

Modelado computacional de materiales anódicos para baterías de ion-litio Computational modeling of anode materials for lithium-ion batteries

P.M. García-Arias^a , S.N. Benítez- Suárez^a , J.R. Rodríguez-Barreras^b , B. Trujillo-Navarrete^{a,*} 

^aTecnológico Nacional de México/IT. de Tijuana, Calzada del Tecnológico 12950, Tomas Aquino, 22414 Tijuana, Baja California, México

^bCentro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada (CISECE), Carr. Tijuana-Ensenada 3918, Zona Playitas, 22860 Ensenada, Baja California, México

Resumen

Este estudio modela computacionalmente la inserción y el transporte de litio (Li^+) en materiales anódicos para baterías de iones de litio (LIBs), incluyendo grafito, óxido de titanio-litio (LTO), silicio (Si) y óxido de tantalio (Ta_2O_5). Simulando procesos de carga a tasas de 1C y 4C, la investigación busca evaluar y comparar su comportamiento electroquímico para guiar el diseño eficiente de baterías. Los hallazgos clave indican que el Si ofrece la capacidad mayor, pero sufre de estrés interno y distribución heterogénea de Li^+ a 4C. El grafito proporciona estabilidad a 1C, pero tiene una cinética de difusión limitada. El LTO demuestra un excelente rendimiento a 4C y una distribución uniforme de Li^+ a pesar de su menor capacidad. El Ta_2O_5 muestra una utilización prometedora, pero requiere optimización. Este enfoque computacional es valioso para comprender el rendimiento de los materiales sin costosas pruebas físicas.

Palabras clave: Ánodo, batería de ion-litio, Modelado y simulación, Sistema multifásico, inserción de iones.

Abstract

This study computationally models lithium (Li^+) insertion and transport in anode materials for lithium-ion batteries (LIBs), including graphite, lithium titanium oxide (LTO), silicon (Si), and tantalum oxide (Ta_2O_5). By simulating charging processes at C-rates of 1 and 4, the research aims to evaluate and compare their electrochemical behavior to guide efficient battery design. Key findings indicate that Si offers the highest capacity but suffers from internal stress and heterogeneous Li^+ distribution at 4C. Graphite provides stability at 1C but has limited diffusion kinetics. LTO demonstrates excellent performance at 4C with uniform Li^+ distribution despite its lower capacity. Ta_2O_5 shows promising potential but requires optimization. This computational approach is a valuable tool for understanding material performance without costly physical testing.

Keywords: Anode, lithium-ion battery, Modeling and simulation, Multiphase system, ion insertion.

1. Introducción

La creciente demanda global de energía y la necesidad imperante de fuentes de energía sostenibles han impulsado un interés sin precedentes en sistemas de almacenamiento energético eficientes y de larga duración. En este contexto, las LIBs han emergido como una tecnología fundamental, gracias a su densidad energética, eficiencia de carga/descarga y prolongada vida útil. Su versatilidad las posiciona como componentes clave en una amplia gama de aplicaciones, desde dispositivos electrónicos portátiles hasta vehículos eléctricos y almacenamiento de energía a gran escala (Li et al., 2018).

El rendimiento, la estabilidad y la seguridad a largo plazo de las LIBs dependen críticamente de los materiales

utilizados en sus electrodos, esencialmente en el ánodo. Tradicionalmente, el grafito ha sido el material anódico de elección debido a su costo bajo, disponibilidad alta y una capacidad teórica de $372 \text{ mAh} \cdot \text{g}^{-1}$ (Reddy et al., 2013). Sin embargo, a pesar de sus ventajas, el grafito presenta significativas limitaciones en aplicaciones que requieren densidades de potencia alta o tasas de carga rápidas, debido a su limitada cinética de difusión de Li^+ y su potencial de formación de dendritas a corrientes altas. Estas restricciones impulsan la búsqueda de materiales anódicos alternativos que ofrezcan un rendimiento superior en condiciones de demanda energética alta, como LTO, Si y Ta_2O_5 , cada uno con propiedades electroquímicas únicas (Reddy et al., 2013).

La caracterización experimental y evaluación de materiales anódicos nuevos son procesos costosos que

*Autor para la correspondencia: balter.trujillo@tectijuana.edu.mx

Correo electrónico: balter.trujillo@tectijuana.edu.mx (Balter Trujillo-Navarrete), m24210048@tectijuana.edu.mx (Paola Michell García-Arias), m24210047@tectijuana.edu.mx (Samantha Nereyda Benítez-Suarez), jassiel@cicse.edu.mx (Jassiel Rolando Rodríguez-Barreras)

consumen mucho tiempo y recursos, lo que ralentiza el desarrollo de baterías de próxima generación. Existe una brecha significativa en la capacidad de predecir de manera eficiente el comportamiento electroquímico de estos materiales bajo diversas condiciones operativas sin recurrir a ensayos físicos extensos. El modelado computacional se presenta como una herramienta poderosa y eficaz para superar esta limitación, permitiendo la predicción del comportamiento electroquímico y la optimización del diseño de batería de manera virtual. Este enfoque no solo reduce los costos y el tiempo asociados con la experimentación, sino que también facilita la adquisición de conocimiento de los fenómenos de transporte e inserción iónica a nivel de material anódico y/o catódico (Vyrubal et al., 2014).

