental*. Partículas.  
<https://www.miteco.gob.es/es/calidad-y-evaluacion-ambiental/temas/atmosfera-y-calidad-del-aire/calidad-del-aire/salud/particulas.html#:~:text=Las%20%E2%80%9Cpart%C3%ADculas%E2>

[%80%9D%20\(PM\),origen%20tanto%20natural%20como%20antropog%C3%A9nico](#). Consultado en web el 25/03/2024.

- [41] Zhang, Yajun, Hewu Wang, Weifeng Li y Cheng Li. 2019. “Quantitative identification of emissions from abused prismatic Ni-rich lithium-ion batteries”. *eTransportation*. Volumen 2.  
[https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2590116819300311?casa\\_token=\\_5HW2JiMqIYAAAA:YuUeO64HPYAVs1zimnghbPCdvswnhDQtP0Ic-UJAgH6O0y267p7EywYBW7gjml6wRf9NsZN\\_qvA](https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2590116819300311?casa_token=_5HW2JiMqIYAAAA:YuUeO64HPYAVs1zimnghbPCdvswnhDQtP0Ic-UJAgH6O0y267p7EywYBW7gjml6wRf9NsZN_qvA). Consultado en web el 25/03/2024.
- [42] Yuqin, Chang, Li Hong, Wu Lie y Lu Tianhong. 1997. “Irreversible capacity loss of graphite electrode in lithium-ion batteries”. *Journal of Power Sources*. Volumen 67, páginas 187-190.  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378775396025499>. Consultado en web el 17/12/2023.
- [43] Greensparks Technology. LG INR18650 MH1.  
<https://greensparksstech.com.au/products/lg-18650-mh1>. Consultado en web el 03/06/2024.
- [44] Arbin Instruments. Product Catalog.  
[https://arbin.com/iv\\_products/150/](https://arbin.com/iv_products/150/). Consultado en web el 03/06/2024.
- [45] Zhang, Yajun et al. 2019. “Size distribution and elemental composition of vent particles from abused prismatic Ni-rich automotive lithium-ion batteries”. *Journal of Energy Storage*. Volumen 26.  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352152X19307820?via=ihub>. Consultado en web el 14/05/2024.
- [46] Servicio de Microscopía Electrónica. 2014. *Microscopía electrónica de barrido de emisión de campo*. Universitat Politècnica de València.  
<https://www.upv.es/entidades/SME/info/859071normalc.html#:~:text=El%20microscopio%20electr%C3%B3nico%20de%20barrido,rango%20de%20energ%C3%ADa%20mucho%20mayor>. Consultado en web el 14/05/2024.

- [47] ZEISS. ZEISS Microscopy ULTRA. Flickr.  
<https://www.flickr.com/photos/zeissmicro/6908561771>. Consultado en web el 03/06/2024.
- [48] Suriñach Cornet, Santiago et al. 1992. “La calorimetría diferencial de barrido y su aplicación a la Ciencia de Materiales”. *Boletín de la Sociedad Española de Cerámica y Vidrio*. Volumen 31 (1), páginas 11-17.  
<https://diposit.ub.edu/dspace/bitstream/2445/65456/1/098218.pdf>. Consultado en web el 16/05/2024.
- [49] Netzsch. DSC 214 Polyma.  
<https://analyzing-testing.netzsch.com/es/productos/calorimetria-diferencial-de-barrido/dsc-214-polyma>. Consultado en web el 03/06/2024.
- [50] Manals Cutiño, Enma, Margarita Penedo Medina y Giselle Giralt Ortega. 2011. “Análisis termogravimétrico y térmico diferencial de diferentes biomásas vegetales”. *Tecnología Química*. Volumen 31, páginas 180-190.  
[http://scielo.sld.cu/scielo.php?pid=s2224-61852011000200005&script=sci\\_arttext](http://scielo.sld.cu/scielo.php?pid=s2224-61852011000200005&script=sci_arttext)  
Consultado en web el 16/05/2024.
- [51] Netzsch. TG 209 F1 Libra.  
<https://analyzing-testing.netzsch.com/es/productos/termogravimetria-tga-tg/tg-209-f1-libra>. Consultado en web el 03/06/2024.
- [52] Yuan, Liming et al. 2020. "Experimental study on thermal runaway and vented gases of lithium-ion cells". *Process Safety and Environmental Protection*. Volumen 144, páginas 186-192.  
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0957582020316360?via%3Dihub>. Consultado en web el 28/05/2024.
- [53] Golubkov, Andrey W. et al. 2015. “Thermal runaway of commercial 18650 Li-ion batteries with LFP and NCA cathodes – impact of state of charge and overcharge”. *RSC Advances*. Volumen 5, páginas 57171-57186.  
<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2015/ra/c5ra05897j>. Consultado en web el 28/05/2024.

- [54] Inagaki, Michi et al. 1999. "Preparation of carbon-coated transition metal particles from mixtures of metal oxide and polyvinylchloride". *Carbon*. Volumen 37. <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0008622398002000>. Consultado en web el 03/06/2024.

## **ANEXO 1: CÓDIGOS DE MATLAB**

## 1. Introducción

Los resultados expuestos en el presente trabajo han sido elaborados utilizando el programa Matlab R2022b. En este anexo se presentan todos los códigos utilizados para el análisis y la representación de los datos experimentales. El título que acompaña a cada código se corresponde con el apartado de resultados para el que fue elaborado.

## Acondicionamiento eléctrico

```
cd(carpetas_archivo);

%% Identificar el archivo
unos = ones(size(datos,1), 1);
datos = addvars(datos, unos, 'After',
size(datos, 2),
'NewVariableNames', 'Archivo');
archivo_actual=1;

for i=2:size(datos,1)
    if datos.DataPoint(i) <
datos.DataPoint(i-1)
        archivo_actual = archivo_actual + 1;
    end
    datos.Archivo(i) = archivo_actual;
end

%% Filtrado de datos
% Columnas que me interesan y
cycleIndex=5
vars=[4;5;7;8;21];
data =
datos(find(datos.StepIndex==5),vars);

data_mat=table2array(data);

for k=1:length(archivos)
    for j=1:num_ciclos
        r=1;
        for i=1:length(data_mat)
            if data_mat(i,5)==k &&
data_mat(i,2)==j
                current(r)=abs(data_mat(i,3));
                time(r)=data_mat(i,1);

                r=r+1;
            end
        end
    end

capacity(k,j)=trapz(time,current)/3600;
clear current
clear time
end
end
```

