

Título: LAS ENERGÍAS RENOVABLES EN LA EDUCACIÓN SUPERIOR: APORTES DE LA FÍSICA COMPUTACIONAL

Datos de los autores:

- Aliezer Martínez Mesa, Profesor Titular, Doctor en Ciencias Físicas, aliezer@fisica.uh.cu Universidad Paul Sabatier (UPS, Francia) y Universidad de la Habana (UH, Cuba), Nivel educativo en el que trabaja: universitario, Cargo: Profesor

- Llinersy Uranga Piña, Profesora Titular, Doctora en Ciencias Físicas, llinersy@fisica.uh.cu Universidad de la Habana, Nivel educativo en el que trabaja: universitario, Cargo: Profesora

Los resultados incluidos en el presente trabajo fueron obtenidos en el marco del proyecto de investigación “Simulación cuántica de procesos ultra-rápidos de almacenamiento y conversión de energía a escala nanométrica, en sistemas de interés para aplicaciones energéticas a partir de fuentes renovables” (2015-2020), Código: PNCB-76-UH-15, incluido en el Programa Nacional de Ciencias Básicas.

Simposio al que tributa:

LA CIENCIA, LA TECNOLOGÍA Y LA INNOVACIÓN A FAVOR DE LA EDUCACIÓN

Resumen:

El presente trabajo concierne la incorporación de los resultados del proyecto de investigación PNCB-76-UH-15, incluido en el Programa Nacional de Ciencias Básicas, en la enseñanza de las energías renovables dirigida a estudiantes y docentes jóvenes de educación superior. Estos contenidos fueron insertados en actividades docentes de pregrado y postgrado en la Facultad de Física de la Universidad de la Habana, como complemento de las propuestas educativas ya implementadas en dicha institución, relacionadas con la educación ambiental y el uso de las energías renovables. Como parte de la implementación, se formularon diferentes actividades lectivas y de investigación para docentes y estudiantes. En el trabajo se ilustran las potencialidades didácticas de los resultados generados a partir de la aplicación de herramientas de simulación computacional a la investigación de aspectos de la producción y explotación de fuentes de energías renovables, las temáticas que se abordan en cada una de las asignaturas y tareas de investigación a nivel de pregrado y postgrado y cómo se ejecutan. Se propone un conjunto de temas y conocimientos que

pueden contribuir a la profundización de las actividades de enseñanza de las energías renovables en la educación superior.

Palabras claves:

Enseñanza de las energías renovables, implementación, física computacional, nanotecnologías.

Introducción:

El proyecto de investigación PNCB-76-UH-15 se inserta dentro de los esfuerzos globales por desarrollar alternativas a las fuentes de energía tradicionales, ante el agotamiento progresivo de los combustibles fósiles. En la actualidad, la utilización del hidrógeno en aplicaciones móviles, por ejemplo, a pesar de constituir una fuente de energía renovable y no contaminante, se encuentra limitada por la inexistencia de dispositivos eficientes y suficientemente ligeros para el almacenamiento de esta sustancia. Por otra parte, la conversión de energía solar en energía eléctrica se encuentra limitada por la eficiencia relativamente baja de los materiales fotosensibles.

En particular, las conocidas como celdas solares sensibilizadas por colorantes y otros materiales orgánicos similares (señalados como promisorios por su bajo costo de producción, grandes valores de área específica, flexibilidad, etc.) exhiben todavía eficiencias de conversión menores que las celdas fotovoltaicas tradicionales. Aunque la radiación solar que llega a la superficie de la Tierra supera en varios órdenes de magnitud los niveles de consumo actuales, cómo concentrar esta radiación y transformarla en energía utilizable constituye aún un reto extraordinario para la ciencia y la tecnología [1,2]. El rendimiento alcanzado por los distintos tipos de celdas solares orgánicas, en las últimas décadas, se encuentra aún muy por debajo de los niveles requeridos para satisfacer las necesidades actuales de generación de energía [3].

A pesar de que existe un consenso generalizado acerca de que la solución a ambas problemáticas debe basarse en el uso de las nanotecnologías, la comprensión teórica de los mecanismos que determinan, a nivel microscópico, los procesos de almacenamiento y conversión de energía en los distintos nanomateriales, resulta insuficiente para determinar *a priori* la eficiencia de los mismos. Como consecuencia, como demuestra la amplia literatura científica dedicada a esta temática [4-5], la identificación de los materiales con aplicaciones

potenciales en el diseño de dispositivos de almacenamiento de hidrógeno o de celdas solares de alta eficiencia a partir de su caracterización experimental, se basa en gran medida en el método de prueba y error, con el consiguiente gasto de materias primas, insumos de laboratorio y energía.