En el presente estudio, se tiene como objetivo principal evaluar y comparar el comportamiento electroquímico de cuatro materiales anódicos clave: grafito, LTO, Si y Ta₂O₅, bajo 1C y 4C, utilizando un modelo computacional tridimensional. Concretamente, se busca analizar el transporte e inserción de iones de Li⁺ en cada material seleccionado, evaluar la distribución de potenciales, la utilización relativa del material activo, e identificar las ventajas y desventajas para guiar el diseño de LIBs.

2. Metodología

La metodología desarrollada se enfoca en el desarrollo y aplicación de un modelo computacional tridimensional para simular el comportamiento electroquímico de diversos materiales anódicos en LIBs. Este enfoque permitió evaluar el transporte de iones, y la eficiencia de inserción de Li⁺; y el rendimiento durante 1C y 4C bajo condiciones controladas, utilizando un ánodo de grafito como referencia.

2.1. Diseño del Modelo Computacional

El modelado se realizó utilizando un software multifísico de simulación robusto diseñado para resolver problemas complejos de física acoplada. Se empleó el módulo 'Lithium-Ion Battery', que proporciona interfaces físicas predefinidas para el análisis de reacciones químicas, transporte de especies diluidas y transporte en medios porosos (Comsol AB, 2023). Esto permite una descripción detallada de los fenómenos multifísico que ocurren dentro de la LIBs.

La celda de la batería se modeló como una pila multicapa con simetría central para optimizar los costos computacionales sin sacrificar la representatividad del sistema. Las dimensiones específicas utilizadas para el modelado, incluyendo el grosor del separador ($L_{sep} = 30 \mu\text{m}$), el espesor del electrodo positivo ($L_{pos} = 60 \mu\text{m}$), el espesor del electrodo negativo ($L_{neg} = 60 \mu\text{m}$), y los colectores de corriente ($L_{pos_cc} = 10 \mu\text{m}$ y $L_{neg_cc} = 10 \mu\text{m}$ cada uno), basándose en una configuración de celda tipo bolsa típica. La celda completa tenía un ancho (W_{cell}) de 10 cm y una altura (H_{cell}) de 20 cm, con pestañas de 1 cm de altura (H_{tab}) y 5 cm de ancho (W_{tab}), en la figura 1 se puede visualizar la celda creada en comsol una vez estableciendo los parámetros geométricos anteriores. En el Apéndice A, se muestra el listado completo de las dimensiones utilizadas en el modelo de la batería.

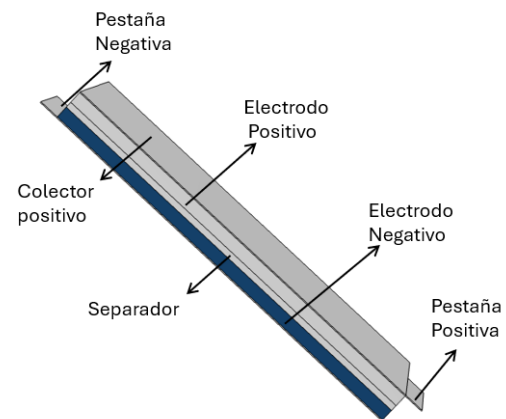


Figura 1: Geometría del modelo de la batería de celda tipo bolsa de iones de Li⁺ para ver las capas claramente.

2.2. Selección y Propiedades de los Materiales

Las propiedades físicas y electroquímicas de todos los componentes (p. ej., ánodo, cátodo, separador, colectores de corriente y electrolito) se definieron basándose en una revisión exhaustiva de la literatura (Quintero et al., n.d.). En la simulación, se seleccionaron cuatro materiales anódicos: grafito, LTO, Si y Ta₂O₅. Los cuales fueron elegidos por sus diversas propiedades electroquímicas y su potencial para superar las limitaciones del grafito convencional. Donde los parámetros claves como la capacidad máxima de almacenamiento (cs_{max_neg}), el radio de partícula (rp_neg), la densidad de corriente de intercambio de referencia ($i0_{ref_neg}$) y la conductividad electrónica ($sigmas_neg$), se ajustaron para cada material anódico.

En el caso del grafito, se utilizaron los valores reportados por (Fu et al., 2017) quienes reportan las condiciones experimentales y parámetros electroquímicos típicos de grafito natural y MCMB. Los valores asignados al LTO provienen del estudio de (Fu et al., 2017), el cual también ofrece un análisis comparativo frente al grafito bajo condiciones similares de operación. Finalmente, las propiedades para Si se extrajeron de (Luo et al., 2017) en donde se evalúa el comportamiento de ánodos basados en este material con condiciones de operación análogas. La fracción de volumen del electrodo negativo ($epss_neg$) fue ajustada para asegurar un balance de capacidad con el cátodo fijo y mantener la coherencia del modelo, siguiendo la ecuación (1):

$$\frac{(cs_{max_pos})(L_{pos})(epss_{pos})}{(cs_{max_neg})(L_{neg})}(1.25). \quad (1)$$

En la Tabla 1, se presenta un resumen de las propiedades físicas y electroquímicas más relevantes de los materiales anódicos incluidos en el modelo.

Tabla 1: Materiales para la batería de iones de Li⁺ tipo bolsa.