## Fuga térmica

```
clc; clear all, close all;

%%
% Obtener la ruta del archivo MATLAB
actual
ruta_archivo = fullfile('fullpath');
[carpetas_archivo, ~, ~] =
fileparts(ruta_archivo);

%% Carga de los archivos
% Abrir cuadro de diálogo para
seleccionar la carpeta
carpetas = uigetdir('Seleccione una
carpetas');
if carpetas == 0
```

```
disp('No se ha seleccionado ninguna
carpetas. ');
return;
end

% Cambiar carpetas seleccionada a
carpetas de trabajo
cd(carpetas);

% Obtener la lista de archivos en la
carpetas
archivos = dir(fullfile(carpetas,
'*.csv'));

datos = readtable(archivos(1).name);

for i = 2:1:length(archivos)

datos=vertcat(datos,readtable(archivos(
i).name));
end

% Cambiar la carpetas de trabajo a la
carpetas del archivo MATLAB (para que me
deje volver a seleccionar otra carpetas
al darle a run de
% nuevo)
cd(carpetas_archivo);

%% Identificar el archivo
unos = ones(size(datos,1), 1);
datos = addvars(datos, unos, 'After',
size(datos, 2), 'NewVariableNames',
'Archivo');
archivo_actual=1;

for i=2:size(datos,1)
    if datos.time(i) < datos.time(i-1)
        archivo_actual = archivo_actual + 1;
    end
    datos.Archivo(i) = archivo_actual;
end

%% Filtrado de datos
% Columnas que me interesan
vars=[1;2;4;10;16];
data = datos(:,vars);

data_mat=table2array(data);
data_final=ones(length(data_mat),
size(data_mat,2));

% Cambio de unidades
for i=1:1:length(data_mat)
    data_final(i,1)=data_mat(i,1)-273.15;
    data_final(i,2)=data_mat(i,2)-273.15;
    data_final(i,3)=data_mat(i,3)/10^5;
    data_final(i,4)=data_mat(i,4);
    data_final(i,5)=data_mat(i,5);

end

% Identificadores de archivos
file_ids = unique(data_final(:,5));

%%Colores
```

```

% Definir colores pastel (RGB)
color1 = [139, 0, 0] / 255; % Dark red
color2 = [255, 99, 71] / 255; % Red
color3 = [0, 0, 139] / 255; % Dark
blue

figure;

% Iterar sobre cada archivo
for i = 1:size(file_ids,1)
    % Filtrar los datos por identificador
    de archivo
    file_data = data_final(data_mat(:,5)
== file_ids(i), :);

    % Crear un subplot para cada archivo
    subplot(1, 3, i);
    yyaxis left;
    h1 = plot(file_data(:,4),
file_data(:,1), 'Color', color1,
LineWidth=1.5); hold on;
    h2 = plot(file_data(:,4),
file_data(:,2), 'Color', color2,
LineStyle='--', LineWidth=1.5);

    ylim([0,750]);
    set(gca, 'YColor', 'black');

    yyaxis right;
    h3 = plot(file_data(:,4),
file_data(:,3), 'Color', color3,
LineStyle='--', LineWidth=1.2);
    ylim([0,7]);
    set(gca, 'YColor', color3);

    xlim([0,100]);

    % Añadir leyenda
    legend([h1, h2, h3], {'Temp. celda',
'Temp. aire', 'Presión'},
Location="northwest");

end

% Títulos
subplot(1, 3, 1);
title('100 % SOC');
yyaxis left;
ylabel('Temperatura (°C)',
Color='black');

subplot(1, 3, 2);
title('75 % SOC');
xlabel('Tiempo (min)');

subplot(1, 3, 3);
title('50 % SOC');
yyaxis right;
ylabel('Presión (bar)', 'Color',color3);

saveas(gcf, 'grafica.png');

```

## Tamaño de las partículas

```

clc; clear all, close all;

%% Leer datos
data_raw=readtable("Data_Tami.xlsx");

%Columnas que me interesan
vars=[1;6];
data=table2array(data_raw(:,vars));

%% Gráficas
%Número de celdas
num_bat= max(data(:,1));

for i=1:3
    j=1;
    for x=1:length(data)
        if data(x,1)==i
            part_mass(j,i)=data(x,2);
            j=j+1;
        end
    end
    sum_mass=sum(part_mass,1);
    for bat=1:size(part_mass,2)
        for part=1:size(part_mass,1)

percent_part(part,bat)=(part_mass(part,
bat)/sum_mass(bat))*100;
            end
        end
    end

% Colores
colors = [
    139, 0, 0; % Dark Red
    220, 20, 60; % Crimson
    255, 99, 71; % Tomato
    255, 204, 0; % Yellow
    30, 144, 255; % Dodger Blue
    34, 139, 34; % Forest Green
] / 255; % Normalizar a [0, 1]

percent_part=transpose(percent_part);

figure;
bar1 = bar(percent_part, 'stacked',
BarWidth=0.4);
for k = 1:length(bar1)
    bar1(k).FaceColor = colors(k, :);
    bar1(k).EdgeColor = 'none';
end

xticklabels({'100 % SOC','75 % SOC','50
% SOC'});
ylabel('Porcentaje en masa (%)');
title('Distribución de las partículas
en las secciones');

legend('<100 μm', '100-400 μm', '400μm-
1mm', '1-1.6 mm', '1.6-2 mm', '>2
mm', 'Location', 'eastoutside')

saveas(gcf, 'Percent_part.png');