En las condiciones específicas de nuestro país, resulta vital contar con una herramienta teórica que proporcione estimados realistas sobre las propiedades de interés de los dispositivos de almacenamiento y conversión de energía, con el objetivo de hacer un uso más eficiente de los limitados recursos disponibles para la investigación de estos materiales. Sin embargo, el estudio teórico de las propiedades físicas de los sistemas a escala nanométrica constituye una tarea de gran complejidad, por tratarse de fenómenos donde se manifiesta de forma pronunciada la naturaleza cuántica de las partículas involucradas. Mientras que los métodos de simulación computacional permiten, desde hace varias décadas, calcular las propiedades de sistemas clásicos de manera esencialmente exacta (salvo errores aleatorios asociados al tamaño de la muestra y el tiempo total de simulación), la simulación de la dinámica cuántica de sistemas de muchos cuerpos constituye uno de los retos más importantes de la física teórica y la física computacional contemporáneas [6].

En el contexto educativo, resulta importante profundizar en el conocimiento, por parte de los jóvenes investigadores que se dedican a estas temáticas, sobre los fenómenos asociados con el almacenamiento y conversión de energía en nanomateriales. La perspectiva de la física computacional permite mejorar la comprensión general de los factores que determinan la eficiencia de estos procesos, lo que permitirían identificar *a priori* aquellos materiales con mayores potencialidades para su aplicación tecnológica en esta área, conduciendo de esta forma a un ahorro significativo de recursos asociados al diseño, síntesis, manipulación, optimización y comprobación de nanocomponentes. Por otra parte, la profundización de la enseñanza de las complejidades asociadas al diseño, producción y almacenamiento de energía a partir de fuentes renovables, propicia el abordaje de los aspectos culturales y socioeconómicos asociados, los que constituyen un componente imprescindible en la formación de las nuevas generaciones de profesionales, con independencia de su área de especialización.

Objetivo general:

Contribuir a la elaboración de propuestas didácticas para la enseñanza de las energías renovables en la educación superior, a partir de la experiencia acumulada a través de las actividades desarrolladas en la Facultad de Física de la Universidad de la Habana.

Objetivos específicos:

- Ilustrar las potencialidades de la física computacional para generar herramientas que permitan profundizar la enseñanza de las energías renovables para docentes y estudiantes.
- Contribuir a la creación de una estructura básica de temas y contenidos sobre aspectos técnicos relacionados con el empleo de las energías renovables, para su utilización en el proceso de enseñanza-aprendizaje de dichas temáticas.

Métodos:

Se elaboró un listado de temáticas y contenidos sobre la base de los resultados de las simulaciones computacionales introducidos en la práctica docente, así como de la bibliografía básica de cada uno de los temas incluidos. Estos contenidos fueron desarrollados con tres niveles distintos de complejidad, dirigidos a estudiantes de ciencias básicas o ingenierías, a docentes de estas carreras y al público en general. Los mismos pueden estructurarse de manera diferente, en dependencia del uso que se pretenda, de acuerdo a criterios como las distintas fuentes de energías renovables, el proceso que se modela (por ejemplo, la producción, el almacenamiento o la distribución de energía), las asignaturas dentro de las cuales se insertan, el tipo de actividad docente (conferencia, seminario, práctica de laboratorio, proyecto de curso), etcétera. Se elaboró un mapa que refleja las relaciones existentes entre los diferentes temas y las actividades de enseñanza donde se abordan. Los tipos de actividades docentes están vinculadas directamente con el grado de dificultad de las mismas, que comprende tanto la realización de tareas simples (por ejemplo, ejercicios dentro de una clase práctica) hasta la elaboración de proyectos de curso de corte abierto, donde el estudiante debe formular hipótesis para dar solución a los mismos. El diseño de las actividades para la introducción de cada tema estuvo precedido por la caracterización del contexto estudiantil, académico y la cultura social alrededor de cada temática. Este análisis condujo a la selección de los espacios académicos más convenientes en cada caso y los tiempos de ejecución de la implementación, además de la planificación de los intercambios que se consideraron necesarios con otros docentes y con autoridades académicas. La evaluación de la efectividad de la implementación es cualitativa [7] y se llevó a cabo

fundamentalmente a través de encuestas elaboradas por los autores del trabajo y aplicadas a los participantes en cada una de las actividades, al inicio y al final del semestre donde éstas se implementaron.