Parámetro	Grafito	LTO	Silicio	Ta ₂ O ₅
c_{max_neg}	31000 mol/m ³	17500 mol/m ³	90000 mol/m ³	60000 mol/m ³
rp_neg	1e-6 m	2e-7 m	5e-7 m	2e-6 m
$i0ref_neg$	3.3 A/m ²	1.0 A/m ²	0.5 A/m ²	0.5 A/m ²
$sigmas_neg$	100 S/m	0.5 S/m	10 S/m	1 S/m
$epss_neg$	Ajustad o a LMO	Ajustad o a LMO	Ajustad o a LMO	Ajustado a LMO

2.3. Modelado Matemático y Ecuaciones Clave

El comportamiento de la LIBs tipo bolsa se describe mediante un enfoque basado en las ecuaciones de transporte acopladas con reacciones electroquímicas en medios porosos, siguiendo el marco teórico de la teoría de Newman. El dominio incluye regiones porosas para los electrodos, un separador, electrolitos y regiones sólidas para los colectores. A continuación, se enlistan las ecuaciones esenciales:

Transporte Iónico en el Electrolito: Se utilizó la Ecuación de Nernst-Planck sin convección (2), bajo el supuesto de electroneutralidad, para describir el transporte de iones de Li⁺ en el electrolito:

$$\frac{\partial c_e}{\partial t} = \nabla \cdot \left(D_e \nabla c_e - \frac{t_+}{F} i_e \right) + \frac{1 - t_+}{F} a_s j. \quad (2)$$

Donde c_e es la concentración de Li⁺ en el electrolito, D_e es el coeficiente de difusión, i_e es la densidad de corriente, F es la constante de Faraday, t_+ es el número de transporte de Li⁺, a_s es la superficie específica del material activo, y j es la densidad de corriente de reacción interfacial.

Densidad de Corriente en el Electrolito: Se determinó usando la ecuación de la Ley de Ohm extendida (3):

$$i_e = -\kappa_e^{eff} \left(\nabla \phi_e - \frac{2RT(1 - t_+)}{Fc_e} \nabla c_e \right). \quad (3)$$

Donde κ_e^{eff} es la conductividad efectiva iónica, ϕ_e es el potencial eléctrico del electrolito, T es la temperatura y R es la constante de los gases ideales.

Reacción de Inserción Reversible: La reacción de inserción reversible de Li⁺ en el ánodo, se implementó utilizando la Ecuación de Butler-Volmer (4) acoplada al transporte de masa y carga:

$$j = j_0 \left[\exp \left(\frac{a_a F \eta}{RT} \right) - \exp \left(-\frac{a_c F \eta}{RT} \right) \right]. \quad (4)$$

Donde j_0 es la densidad de corriente de intercambio, a_a y a_c son los coeficientes de transferencia de carga anódico y catódico, respectivamente, T es la temperatura, R es la constante de los gases ideales, y η es la sobretensión.

Conservación de Masa y Potenciales: Se resolvieron las ecuaciones de conservación para los potenciales en fase

sólida y electrolítica, así como la conservación de masa de Li⁺ en el electrolito y en el sólido activo, utilizando un modelo de partícula esférica por volumen fraccional.

2.4. Protocolo de Simulación

Las simulaciones se realizaron para dos tasas de carga distintas: 1C y 4C, simulando un ciclo de carga parcial del 20% al 80% de estado de carga (SOC). El tiempo de simulación se estableció en 2520 s. En las simulaciones, se extrajeron y analizaron variables clave, que permiten evaluar el rendimiento de los materiales anódicos: voltaje vs. t ; utilización del ánodo: concentración de Li⁺ en el sólido (c_s), potenciales eléctricos en el sólido (ϕ_s) y en el electrolito (ϕ_l), y densidad de corriente en el electrolito (i_l). Los resultados se presentan en forma gráfica, utilizando vistas de superficie, línea o plano de corte según la naturaleza de las variables de interés.

3. Resultados y discusión

Los resultados de las simulaciones computacionales de los cuatro materiales anódicos evaluados: grafito, LTO, Si y Ta₂O₅, bajo dos tasas de carga 1C y 4C proporcionaron una visión del comportamiento electroquímico.

3.1. Comportamiento del Voltaje de la Celda

En la Figura 2, se muestra la curva de t vs. voltaje del grafito, donde se denota un comportamiento de carga estable y continuo, alcanzando un voltaje final ≈ 4.22 V. El resultado es consistente con lo reportado por He et al. (2024), quien destacó su eficiencia Coulómbica inicial alta (90–93 %). Sin embargo, la estructura en capas del grafito muestra limitaciones significativas a 4C, lo cual se revela en una caída abrupta de V durante los ciclos rápidos, como se visualizó en el modelo para 4C (He 2024).