```

## Composición de las partículas

```
clc; clear all, close all;

%% Leer datos
data_raw=readtable("Composicion.xlsx");

% Colores
colors = [
    139, 0, 0; % Dark Red
    178, 34, 34; % Firebrick
    220, 20, 60; % Crimson
    255, 99, 71; % Tomato
    204, 153, 0; % Darker Yellow
    255, 204, 0; % Yellow
    255, 255, 153; % Light Yellow
    0, 0, 139; % Dark Blue
    30, 144, 255; % Dodger Blue
    0, 100, 0; % Dark Green
    34, 139, 34; % Forest Green
    50, 205, 50; % Lime Green
] / 255; % Normalizar a [0, 1]

%Separar datos
varscol=[3;4;5;6;7;8;9;10;11;12;13;14];
varsfil1=[1;2;3;4;5;6];
data1=table2array(data_raw(varsfil1,varscol));

varsfil2=[7;8;9;10;11;12];
data2=table2array(data_raw(varsfil2,varscol));

varsfil3=[13;14;15;16;17;18];
data3=table2array(data_raw(varsfil3,varscol));

% Crear la figura
figure;

% Subplot 1
subplot(1, 3, 1);
bar1 = bar(data1, 'stacked',
    BarWidth=0.6);
title('100 % SOC');
for k = 1:length(bar1)
    bar1(k).FaceColor = colors(k, :);
    bar1(k).EdgeColor = 'none';
end

xticklabels({'Sec. 1', 'Sec. 2', 'Sec. 3', 'Sec. 4', 'Sec. 5', 'Sec. 6'});
ylim([0,100]);
ylabel('Porcentaje en peso (%)');

% Subplot 2
subplot(1, 3, 2);
bar2 = bar(data2, 'stacked',
    BarWidth=0.6);
title('75 % SOC');
for k = 1:length(bar2)
    bar2(k).FaceColor = colors(k, :);
    bar2(k).EdgeColor = 'none';
end
```

```
xticklabels({'Sec. 1', 'Sec. 2', 'Sec. 3', 'Sec. 4', 'Sec. 5', 'Sec. 6'});
ylim([0,100]);
xlabel('Secciones granulométricas');

% Subplot 3
subplot(1, 3, 3);
bar3 = bar(data3, 'stacked',
    BarWidth=0.6);
title('50 % SOC');
for k = 1:length(bar3)
    bar3(k).FaceColor = colors(k, :);
    bar3(k).EdgeColor = 'none';
end

xticklabels({'Sec. 1', 'Sec. 2', 'Sec. 3', 'Sec. 4', 'Sec. 5', 'Sec. 6'});
ylim([0,100]);

% Crear la leyenda
legendLabels = {'Categoría 1',
    'Categoría 2', 'Categoría 3',
    'Categoría 4', ...
    'Categoría 5', 'Categoría 6',
    'Categoría 7', 'Categoría 8', ...
    'Categoría 9', 'Categoría 10',
    'Categoría 11', 'Categoría 12'};
legend(legendLabels, 'Location',
    'eastoutside', 'Orientation',
    'vertical');

% Ajustar márgenes
subplot(1, 3, 1);
set(gca, 'Position', [0.05, 0.2, 0.25,
    0.7]); % [left, bottom, width, height]

subplot(1, 3, 2);
set(gca, 'Position', [0.35, 0.2, 0.25,
    0.7]); % [left, bottom, width, height]

subplot(1, 3, 3);
set(gca, 'Position', [0.65, 0.2, 0.25,
    0.7]); % [left, bottom, width, height]

% Crear la leyenda
legendLabels = { 'C', 'O', 'F',
    'Al', 'Si', 'P', 'S', 'Mn', 'Fe', 'Co',
    'Ni', 'Cu'};

legend(legendLabels, 'Location',
    'eastoutside', 'Orientation',
    'vertical');

saveas(gcf, 'composicion1.png');

Análisis térmico - DSC

clc; clear all, close all;

%%
% Obtener la ruta del archivo MATLAB
actual
ruta_archivo = mfilename('fullpath');
```

```

[carpeta_archivo, ~, ~] =
fileparts(ruta_archivo);

%% Carga de los archivos
% Abrir cuadro de diálogo para
seleccionar la carpeta
carpeta = uigetdir('Seleccione una
carpeta');
if carpeta == 0
disp('No se ha seleccionado ninguna
carpeta. ');
return;
end

% Cambiar carpeta seleccionada a
carpeta de trabajo
cd(carpeta);

% Obtener la lista de archivos en la
carpeta
archivos = dir(fullfile(carpeta,
 '*.xlsx'));

datos = readtable(archivos(1).name);

for i = 2:1:length(archivos)

datos=vertcat(datos,readtable(archivos(i).name));
end

% Cambiar la carpeta de trabajo a la
carpeta del archivo MATLAB (para que me
deje volver a seleccionar otra carpeta
al darle a run de
% nuevo)
cd(carpeta_archivo);

%% Filtrado de datos
% Columnas que me interesan
vars=[1;3;8;9];
data = datos(:,vars);
data_mat=table2array(data);

cell_id = unique(data_mat(:,4));
section_id = unique(data_mat(:,3));

%%Colores
% Definir colores pastel (RGB)
color1 = [139, 0, 0] / 255; % Dark red
color2 = [255, 99, 71] / 255; % Red
color3 = [0, 0, 139] / 255 ; % Dark
blue

%%Plot
% Crear una figura
figure;

% Iterar sobre cada archivo
for i = 1:size(section_id,1)
% Filtrar los datos por identificador
de archivo
file_data = data_mat(data_mat(:,3) ==
section_id(i), :);

subplot(3, 2, i);

cell_data_1=file_data(file_data(:,4)
== 1,:);
cell_data_2=file_data(file_data(:,4)
== 2,:);
cell_data_3=file_data(file_data(:,4)
== 3,:);

h1 = plot(cell_data_1(:,1),
cell_data_1(:,2), 'Color', color1,
LineWidth=1); hold on;
h2 = plot(cell_data_2(:,1),
cell_data_2(:,2), 'Color', color2,
LineStyle='--', LineWidth=1);
h3 = plot(cell_data_3(:,1),
cell_data_3(:,2), 'Color', color3,
LineStyle='--', LineWidth=1);
xline(587, 'k--');

ylim([-1,14]);
yticks(-2:2:14);
set(gca, 'YColor', 'black');
ylabel('DSC (mW/mg)');

xlim([50,600]);
xlabel('Temperatura (°C)');

% Añadir leyenda
legend([h1, h2, h3], {'100 % SOC', '75
% SOC', '50 % SOC'},
Location="northwest");

% Agregar un título a cada subplot
title(['Sección ', num2str(i)]);

end

saveas(gcf, 'DSC.png');

Análisis térmico - TGA

clc; clear all, close all;

carpeta = 'C:\Users\EVA\Desktop\UPV-
ETSID\TFG\DATA\Post proc\Thermal
oxidation\TGA';

archivos = dir(fullfile(carpeta,
 '*.txt'));

%% MI ordenador

st=[1 6 11 16 21 26 31 36 41 46 51 56
61;
2 7 12 17 22 27 32 37 42 47 52 57 62;
3 8 13 18 23 28 33 38 43 48 53 58 63;
4 9 14 19 24 29 34 39 44 49 54 59 64;
5 10 15 20 25 30 35 40 45 50 55 60
65];

for i=1:1:size(st,2)

