

**Título de tesis:** Modelación del electrolito, monocelda y stack en pilas de combustible poliméricas.

## Resumen

La pila de combustible de baja temperatura es una tecnología limpia y ecológica que permite la conversión directa de la energía química contenida en combustibles, como el hidrógeno o los bioalcoholes, en energía eléctrica. Las aplicaciones de esta tecnología son muy diversas y se están implementando en distintos sectores como automoción, industria naval, aeronaves no tripuladas, ordenadores, juguetes, etc. Ahora bien, para el uso masivo de esta tecnología son necesarias mejoras importantes, tanto en el diseño del electrolito, como en el de la monocelda y el *stack*, lo que constituye el objetivo principal de este proyecto.

Las membranas que constituyen el electrolito requieren unas condiciones muy específicas, como una buena estabilidad mecánica, dimensional y química en un ambiente de alta humedad. En este sentido, las que actualmente se encuentran en el mercado presentan algunos inconvenientes tecnológicos como el *crossover* y su coste relativamente alto. Para superar estas desventajas, en este trabajo se ha desarrollado y aplicado una metodología que permite establecer un procedimiento para diseñar membranas con propiedades específicas optimizadas. Así, uno de los objetivos del presente estudio es correlacionar las propiedades dieléctricas, la dinámica molecular y la conductividad con la composición de la membrana para predecir su comportamiento. Por esta razón, se han preparado y caracterizado varias series de membranas compuestas de alcohol polivinílico (PVA) con masas moleculares distintas, entrecruzadas con ácido sulfosuccínico (SSA), a las que se les ha añadido partículas de óxido de grafeno (GO) en distintas proporciones. Una vez analizada su estructura química final por medio de espectroscopía infrarroja (FTIR), su morfología superficial mediante microscopía electrónica de transmisión (TEM) y sus propiedades y estabilidad térmica por calorimetría diferencial de barrido (DSC) y análisis termogravimétrico (TGA), se estudió y modelizó su comportamiento eléctrico. Para ello, se determinaron las corrientes de polarización/despolarización y los espectros de relajaciones dieléctricas con el fin de obtener la capacidad de transferencia iónica, la movilidad molecular, la conductividad eléctrica y protónica para establecer el mecanismo que gobierna la movilidad de los protones a través del electrolito.

Las monoceldas de H-Tec, modelo F-107, se equiparon con las membranas compuestas entrecruzadas descritas y se ensayaron en un banco de ensayo de pila de combustible funcionando con hidrógeno y oxígeno producidos in situ por electrólisis de agua. Asimismo, estas mismas membranas se evaluaron en otro banco de ensayos metanol/oxígeno de la ETS Ingeniería Aeronáutica y del Espacio de la Universidad Politécnica de Madrid, en el marco de los proyectos del Ministerio de Economía y Competitividad DOMEPOL (ENE2011-28735-C02-01) y POLYCELL (ENE2014-53734-C2-1-R). De este modo, se fijó la concentración óptima de metanol, se obtuvieron las curvas características de voltaje, potencia, y los valores de máxima potencia para cada electrolito. Al mismo tiempo, se ensayó una membrana comercial de Nafion®117, que se tomó como referencia. Las curvas de voltaje-intensidad se modelizaron, en primer lugar, aplicando un modelo 0D, teniendo en cuenta los mecanismos dominantes de pérdidas de voltaje y aplicando la simplificación de Tafel. En segundo lugar, se utilizó un modelo de gradiente reducido generalizado (GRG). Los parámetros más significativos se relacionaron con la estructura y propiedades del electrolito.

Basándose en los resultados obtenidos para el electrolito y la monocelda, se ha diseñado un sistema de stack con las prestaciones necesarias para alimentar un motor *brushless*, que sustituye a un motor de combustión interna en una maqueta de camión teledirigido. Para ello, se diseñó una celda unitaria con el *software* de diseño Solidworks. Los patrones de flujo de la placa bipolar, se evaluaron mediante las pérdidas de carga que se obtuvieron por simulaciones, realizadas con el *software* Flow Simulation, complemento del *software* Solidworks. También se llevó a cabo la selección de materiales más adecuados para la construcción de la celda, que se elaboró en placas de grafito laminado. Además, se determinó su potencia máxima para el sistema metanol/oxígeno. Con estos resultados se calculó el tamaño y número de celdas del *stack* y se seleccionaron los elementos auxiliares a partir de los caudales de fluido necesarios. Con todo ello, se ha contribuido a optimizar el diseño de los electrolitos, monoceldas y *stacks* para pilas de combustible de intercambio protónico con el fin de impulsar de forma generalizada esta tecnología.