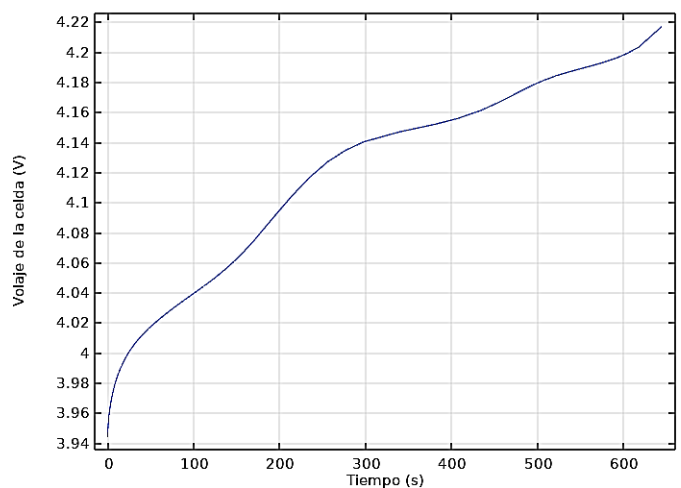


Figura 2: Curva de voltaje del grafito.

3.2. Utilización del Material Activo

La Figura 3 y Figura 4 muestran los mapas tridimensionales, donde se denota la utilización del material anódico para 1C y 4C, asociándose a su capacidad de

almacenamiento, respectivamente. Para 1C, Si y Ta₂O₅ mostraron la utilización del material activo mayor, seguidos por el grafito y LTO. La utilización del material anódico implica una capacidad de almacenamiento mayor. Si mostró el mejor desempeño, viéndose reflejado en una eficiencia más alta, esto concuerda con su capacidad teórica mejorada (Figura 3b), (Wu et al., 2012). En contraste, Si mostró una difusión limitada en 4C, evidenciado por cambios en su utilización, además, LTO conservó una distribución uniforme, indicando la disposición mejorada de material anódico en volumen (Figura 4b y 4c).

El grafito mostró un desempeño equilibrado y predecible, sin alcanzar los niveles de Si, lo que confirma que su rendimiento disminuye en condiciones de demanda alta, tal como se espera de su estructura anisotrópica reportada en la literatura, como se muestra en la Figura 4a (He, 2024). Por su parte, el Ta₂O₅ presentó una utilización razonable, pero con zonas localizadas de eficiencia baja, probablemente debido a su conductividad electrónica baja intrínseca (Chen et al., 2023). Por otra parte, Ta₂O₅ mostró una utilización intermedia a 1C, con una eficiencia aceptable pero no máxima, lo cual se espera considerando su limitada conductividad electrónica en estado puro (Figura 3d). Sin embargo, incluso a 4C, mantuvo una distribución más uniforme que la del silicio, lo cual evidencia su capacidad para soportar tasas elevadas sin una caída abrupta en el aprovechamiento del material. Esto puede atribuirse a la estructura amorfa del Ta₂O₅, que permite la difusión del Li⁺ sin provocar una expansión volumétrica crítica, a diferencia del silicio (Figura 4d), (Nashed et al., 2013)

3.3. Distribución de la Concentración de Li⁺

En la Figura 5, se muestra la difusión de Li⁺ para cada uno de los materiales anódicos evaluados. La difusión de Li⁺ en el grafito fue uniforme dentro del volumen del material (Figura 5a). La homogeneidad sugiere un equilibrio entre la capacidad y la estabilidad mecánica, y la inserción de Li⁺ de forma eficiente, sin generación de gradientes, los cuales inducen tensiones internas o daños estructurales. Donde, el recubrimiento potencial de Li⁺ y la necesidad de estabilidad estructural durante la carga rápida son aspectos críticos que requieren mayor investigación y desarrollo (Khan et al., 2024), (Zhong et al., 2023). Además, la integración de materiales avanzados anódicos como el grafeno en sistemas de baterías comerciales debe considerar la rentabilidad y la escalabilidad para garantizar su adopción generalizada (Alathlawi and Hassan, 2024).

Por otra parte, Si mostró una marcada heterogeneidad en la distribución del Li⁺, con concentraciones bajas en el núcleo y alta en la superficie externa, como se muestra en la Figura 5b. Este fenómeno, es común en materiales de capacidad específica alta pero baja difusividad, lo cual ha sido asociado bajo condiciones de carga rápida con un estrés mecánico y la degradación estructural acelerada. Conjuntamente, la gran superficie del Si nanoestructurado puede provocar un aumento de reacciones secundarias, y la complejidad de la fabricación de estos materiales avanzados puede dificultar su adopción generalizada (Gonzalez et al. 2017), (Nam, Song, and Chae, 2024). El modelado continuo basado en sistemas multifísicos puede proporcionar información sobre la distribución de tensiones dentro del material activo, lo cual

es esencial para diseñar ánodos que puedan soportar cambios de volumen sin agrietarse (Kilchert et al., 2024). Una estrategia consistiría en la optimización de la morfología, donde el modelado ayude a comprender la influencia de la forma del ánodo de Si en el rendimiento de la celda, que permita optimizar el espacio poroso y el uso del material activo (Kilchert et al., 2024).