```

```

test1=readmatrix(archivos(st(1,i)).name
);

test2=readmatrix(archivos(st(2,i)).name
);

test3=readmatrix(archivos(st(3,i)).name
);

test4=readmatrix(archivos(st(4,i)).name
);

test5=readmatrix(archivos(st(5,i)).name
);

mass=ones(254,5);
temp=ones(254,5);
DSC=ones(254,5);

mass(:,1)=test1(:,3);
mass(:,2)=test2(:,3);
mass(:,3)=test3(:,3);
mass(:,4)=test4(:,3);
mass(:,5)=test5(:,3);
temp(:,1)=test1(:,1);
temp(:,2)=test2(:,1);
temp(:,3)=test3(:,1);
temp(:,4)=test4(:,1);
temp(:,5)=test5(:,1);
DSC(:,1)=test1(:,6);
DSC(:,2)=test2(:,6);
DSC(:,3)=test3(:,6);
DSC(:,4)=test4(:,6);
DSC(:,5)=test5(:,6);

mass_m(:,i)= mean(mass,2);
temp_m(:,i)= mean(temp,2);
DSC_m(:,i)= mean(DSC,2);

mass_desvest(:,i)= std(mass,0,2);
temp_desvest(:,i)= std(temp,0,2);
DSC_desvest(:,i)= std(DSC,0,2);

end

%%Secciones sin suficientes muestras
test1_34=readmatrix(archivos(66).name);
test2_34=readmatrix(archivos(67).name);

mass(:,1)=test1_34(:,3);
mass(:,2)=test2_34(:,3);
temp(:,1)=test1_34(:,1);
temp(:,2)=test2_34(:,1);
DSC(:,1)=test1_34(:,6);
DSC(:,2)=test2_34(:,6);

mass_m(:,14)= mean(mass,2);
temp_m(:,14)= mean(temp,2);
DSC_m(:,14)= mean(DSC,2);

mass_desvest(:,14)= std(mass,0,2);
temp_desvest(:,14)= std(temp,0,2);
DSC_desvest(:,14)= std(DSC,0,2);

test1_35=readmatrix(archivos(68).name);

mass_m(:,15)= test1_35(:,3);
temp_m(:,15)= test1_35(:,1);
DSC_m(:,15)= test1_35(:,6);

column_of_zeros = zeros(size(mass_m,
1), 1);
mass_desvest= [mass_desvest,
column_of_zeros];
temp_desvest= [temp_desvest,
column_of_zeros];
DSC_desvest= [DSC_desvest,
column_of_zeros];

for r=1:1:length(mass_m)

mass_sup(r,:)=mass_m(r,:)+mass_desvest(
r,:);
mass_inf(r,:)=mass_m(r,:)-
mass_desvest(r,:);

DSC_sup(r,:)=DSC_m(r,:)+DSC_desvest(r,:
);
DSC_inf(r,:)=DSC_m(r,:)-
DSC_desvest(r,:);

end

%%Colores
% Definir colores pastel (RGB)
color1 = [139, 0, 0] / 255; % Dark red
color2 = [255, 99, 71] / 255; % Red
color3 = [0, 0, 139] / 255 ; % Dark
blue

order= [1 2 3 4 5 ;
6 7 8 9 10 ;
11 12 13 14 15];
figure;

for i=1:1:5

subplot(3, 2, i);

h1 = plot(temp_m(:,order(1,i)),
mass_m(:,order(1,i)), 'Color', color1,
LineWidth=1.5, LineStyle='-'); hold on;
h2 = plot(temp_m(:,order(2,i)),
mass_m(:,order(2,i)), 'Color', color2,
LineWidth=1.5, LineStyle='-'); hold on;
h3 = plot(temp_m(:,order(3,i)),
mass_m(:,order(3,i)), 'Color', color3,
LineWidth=1.5, LineStyle='-'); hold on;

% Desviación mass
x_fill_100 = [temp_m(:,order(1,i));
flipud(temp_m(:,order(1,i)))];
y_fill_100 = [mass_sup(:,order(1,i));
flipud(mass_inf(:,order(1,i)))];

x_fill_75 = [temp_m(:,order(2,i));
flipud(temp_m(:,order(2,i)))];
y_fill_75 = [mass_sup(:,order(2,i));
flipud(mass_inf(:,order(2,i)))];

```

```

x_fill_50 = [temp_m(:,order(3,i));
flipud(temp_m(:,order(3,i)))];
y_fill_50 = [mass_sup(:,order(3,i));
flipud(mass_inf(:,order(3,i)))];

% Área sombreada
fill(x_fill_100, y_fill_100, color1,
'FaceAlpha', 0.2, 'EdgeColor', 'none');
hold on;
fill(x_fill_75, y_fill_75, color2,
'FaceAlpha', 0.2, 'EdgeColor', 'none');
hold on;
fill(x_fill_50, y_fill_50, color3,
'FaceAlpha', 0.2, 'EdgeColor', 'none');
hold on;

ylim([0,100]);
set(gca, 'YColor', 'black');
ylabel('Masa residual (%)');

yyaxis right
ylim([-3,6]);
set(gca, 'YColor', 'black');
ylabel('DTG (%/min)');

g1 = plot(temp_m(:,order(1,i)),
DSC_m(:,order(1,i)), 'Color', color1,
LineWidth=1.2, LineStyle='--'); hold
on;
g2 = plot(temp_m(:,order(2,i)),
DSC_m(:,order(2,i)), 'Color', color2,
LineWidth=1.2, LineStyle='--'); hold
on;
g3 = plot(temp_m(:,order(3,i)),
DSC_m(:,order(3,i)), 'Color', color3,
LineWidth=1.2, LineStyle='--'); hold
on;

% Desviación DSC
x_fill_100 = [temp_m(:,order(1,i));
flipud(temp_m(:,order(1,i)))];
y_fill_100 = [DSC_sup(:,order(1,i));
flipud(DSC_inf(:,order(1,i)))];

x_fill_75 = [temp_m(:,order(2,i));
flipud(temp_m(:,order(2,i)))];
y_fill_75 = [DSC_sup(:,order(2,i));
flipud(DSC_inf(:,order(2,i)))];

x_fill_50 = [temp_m(:,order(3,i));
flipud(temp_m(:,order(3,i)))];
y_fill_50 = [DSC_sup(:,order(3,i));
flipud(DSC_inf(:,order(3,i)))];

% Área sombreada
fill(x_fill_100, y_fill_100, color1,
'FaceAlpha', 0.2, 'EdgeColor', 'none');
hold on;
fill(x_fill_75, y_fill_75, color2,
'FaceAlpha', 0.2, 'EdgeColor', 'none');
hold on;
fill(x_fill_50, y_fill_50, color3,
'FaceAlpha', 0.2, 'EdgeColor', 'none');
hold on;

xlim([100,1050]);

xlabel('Temperatura (°C)');

% Añadir leyenda
leg=legend([h1, h2, h3], {'100 % SOC',
'75 % SOC', '50 % SOC'},
Location="northwest");
leg.FontSize = 8;
x1=10;
x2=5;
leg.ItemTokenSize = [x1,x2];

line([0, 0], [0, 0], 'Color', 'k',
'LineWidth', 1, 'LineStyle', '--',
'DisplayName', 'DTG');
% Actualizar la leyenda
legend('show');

% Agregar un título a cada subplot
title(['Sección ', num2str(i)]);

end

saveas(gcf, 'TGA.png');

```

## **DOCUMENTO 2: PLIEGO DE CONDICIONES**

## 1. Introducción

Este documento recoge las condiciones necesarias y los requisitos legales y técnicos que deben cumplirse durante la realización del proyecto. Es necesario respetar todas las indicaciones para minimizar el riesgo de accidentes y asegurar unas condiciones de trabajo adecuadas y salubres. Las indicaciones aquí recogidas se basan en la legislación vigente.

Se ha dividido el pliego de condiciones en dos bloques. En el primer bloque se exponen las condiciones de realización de la parte experimental del proyecto y los requerimientos de la sala de ensayos y del laboratorio de microscopía electrónica. En el segundo bloque se establecen las condiciones de trabajo para el análisis de los datos obtenidos.

## 2. Condiciones de realización del trabajo experimental

### 2.1. Condiciones de la sala de ensayos

La sala de realización de ensayos se encuentra en el edificio 8R del Campus de Vera de la Universitat Politècnica de València. Este edificio de reciente construcción dispone de las salidas de emergencia necesarias y de una ventilación adecuada para el trabajo experimental con baterías. Además, está equipado con detectores de humo y equipos de protección contra incendios.

Actualmente, no existe una regulación específica sobre la investigación en baterías en un laboratorio, por lo tanto, para la redacción de este pliego se ha tomado como referencia la norma UNE-EN 62281:2017 para la seguridad de las pilas y acumuladores de litio durante el transporte y el Real Decreto 27/2021 sobre pilas y acumuladores y la gestión ambiental de sus residuos.

#### 2.1.1. Almacenamiento y preparación de las celdas

Las celdas se almacenarán en su embalaje original y las cajas podrán ser apiladas hasta la altura máxima especificada por el fabricante.

Se debe evitar la exposición de las celdas a la luz solar y a la humedad y el espacio elegido para el almacenamiento de las celdas debe asegurar unas condiciones de ventilación adecuadas en un ambiente seco.

Toda persona que vaya a manipular las celdas para la preparación de los ensayos deberá ir equipada con un equipo de protección individual compuesto por bata, guantes de nitrilo, gafas de seguridad y mascarilla FFP2.

La preparación de las celdas para los ensayos consistirá en la retirada del envoltorio de protección que las envuelve, la cobertura de la superficie cilíndrica con cinta de alta resistencia térmica y la colocación de 3 termopares siempre en el mismo lugar:

- 1 termopar en el centro de la celda
- 2 termopares, uno en cada extremo, a 1 cm del borde de la celda.

### 2.1.2. Realización de los ensayos

Durante la realización de los ensayos se mantendrá encendido el extractor de gases en todo momento y se asegurará la entrada de aire limpio mediante el sistema de climatización del edificio.

En ningún caso se colocarán objetos que puedan bloquear las puertas de emergencia o el acceso a estas.

Las puertas de acceso a la sala deberán permanecer cerradas durante todo el ensayo y se colocará un cartel informativo en las mismas avisando del riesgo químico.

La iluminación de la sala no deberá ser inferior a una iluminación nominal de 500 lux, valor suficiente para prevenir la fatiga visual en tareas visuales normales.

La operación de los equipos se realizará siguiendo las indicaciones de los manuales proporcionados por los fabricantes y siempre para el uso designado por los mismos.

Todos los equipos deberán contar con un interruptor de seguridad para interrumpir su operación en caso de ser necesario.

Antes de empezar un ciclo de ensayos se realizará la calibración de los termopares de medida de tipo N para asegurar la fiabilidad de las medidas. Para ello, se seguirán las indicaciones incluidas en el manual del fabricante.

Las superficies que durante la realización de los ensayos alcancen temperaturas de más de 80 °C y se encuentren en zonas desprotegidas deberán estar aisladas.

Durante la realización de los ensayos se mantendrá el calorímetro en la caja de seguridad correctamente cerrada y se mantendrá un perímetro de seguridad con esta de 1.5 metros.

Únicamente accederá a la sala el personal autorizado y deberá ir equipado con el mismo equipo de protección individual que para la manipulación de las celdas sustituyendo la mascarilla FFP2 por una mascarilla con filtros A2P2 para la protección contra gases y productos químicos.

Cuando el ensayo haya terminado, se esperará un tiempo no inferior a 1.5 horas para asegurar que la temperatura de los gases y de los residuos es suficientemente baja para manipularlos con seguridad.

### 2.1.3. Recogida de muestras y gestión de residuos

Tras los ensayos se procederá a la recogida de las muestras necesarias para el análisis. Durante este proceso será obligatorio que el personal vaya equipado con el equipo de protección individual que incluye la mascarilla con filtro A2P2.

Es imprescindible el etiquetado de todas las muestras siguiendo un único criterio para poder reconocerlas posteriormente. Las muestras se guardarán en un espacio ventilado y libre de humedad.

Una vez recogidas las partículas se realizará una limpieza completa del canister utilizando un cepillo metálico y desengrasante comercial.

Tras los análisis, las partículas y los restos sólidos de las baterías se deben almacenar en un lugar adecuado hasta su recogida por parte de la Unidad de Medio Ambiente de la universidad. El material desechable utilizado debe clasificarse como residuo químico del grupo 12 correspondiente a sólidos contaminados y terminar con su recogida asegurándose de que son depositados en un lugar habilitado para ello.

## 2.2. Condiciones del laboratorio de microscopía electrónica

El microscopio electrónico utilizado para realizar el análisis de las partículas pertenece al Servicio de Microscopía Electrónica de la Universitat Politècnica de València, que está ubicado en el edificio 8D. Las salas donde se encuentran los microscopios están preparadas para asegurar la temperatura y humedad necesarias y el Servicio de Microscopía Electrónica ofrece todo el instrumental necesario y asesoramiento al analizar las muestras.

Las condiciones de operación las establece el Servicio de Microscopía Electrónica y son las siguientes:

- Solo será posible utilizar los microscopios tras reservar previamente. Los ordenadores de la biblioteca pueden utilizarse para el análisis de datos y también requieren de reserva previa.
- Es imprescindible el uso de guantes de nitrilo durante la manipulación de muestras y al utilizar instrumentación.
- Tras el uso de los instrumentos se deberá proceder a la limpieza de estos utilizando etanol 96°.
- Las muestras de sustancias tóxicas como son las partículas de la combustión de baterías se deben preparar para el análisis en las vitrinas de gases habilitadas para ello.
- Las muestras preparadas serán desechadas por el servicio de microscopía electrónica tras cada sesión con un microscopio y únicamente si se solicita podrán guardarse durante un máximo de dos semanas.

### 3. Condiciones del puesto de trabajo en oficina

El análisis y procesado de los datos obtenidos en el laboratorio se realiza en las oficinas del CMT-Clean Mobility & Thermofluids que se encuentran ubicadas en el edificio 6D del Campus de Vera. Las salas de trabajo cuentan con todo el mobiliario necesario, acceso a internet y electricidad.

Las directrices incluidas en este pliego cumplen con los mínimos establecidos en el Real Decreto 486/1997, por el que se establecen las disposiciones mínimas de seguridad y salud en los lugares de trabajo y en el Real Decreto 488/1997 sobre disposiciones mínimas de seguridad y salud relativas al trabajo con equipos que incluyen pantallas de visualización. Además, en relación a las condiciones acústicas se han tomado como referencia las disposiciones del Real Decreto 1316/1989 sobre protección de los trabajadores frente a los riesgos derivados de la exposición al ruido durante el trabajo.

### 3.1. Equipo

#### 3.1.1. Ordenador portátil

En caso de únicamente disponer de un ordenador portátil, se conectará un teclado independiente siempre que sea posible para asegurar la correcta postura del trabajador y una distancia suficiente a la pantalla.