Igualmente, LTO exhibió la distribución de Li⁺ más homogénea, incluso superior al grafito, confirmando una estabilidad alta en la inserción/extracción de Li⁺ (Figura 5c), posicionándolo como un material anódico confiable para aplicaciones que requieren ciclo de vida útil alta, y seguridad operativa. En contraste, su capacidad energética fue menor en comparación con los otros materiales anódicos. Los estudios de modelado, como los que utilizan la teoría del funcional de la densidad (DFT), predicen que el dopaje puede alterar la estructura electrónica del LTO, reduciendo la brecha de banda y mejorando la conductividad. Esto puede resultar en mayores capacidades específicas y menores potenciales de trabajo, como se observa en compuestos de LTO dopados con Fe²⁺ y Cr³⁺ (Lin et al., 2014). Además, cálculos *ab initio* y espectroscopia de pérdida de energía electrónica han demostrado que la compensación de carga en el LTO ocurre principalmente en los sitios de oxígeno, lo que ayuda a mantener la estabilidad estructural incluso a bajos voltajes (Wang et al., 2013). Si bien la nanoestructuración y el dopaje ofrecen vías prometedoras para mejorar la capacidad y la estabilidad de los LTO, persisten desafíos en términos de escalabilidad y reproducibilidad, conjuntamente, la complejidad de sintetizar materiales dopados y nanoestructurados puede limitar su aplicación práctica en la producción de baterías a gran escala (Priyono et al., 2018). No obstante, los efectos sinérgicos de estas estrategias siguen ofreciendo potencial para el avance de las tecnologías de baterías de iones de Li⁺ de potencia alta.

En cuanto al Ta₂O₅, sus gradientes de concentración fueron intermedios (Figura 5d), sugiriendo compatibilidad con el electrolito, y una base prometedora para optimización. El modelado computacional predice que las estructuras desordenadas de sal de roca, como DRX-Li₃Ta₂O₅, pueden ofrecer una alta capacidad volumétrica y una rápida difusión de Li⁺, lo que las hace adecuadas para aplicaciones de baterías de alto rendimiento (Obeid et al., 2023). Por ejemplo, el uso de nanoláminas de Ta₂O₅, como capa electrolítica autoportante en baterías de estado sólido ha demostrado reducir significativamente la resistencia interfacial, lo que sugiere que podrían emplearse arquitecturas similares para mejorar la conductividad y el rendimiento del Ta₂O₅ (Xu et al. 2011).

Especialmente, si se incorporan canales jerárquicos o modificaciones superficiales (Chen et al., 2023). También, su estabilidad térmica alta (~1800 °C) proporciona una ventaja en términos de seguridad operativa, especialmente en contextos como los vehículos eléctricos donde las celdas pueden estar sometidas a estrés térmico y ciclos intensos (Zheng et al., 2024). Este comportamiento simulado sugiere que el Ta₂O₅ dopado podría posicionarse como una alternativa viable frente a los ánodos convencionales, equilibrando estabilidad, difusión y seguridad.

En resumen, los resultados del modelado computacional destacan las fortalezas y debilidades de cada material anódico. El grafito es ideal para aplicaciones convencionales

debido a su estabilidad a 1C, aunque su cinética limitada restringe su uso en alta demanda energética. Si ofrece la mayor capacidad específica, pero su rendimiento se ve limitado por la polarización interna y la heterogeneidad de la distribución de Li^+ a 4C. El LTO se destaca por su excelente comportamiento a 4C y su utilización homogénea, siendo

ideal para aplicaciones que requieren potencia y durabilidad, a pesar de su menor capacidad energética. Finalmente, el Ta_2O_5 muestra un desempeño prometedor con una utilización aceptable y estabilidad química, pero requiere optimización en su morfología y conductividad para competir con los materiales establecidos.

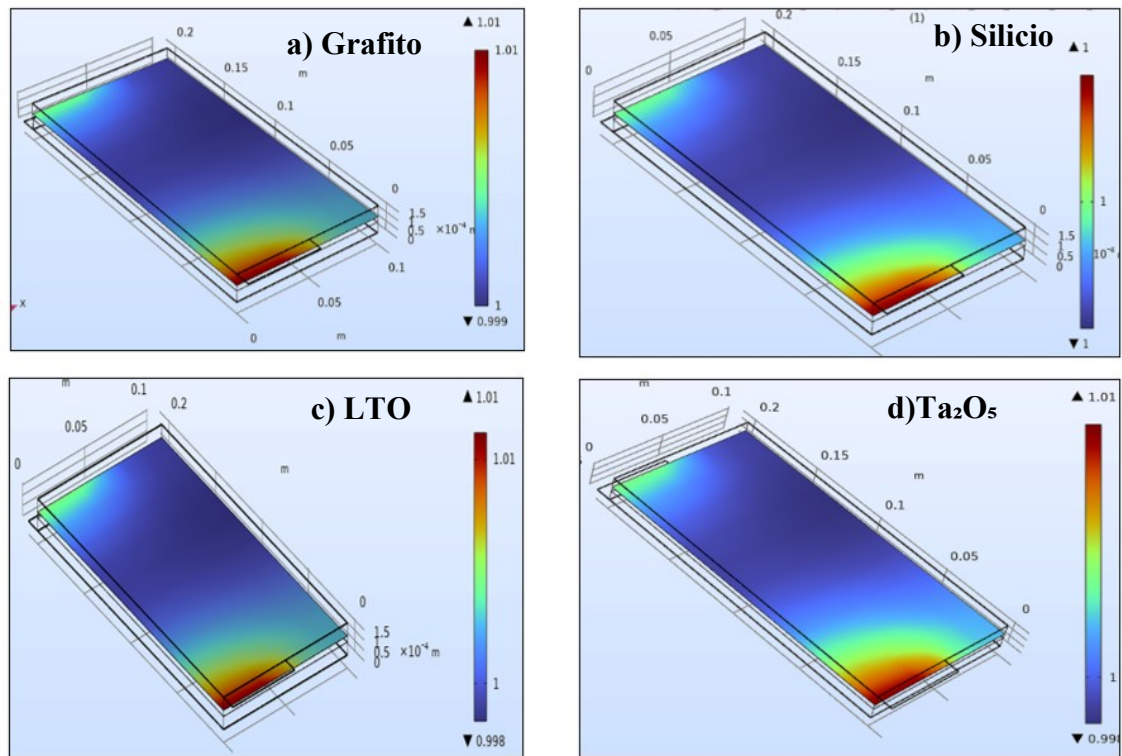


Figura 3: Utilización de material activo a 1C. En la escala de colores, el azul indica baja utilización y el rojo indica alta utilización. a) Utilización del grafito a 1C. b) Utilización del silicio a 1C. c) Utilización del LTO a 1C. d) Utilización del Ta_2O_5 a 1C.

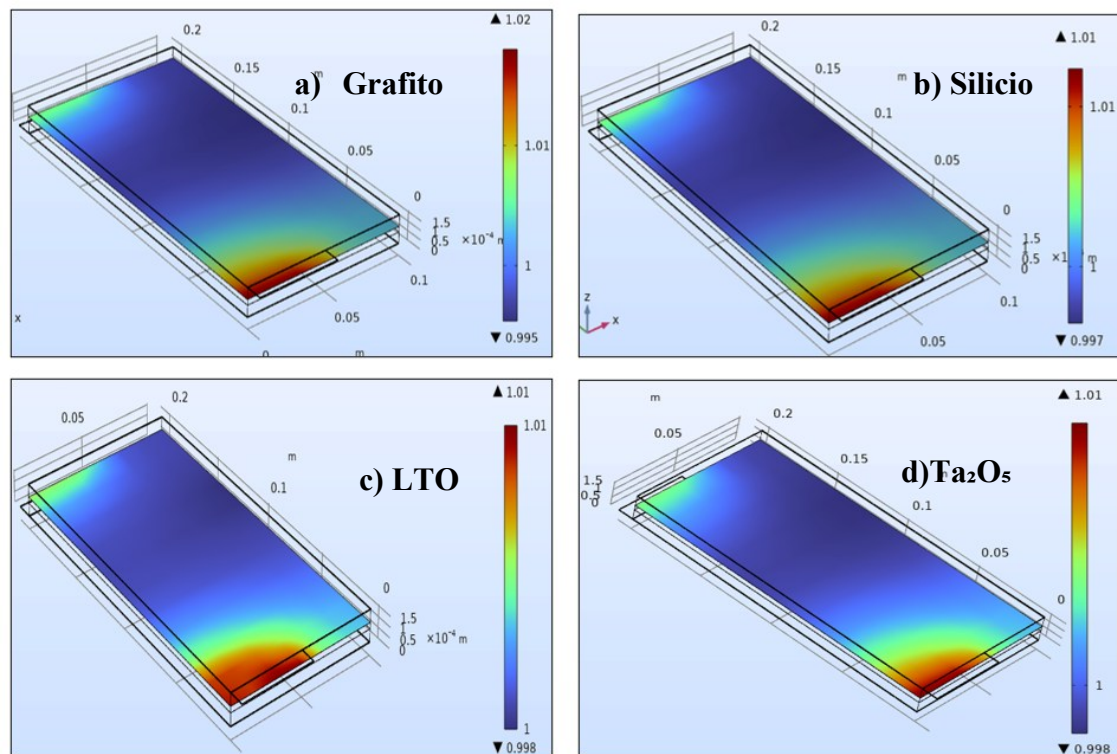


Figura 4: Utilización de material activo a 4C del LTO. a) Utilización del grafito a 4C. b) Utilización del silicio a 4C. c) Utilización del LTO a 4C. d) Utilización del Ta_2O_5 a 4C.