Los caracteres de la pantalla deberán estar configurados de forma clara y tener una dimensión suficiente. La imagen deberá ser estable sin fenómenos de destellos. Podrá utilizarse un pedestal independiente para regular la altura de la pantalla.

Se recomienda la alternancia de tareas o las pausas cortas y frecuentes para evitar mantener la mirada fija en la pantalla durante largos periodos de tiempo.

#### 3.1.2. Teclado

Si se dispone de un teclado independiente, este deberá colocarse a mínimo 10 cm del borde de la mesa para permitir al usuario apoyar los antebrazos y las muñecas sobre esta. La superficie del teclado será mate para evitar los reflejos y los símbolos de las teclas deberán resaltar lo suficiente.

#### 3.1.3. Mesa de trabajo

La mesa deberá ser poco reflectante, tener dimensiones suficientes y permitir una colocación flexible de los elementos de trabajo. El espacio deberá ser suficiente para permitir a los trabajadores una posición cómoda.

#### 3.1.4. Asiento de trabajo

El asiento de trabajo deberá ser estable, proporcionando al usuario libertad de movimiento y una postura confortable. La altura del asiento deberá ser regulable. El respaldo deberá ser reclinable y su altura ajustable. Si al sentarse en el asiento los pies del usuario no llegasen a tocar el suelo, se deberá utilizar un reposapiés. Independientemente, se proporcionará un reposapiés a cualquier trabajador que lo solicite.

Es aconsejable variar la postura a lo largo de la jornada laboral aprovechando los mecanismos de regulación del asiento. Asimismo, se recomienda levantarse de la silla de

vez en cuando para desentumecer la musculatura de las extremidades inferiores y de la espalda.

## 3.2. Entorno

### 3.2.1. Dimensiones

La altura de la sala de trabajo deberá ser como mínimo de 2.5 m. El trabajador deberá disponer de un mínimo de 2 metros cuadrados de superficie para desarrollar sus tareas. En el cálculo de la ocupación de la sala se incluirán 10 metros cúbicos de espacio no ocupado por trabajador.

El puesto de trabajo deberá tener una dimensión suficiente y estar acondicionado de tal manera que haya espacio suficiente para permitir los cambios de postura y movimientos de trabajo.

### 3.2.2. Iluminación

La iluminación general y la iluminación especial (lámparas de trabajo), cuando sea necesaria, deberán garantizar unos niveles adecuados de iluminación y unas relaciones adecuadas de luminancias entre la pantalla y su entorno. En este caso se correspondería con una iluminación mínima de 200 lux, luz adecuada para exigencias visuales moderadas. La iluminación seleccionada deberá evitar deslumbramientos y reflejos molestos en la pantalla u otras partes del equipo.

### 3.2.3. Reflejos y deslumbramientos

Los puestos de trabajo deberán instalarse de tal forma que las fuentes de luz, tales como ventanas y otras aberturas, los tabiques transparentes o translúcidos y los equipos o tabiques de color claro no provoquen deslumbramiento directo ni produzcan reflejos molestos en la pantalla.

### 3.2.4. Instalación eléctrica

La instalación eléctrica no deberá entrañar riesgos de incendio o explosión. Los trabajadores tendrán que estar debidamente protegidos contra los riesgos de accidente causados por contactos directos o indirectos.

La instalación eléctrica y los dispositivos de protección deberán tener en cuenta la tensión, los factores externos condicionantes y la competencia de las personas que tengan acceso a partes de la instalación.

#### 3.2.5. Primeros auxilios

El lugar de trabajo dispondrá del material necesario para la prestación de primeros auxilios a los trabajadores accidentados.

### 3.3. Condiciones ambientales

#### 3.3.1. Temperatura

La temperatura de la sala donde se realice el trabajo estará comprendida entre 17 °C y 27 °C.

#### 3.3.2. Humedad

La humedad relativa estará comprendida entre el 30 % y el 70 %, siempre que no haya riesgo de electricidad estática.

#### 3.3.3. Corrientes de aire

Los trabajadores no deberán estar expuestos de forma frecuente o continuada a corrientes de aire cuya velocidad exceda los siguientes límites:

- Trabajos en ambientes no calurosos: 0.25 m/s.
- Trabajos sedentarios en ambientes calurosos: 0.5 m/s.

Estos límites no se aplicarán a las corrientes de aire expresamente utilizadas para evitar el estrés en exposiciones intensas al calor, ni a las corrientes de aire acondicionado, para las que el límite será de 0.25 m/s.

#### 3.3.4. Ruido

Se deberá evaluar la exposición de los trabajadores al ruido con el objeto de determinar si se superan los límites o niveles fijados en el Real Decreto 1316/1989 y de aplicar, en tal caso, las medidas preventivas procedentes. Quedan exceptuados de la evaluación de medición aquellos supuestos en los que se aprecie directamente que en un puesto de

trabajo el nivel diario equivalente o el nivel de pico son manifiestamente inferiores a 80 dBA y 140 dB.

En cualquier caso, el ruido producido por los equipos instalados en el puesto de trabajo deberá tenerse en cuenta al diseñar el mismo, en especial para que no se perturbe la atención ni la palabra.

#### 3.4. Interconexión ordenador/persona

Para la elección de los programas y sistemas que utilizar por los trabajadores, se deberán tener en cuenta los siguientes factores:

- El programa habrá de estar adaptado a la tarea que deba realizarse.
- El programa habrá de ser fácil de utilizar y deberá, en su caso, poder adaptarse al nivel de conocimientos y de experiencia del usuario.
- Los sistemas deberán mostrar la información en un formato y a un ritmo adaptados a los operadores.
- Los sistemas deberán contar con las prestaciones suficientes para asegurar que los programas se ejecuten en un tiempo razonable.
- Los principios de ergonomía deberán aplicarse en particular al tratamiento de la información por parte de la persona.

## **DOCUMENTO 3: PRESUPUESTO**

## 1. Introducción

En este documento se presenta el presupuesto asociado a la realización del proyecto. Las unidades de obra consideradas se basan en las diferentes fases del proyecto, el proceso experimental, el análisis mediante microscopio electrónico, el procesado y análisis de los resultados obtenidos y la redacción del proyecto. Se han considerado para el presupuesto los materiales fungibles, la mano de obra contratada, los servicios utilizados en el Servicio de Microscopía Electrónica y la amortización del inmovilizado. Al realizarse la fase experimental en un laboratorio ya propiedad del CMT-Clean Mobility & Thermofluids, se han excluido los costes de construcción de este. Además, como se trata de un proyecto de investigación para el propio instituto, no se incluye tampoco el beneficio industrial ni el coste asociado al IVA.