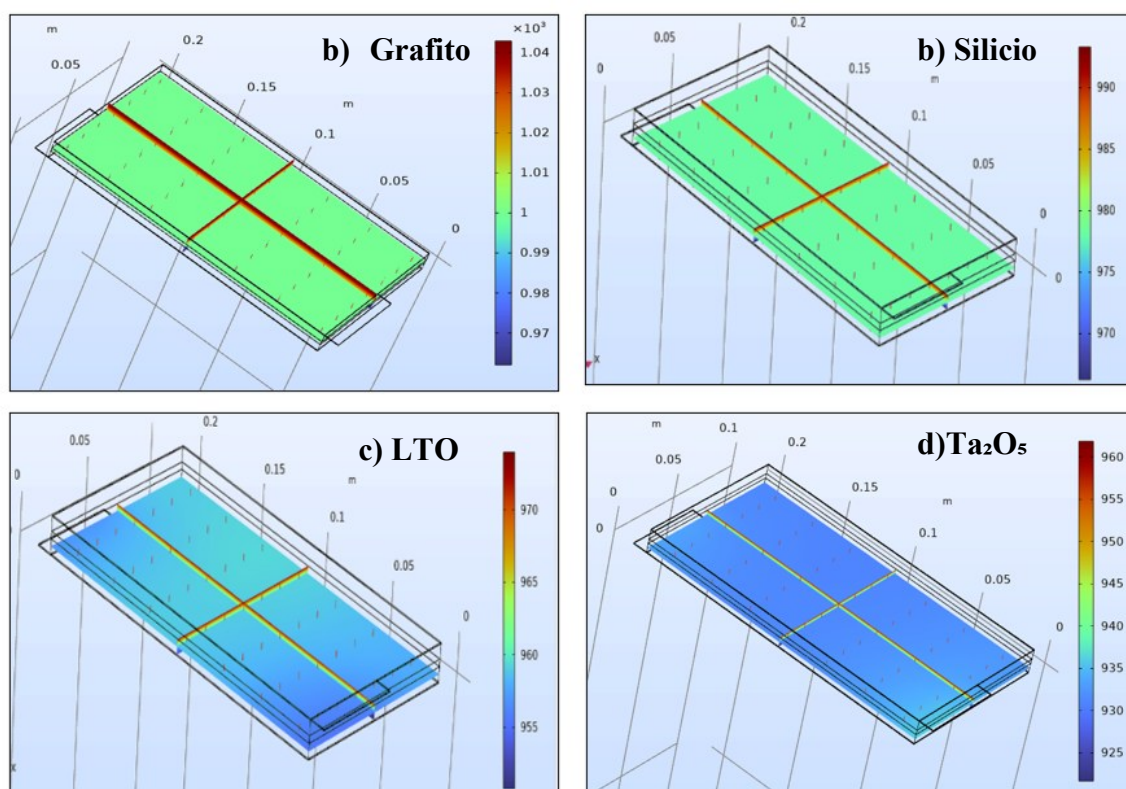


Figura 5: Distribución de concentración de sal a 1C. a) concentración de sal en ánodo de grafito a 1C. b) concentración de sal en ánodo de silicio a 1C. c) concentración de sal en ánodo de LTO a 1C. d) concentración de sal en ánodo de Ta_2O_5 a 1C.

4. Conclusiones

El modelado computacional permitió identificar contrastes significativos en el desempeño de los materiales anódicos evaluados. Más allá de confirmar la mayor capacidad del silicio o la estabilidad del grafito, los resultados evidencian que la distribución espacial del litio y la respuesta a diferentes tasas de carga son factores determinantes para la vida útil de la celda, lo cual suele pasarse por alto en estudios únicamente experimentales.

El desempeño superior del LTO a 4C, por ejemplo, sugiere que la cinética de difusión puede ser más relevante que la capacidad específica en aplicaciones de alta potencia. Por otro lado, el comportamiento del Ta_2O_5 abre una línea de investigación atractiva para explorar modificaciones estructurales y dopajes que mejoren su conductividad.

Agradecimientos

Tecnológico Nacional de México/TI Tijuana (TecNM) por el apoyo recibido (Proyecto No. 21808.25). P.M. García-Arias (2025465), S.N. Benítez- Suárez (2025645) agradece a SECIHTI la beca para su maestría en Ingeniería.

Referencias

Alathlawi, Hussain J., and K. F. Hassan., (2024). Review—Recent Advancements in Graphene-Based Electrodes for Lithium-Ion Batteries.

- ECS Journal of Solid-State Science and Technology,13, 1-001. DOI:10.1149/2162-8777/ad15a7.
- Chen, L., Xiaohui, L., Wei, D., Hao, H., Guoxia, L., and Zhenyu, Y., (2023). Tantalum Oxide Nanosheets/Polypropylene Composite Separator Constructing Lithium-Ion Channels for Stable Lithium Metal Batteries. *Advanced Composites and Hybrid Materials*,12,1-6. DOI:10.1007/s42114-022-00589-x.
- COMSOL AB. 2023. COMSOL Multiphysics® v. 6.2. <https://www.comsol.com>
- Fu, Rujian., Xuan, Z., Hengbin, F., Douglas, B., Ajay, J., Xi, Z., and Rui, X., (2017). Comparison of Lithium-Ion Anode Materials Using an Experimentally Verified Physics-Based Electrochemical Model. *Energies*, 10-12. DOI:10.3390/en10122174.
- Gonzalez, Alba, F., Nai-Hsuan, Y., Ru-Shi L., and Ru-Shi, L., (2017). Silicon Anode Design for Lithium-Ion Batteries: Progress and Perspectives. *Journal of Physical Chemistry C* 12,2775–87. DOI: 10.1021/ACS.JPC.7B07793.
- He, R., (2024). Research Progress of Carbon-Based Anode Materials for Lithium-Ion Batteries.
- Khan, M., Suxia, Y., Mujahid, A., Faisal, M., Yang, Z., Guochun, L., Junfeng, L., Xiaohui, S., and Yong, W., (2024). Innovative Solutions for High-Performance Silicon Anodes in Lithium-Ion Batteries: Overcoming Challenges and Real-World Applications. *Nano-Micro Letters*, 16. DOI:10.1007/s40820-024-01388-3.
- Kilchert, F., Max, S., Arnulf, L., and Birger, H., (2024). Silicon Nanowires as Anodes for Lithium-Ion Batteries: Full Cell Modeling.
- Li, Y., Hongting, P., and Yanli, W., (2018). Polypropylene/Polyethylene Multilayer Separators with Enhanced Thermal Stability for Lithium-Ion Battery via Multilayer Coextrusion. *Electrochimica Acta*, 264, 140–49. DOI:10.1016/j.electacta.2018.01.114.
- Lin, Chunfu, X., Yuelong, X., Fuquan C., Man On, L., Henghui, Z., and Li, Lu., (2014). $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ -Based Anode Materials with Low Working Potentials, High Rate Capabilities and High Cyclability for High-Power Lithium-Ion Batteries: A Synergistic Effect of Doping, Incorporating a Conductive Phase and Reducing the Particle Size. *Journal of Materials Chemistry*, 2,9982–93. DOI:10.1039/C4TA01163E.
- Luo, W., Xinqi, C., Yuan, X., Miao, C., Lianjun, W., Qingqing, W., Wei, L., and Jianping, Y., (2017). Surface and Interface Engineering of Silicon-