La estructura del documento se divide en varios apartados para facilitar la comprensión de los costes y gastos expuestos. En el primer apartado se exponen los precios elementales de cada partida y se explica la metodología seguida para la obtención de estos. En el siguiente apartado se describen las unidades de obra consideradas y, por último, se presenta el presupuesto total del proyecto.

## 2. Precios elementales

A continuación, se detallan los precios elementales de las diferentes partidas consideradas. Se han diferenciado cuatro grandes grupos según la naturaleza de los costes.

### 2.1. Materiales fungibles

Los materiales fungibles utilizados en el proyecto han sido adquiridos a los proveedores habituales del instituto y su precio de compra depende del tipo de artículo. Se han incluido en esta categoría, además de todo aquel material consumible, varios artículos no fungibles que se han considerado como activo corriente dado su tiempo de vida reducido o su utilización exclusiva para este proyecto. A continuación, se muestra el listado de todos los materiales utilizados.

<b>Referencia</b>	<b>Unidad</b>	<b>Descripción</b>	<b>Precio (€)</b>
M01	ud.	Celda LG INR18650	19.79
M02	ud.	Cinta térmica	3.76
M03	ud.	Set de tamices	19.85

M04	ud.	Termopar de medida	23.86
M05	ud.	Sensor de presión	139.76
M06	ud.	Soporte para baterías	360.00
M07	ud.	Caja de guantes de nitrilo	3.09
M08	ud.	Caja de mascarillas FP2	4.75
M09	ud.	Mascarilla con filtros A2P2	27.54
M10	ud.	Gafas de seguridad	1.30
M11	ud.	Bata de laboratorio	10.25
M12	ud.	Frasco de polipropileno 50 mL	0.25
M13	ud.	Frasco de polipropileno 30 mL	0.20
M14	ud.	Material de oficina	12.50

*Tabla 8. Cuadro de precios elementales materiales fungibles*

## 2.2. Mano de obra

El personal participante en el proyecto está contratado por la Universitat Politècnica de València. El salario de los profesores contratados se ha obtenido de las tablas retributivas de la Vicegerencia de Recursos Humanos y Estructura Organizativa. El salario del doctorando es el establecido en su contrato y el salario del estudiante en prácticas se corresponde con el indicado en su convenio.

En la siguiente tabla se recogen los salarios del personal involucrado.

<b>Referencia</b>	<b>Unidad</b>	<b>Descripción</b>	<b>Precio (€)</b>
H01	h	Catedrático de Universidad	24.77
H02	h	Profesor Titular de Universidad	19.68
H03	h	Doctorando	8.55
H04	h	Estudiante en prácticas	4.60

*Tabla 9. Cuadro de precios elementales mano de obra*

## 2.3. Laboratorio de microscopía electrónica

El análisis de las partículas mediante microscopio electrónico se ha realizado en el Servicio de Microscopia Electrónica de la Universitat Politècnica de València. Este servicio ofrece la posibilidad de utilizar los microscopios aplicando una tarifa por hora de

uso. Con la reserva de un microscopio se incluyen las herramientas necesarias para la preparación de las muestras y los portamuestras.

Referencia	Unidad	Descripción	Precio (€)
SME01	h	M.E. de barrido de emisión de campo (FESEM)	30.25

Tabla 10. Cuadro de precios elementales FESEM

#### 2.4. Amortización de los equipos y programas informáticos

Los equipos y programas informáticos utilizados durante la realización del proyecto son parte del inmovilizado del CMT-Clean Mobility & Thermofluids y, por lo tanto, se va a considerar el gasto de amortización en lugar del precio de adquisición.

La cuota de amortización de cada equipo se ha calculado mediante el método de amortización lineal considerando la duración del proyecto. En la siguiente tabla se muestra para cada activo el periodo máximo de amortización que se corresponde con el elegido por el instituto según las previsiones de uso, desgaste y renovación de cada activo.

Activo	Periodo máximo (años)
Calorímetro de aceleración de ratio THT	5
Fuente de alimentación Arbin LBT21084HC	5
Canister	2
Sistema de adquisición de datos	5
DSC 214 Polyma	5
TG 209 F1 Libra	5
Ordenador portátil HP Pavilion x360 Convertible	8
Matlab R2022b	6
Paquete Office 365 2023	6

Tabla 11. Periodos máximos de amortización

Dado que la duración del proyecto ha sido de 4.5 meses, tiempo inferior a un año, se ha considerado el periodo máximo de amortización en meses suponiendo 12 meses por cada año. Sabiendo el coste de adquisición de cada equipo,  $V_c$ , el periodo máximo de amortización en meses,  $P_{m\acute{a}x}$ , y la duración del proyecto en meses,  $d$ , se ha aplicado la siguiente fórmula para el cálculo de las cuotas de amortización,  $A$ :

$$A = \frac{V_c}{P_{m\acute{a}x}} * d \quad [14]$$

En la siguiente tabla se muestra el gasto de amortización de cada equipo para el presente proyecto.

Equipo	Coste de adquisición (€)	Período máximo (meses)	Duración proyecto (meses)	Amortización (€)
Calorímetro de aceleración de ratio THT	120 000.00	60	4.5	9 000.00
Fuente de alimentación Arbin LBT21084HC	12 500.00	60	4.5	937.50
Canister	2 300.00	24	4.5	431.25
Sistema de adquisición de datos	15 000.00	60	4.5	1 125.00
DSC 214 Polyma	50 000.00	60	4.5	3 750.00
TG 209 F1 Libra	50 000.00	60	4.5	3 750.00
Ordenador portátil HP Pavilion x360 Convertible	1 600.00	96	4.5	75.00
Matlab R2022b	860.00	72	4.5	53.75
Paquete Office 365 2023	99.00	72	4.5	6.19

Tabla 12. Amortización de equipos y programas informáticos

Finalmente, se muestra a continuación el cuadro de precios elementales de la amortización de los equipos y programas.

Referencia	Unidad	Descripción	Precio (€)
A01	ud.	Calorímetro de aceleración de ratio	9 000.00
A02	ud.	Fuente de alimentación Arbin LBT21084HC	937.50
A03	ud.	Canister	431.25
A04	ud.	Sistema de adquisición de datos	1 125.00
A05	ud.	DSC 214 Polyma	3 750.00
A06	ud.	TG 209 F1 Libra	3 750.00

A07	ud.	Ordenador portátil HP Pavilion Convertible	75.00
A08	ud.	Matlab R2022b	53.75
A09	ud.	Paquete Office 365 2023	6.19

Tabla 13. Cuadro de precios elementales amortización de equipos

### 3. Cuadro de precios descompuestos

A continuación, se muestran las unidades de obra consideradas para el proyecto. Para cada una de ellas se expone su cuadro de precios descompuestos y el precio final. Se han incluido unos costes indirectos del 2 % sobre los costes directos para contabilizar el gasto eléctrico, transporte de materiales y otros gastos derivados del proyecto de los cuales se desconoce el precio.

#### 3.1. Proceso experimental en el laboratorio

En esta unidad de obra se incluye todo el proceso experimental en el laboratorio, la realización de ensayos, la preparación de muestras y los análisis realizados en las instalaciones del CMT-Clean Mobility & Thermofluids.

Referencia	Unidad	Descripción			
<b>D01</b>	<b>ud.</b>	<b>Proceso experimental en el laboratorio</b>			
Referencia	Unidad	Descripción	Precio (€)	Cantidad	Parcial
Materiales					
M01	ud.	Celda LG INR18650	19.79	3	59.37
M02	ud.	Cinta térmica	3.76	1	3.76
M03	ud.	Set de tamices	19.85	1	19.85
M04	ud.	Termopar de medida	23.86	3	71.58
M05	ud.	Sensor de presión	139.76	1	139.76
M06	ud.	Soporte para baterías	360.00	3	1 080.00
M07	ud.	Caja de guantes de nitrilo	3.09	1	3.09
M08	ud.	Caja de mascarillas FP2	4.75	1	4.75
M09	ud.	Mascarilla con filtros A2P2	27.54	2	55.08

M10	ud.	Gafas de seguridad	1.30	2	2.60
M11	ud.	Bata de laboratorio	10.25	2	20.50
M12	ud.	Frasco de polipropileno 50 mL	0.25	50	12.50
M13	ud.	Frasco de polipropileno 30 mL	0.20	50	10.00
M14	ud.	Material de oficina	12.50	1	12.50
Mano de obra					
H03	h	Doctorando	8.55	150	1 282.50
H04	h	Estudiante en prácticas	4.60	150	690.00
Medios auxiliares					
A01	ud.	Calorímetro de aceleración de ratio THT	9 000.00	1	9 000.00
A02	ud.	Fuente de alimentación Arbin LBT 21	937.50	1	937.50
A03	ud.	Canister	431.25	1	431.25
A04	ud.	Sistema de adquisición de datos	1 125.00	1	1 125.00
A05	ud.	DSC 214 Polyma	3 750.00	1	3 750.00
A06	ud.	TG 209 F1 Libra	3 750.00	1	3 750.00
Costes indirectos					
	%	C.I. sobre costes directos	2	22 461.59	449.23
<b>Total (€)</b>					<b>22 910.82</b>

Tabla 14. Cuadro de precios descompuestos proceso experimental en el laboratorio

### 3.2. Análisis de muestras en el Servicio de Microscopía Electrónica

La siguiente unidad de obra se corresponde con el análisis de muestras realizado en el Servicio de Microscopía Electrónica.

Referencia	Unidad	Descripción	Precio	Cantidad	Parcial
D02	ud.	Análisis de muestras en el Servicio de Microscopía Electrónica			
Mano de obra					
H03	h	Doctorando	8.55	20	171

H04	h	Estudiante en prácticas	4.60	20	92
-----	---	-------------------------	------	----	----

Medios auxiliares					
SME01	h	M.E. de barrido de emisión de campo (FESEM)	30.25	20	605
Costes indirectos					
	%	C.I. sobre costes directos	2	868	17.36
<b>Total (€)</b>					<b>885.36</b>

Tabla 15. Cuadro de precios descompuestos análisis de muestras en el Servicio de Microscopía Electrónica

### 3.3. Procesado y análisis de los resultados obtenidos

La siguiente unidad de obra abarca el procesado y análisis de los resultados experimentales.

Referencia	Unidad	Descripción			
<b>D03</b>	<b>ud.</b>	<b>Procesado y análisis de los resultados obtenidos</b>			
Referencia	Unidad	Descripción	Precio	Cantidad	Parcial
Mano de obra					
H01	h	Catedrático de Universidad	24.77	10	247.70
H02	h	Profesor Titular de Universidad	19.68	10	196.80
H03	h	Doctorando	8.55	100	855.00
H04	h	Estudiante en prácticas	4.60	150	690.00
Medios auxiliares					
A07	ud.	Ordenador portátil HP Pavilion x360 Convertible	75.00	1	75.00
A08	ud.	Matlab R2022b	53.75	1	53.75
Costes indirectos					
	%	C.I. sobre los costes directos	2	2 118.25	42.36
<b>Total (€)</b>					<b>2 160.61</b>

Tabla 16. Cuadro de precios descompuestos procesado y análisis de los resultados

### 3.4. Redacción del proyecto

Esta última unidad de obra se corresponde con el trabajo de redacción del presente proyecto. En los medios auxiliares se incluye únicamente el paquete de Office 365, ya que la amortización del ordenador HP Pavilion utilizado para la redacción de documentos ya ha sido incluida en la unidad de obra anterior, de esta forma se evita duplicar este gasto en el presupuesto final. Se ha decidido computar la amortización del portátil como parte de la unidad de obra de procesado y análisis de los resultados porque ha sido para esta unidad de obra cuando el activo se ha sometido a mayor utilización y desgaste.

Referencia	Unidad	Descripción	Precio	Cantidad	Parcial
<b>D04</b>	<b>ud.</b>	<b>Redacción del proyecto</b>			
<b>Referencia</b>	<b>Unidad</b>	<b>Descripción</b>	<b>Precio</b>	<b>Cantidad</b>	<b>Parcial</b>
Mano de obra					
H01	h	Catedrático de Universidad	24.77	10	247.70
H02	h	Profesor Titular de Universidad	19.68	10	196.80
H03	h	Doctorando	8.55	10	85.50
H04	h	Estudiante en prácticas	4.60	100	460.00
Medios auxiliares					
A09	ud.	Paquete Office 365 2023	6.19	1	6.19
Costes indirectos					
	%	C.I. sobre los costes directos	2	996.19	19.92
<b>Total (€)</b>					<b>1 016. 11</b>

Tabla 17. Cuadro de precios descompuestos redacción del proyecto

#### 4. Presupuesto total

El presupuesto total del proyecto se obtiene al realizar la medición de cada unidad de obra considerada, ya que no se va a considerar ni el beneficio industrial ni el IVA. En la siguiente tabla se recogen todas las unidades de obra del proyecto, la medición de cada una de ellas y la suma total.

<b>Referencia</b>	<b>Unidad</b>	<b>Descripción</b>	<b>Precio</b>	<b>Cantidad</b>	<b>Parcial</b>
D01	ud.	Proceso experimental en el laboratorio	22 910.82	1	22 910.82
D02	ud.	Análisis de muestras en el Servicio de Microscopía Electrónica	885.36	1	885.36
D03	ud.	Procesado y análisis de los resultados obtenidos	2 160.61	1	2 160.61
D04	ud.	Redacción del proyecto	1 016.11	1	1 016.11
<b>Total (€)</b>					<b>26 972.90</b>

*Tabla 18. Presupuesto total*

El presupuesto total del proyecto asciende a la cantidad de VEINTISÉIS MIL NOVECIENTOS SETENTA Y DOS EUROS CON NOVENTA CÉNTIMOS (26 972.90 €).