- Based Anode Materials for Lithium-Ion Batteries. *Advanced Energy Materials*, 7, 24.
- Nam, H., Wonyoung, S., and Oh B, C., 2024. “Advances in Coating Materials for Silicon-Based Lithium-Ion Battery Anodes.” *Energies* 17(19):4970. doi:10.3390/en17194970.
- Nashed, R., Hassan, W. M. I., Ismail, Y., Allam, N. K., (2013). Unravelling the interplay of crystal structure and electronic band structure of tantalum oxide (Ta₂O₅). *Physical Chemistry Chemical Physics* 15(5), 1352–1357. DOI: 10.1039/c2cp43492j
- Obeid, M. M., Liu, J., Shen, Y.-F., Sun, Q., (2023). Computational design of cation-disordered Li₃Ta₂O₅ with fast ion diffusion dynamics and rich redox chemistry for a high-rate Li-ion battery anode material. *Chemistry of Materials*, en prensa. DOI: 10.1021/acs.chemmater.3c00198
- Priyono, B., Syahrial, A. Z., Subhan, A., Faizah, F., Gusvianty, A., (2018). Optimizing performance of lithium-ion battery by nano-silicon addition mixed in Li₄Ti₅O₁₂ anode made using mechanochemical-hydrothermal method. *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies* 6(12), 6–12. DOI: 10.15587/1729-4061.2018.151937
- Quintero, V., (2021). Baterías de ion litio: características y aplicaciones. *Revista de I+D Tecnológico* 17(1), 1–10.
- Reddy, M. V., Subba Rao, G. V., Chowdari, B. V. R., (2013). Metal oxides and oxysalts as anode materials for Li-ion batteries. *Chemical Reviews* 113(7), 5364–5457.
- Vyroubal, P., Maxa, J., Kazda, T., Vondrák, J., (2014). Computational modeling of lithium ion battery. *ECS Transactions* 63(1), 99–110. DOI: 10.1149/06301.0099ecst
- Wang, F., Wu, L., Ma, C., Su, D., Zhu, Y., Graetz, J., (2013). Excess lithium storage and charge compensation in nanoscale Li_{4+x}Ti₅O₁₂. *Nanotechnology* 24(42), 424006. DOI: 10.1088/0957-4484/24/42/424006
- Wu, H., Cui, Y., (2012). Designing nanostructured Si anodes for high energy lithium-ion batteries. *Nano Today* 7(5), 414–429.
- Xu, X., Takada, K., Fukuda, K., Ohnishi, T., Akatsuka, K., Osada, M., Hang, B. T., Kumagai, K., Sekiguchi, T., Sasaki, T., (2011). Tantalum oxide nanomesh as self-standing one nanometre thick electrolyte. *Energy and Environmental Science* 4(9), 3509–3512. DOI: 10.1039/C1EE01389K
- Zheng, Z., Zhao, H., Knibbe, R., Kotobuki, M., Zhu, X., Lu, L., Sun, L., Liu, Z., (2024). Advances and challenges in inorganic lithium solid electrolytes. *Chemistry of Inorganic Materials* 4, 100078. DOI: 10.1016/j.cinorg.2024.100078

Apéndice A. Propiedades geométricas y físicas de la batería.

Nombre	Valor	Descripción
<i>L_sep</i>	30 um	Grosor del separador
<i>L_pos</i>	60 um	Grosor del electropositivo
<i>L_neg</i>	60 um	Grosor del electrodo negativo
<i>L_pos_cc</i>	10 um	Grosor del colector de corriente positivo
<i>L_neg_cc</i>	10 um	Grosor del colector de corriente negativo
<i>W_cell</i>	10 cm	Ancho de celda
<i>H_cell</i>	20 cm	Altura de la celda
<i>H_tab</i>	1 cm	Altura de la pestaña
<i>W_tab</i>	5 cm	Ancho de la pestaña
<i>i0ref_pos</i>	0.70 A/m ²	Densidad de corriente de intercambio de referencia
<i>rp_po</i>	2E- 6m	Radio de partícula del electrodo
<i>sigmas_pos</i>	3.8 S/m	Conductividad eléctrica
<i>csmas_pos</i>	22860 mol/m ³	Capacidad máxima de almacenamiento
<i>epss_pos</i>	0.5	Fracción de volumen del electrodo positivo
<i>SOC_start</i>	0.2	Estado de carga inicial de la celda
<i>SOC_window</i>	0.7	Ventana de estado de carga
<i>C_rate</i>	1	Tasa de descarga
<i>sim_time</i>	2520 s	Tiempo de simulación