Resultados:

El progreso continuo de las técnicas de simulación por computadora del movimiento a escala molecular, desde su concepción en la década de 1950, ha conducido al desarrollo de herramientas computacionales que proporcionan resultados esencialmente exactos para las propiedades físicas y químicas de sistemas clásicos. Sin embargo, a pesar del avance vertiginoso de las capacidades de cómputo y de almacenamiento de datos en años recientes, es difícil lograr un grado similar de precisión si están presentes efectos cuánticos significativos (por ejemplo, en la investigación de fenómenos a nanoescala). El presente trabajo se centra en la introducción, en la educación superior, de los resultados de la aplicación, por parte de un colectivo de investigadores de la Facultad de Física de la Universidad de la Habana, de modelos computacionales avanzados que permiten realizar cálculos predictivos de las propiedades estructurales, físicas y químicas de los nanomateriales que constituyen candidatos prometedores para la producción y almacenamiento de energía renovable. Estos resultados se ilustran a través de ejemplos específicos: la optimización de las capacidades de nanoestructuras para la captación de luz solar, el almacenamiento de hidrógeno y su producción a través de la descomposición fotocatalítica del agua y la separación de los diferentes isótopos de hidrógeno y helio en materiales nanoporosos.

a) Sistemas moleculares de captación de luz

La recolección de luz se considera una de las estrategias clave para hacer frente a las crecientes necesidades de fuentes de energía renovables, ecológicas y de bajo costo. Los sistemas artificiales de captación de luz generalmente logran una transferencia de energía altamente eficiente. Sin embargo, existen varios factores que limitan la eficiencia en la conversión de energía solar de una fracción importante de los materiales considerados hasta el momento para el diseño de celdas solares orgánicas. Uno de los de mayor incidencia es el desaprovechamiento de una parte importante del espectro solar, por lo que es necesario canalizar la energía absorbida en múltiples unidades receptoras (a través del sistema molecular) hasta un colector final. A partir de la experiencia adquirida por los miembros del

equipo de investigación, se modelaron computacionalmente las propiedades de una gran variedad de moléculas conjugadas (polímeros) que exhiben una alta capacidad de absorción en el rango visible del espectro de la luz solar. Se trata de candidatos prometedores para la captación de luz, capaces de actuar como colectores unidireccionales canalizando la energía hacia un centro. La colocación de grupos receptores en el área periférica permite el uso de la macromolécula como una antena de luz. Además, las investigaciones realizadas permitieron demostrar que estas moléculas pueden modificarse químicamente para optimizar la velocidad y la eficiencia del transporte de la energía recolectada [8-10].

Los conocimientos adquiridos a través de las simulaciones computacionales permiten una comprensión más profunda de los mecanismos de excitación y redistribución, que a su vez posibilita diseñar estrategias para superar la baja eficiencia de absorción y desarrollar tecnologías de celdas solares más eficientes y de bajo costo. Los materiales investigados presentan una gran flexibilidad, permitiendo ajustar sus propiedades electrónicas y ópticas mediante la ingeniería molecular. Como consecuencia, éstos resultan adecuados para una amplia gama de aplicaciones técnicas que van más allá de las celdas fotovoltaicas, extendiéndose a áreas como la optoelectrónica, por ejemplo, como componentes de los diodos emisores de luz.

b) Producción de hidrógeno mediante la descomposición del agua en celdas electroquímicas

El hidrógeno constituye un portador energético llamado a jugar un papel importante para satisfacer las crecientes necesidades energéticas de la sociedad. Dos de los inconvenientes que dificultan la explotación a gran escala del hidrógeno como portador energético son su elevado costo de producción a partir de fuentes renovables y la necesidad de mejorar las capacidades de almacenamiento de esta sustancia. La descomposición del agua en celdas (foto)electroquímicas se considera una metodología adecuada para la producción de hidrógeno a partir de fuentes renovables. La principal desventaja de la descomposición del agua para la producción de hidrógeno es la baja eficiencia energética de los dispositivos actuales. En particular, la cinética lenta de la conocida como reacción de evolución de oxígeno constituye una limitación fundamental en el desempeño de estos dispositivos. A partir de la investigación computacional de la actividad fotocatalítica de descomposición del agua en diversos materiales, los autores ilustran conceptos importantes y los pasos a seguir para alcanzar la producción eficiente y económica de hidrógeno por esta vía [11,12].

c) Almacenamiento de hidrógeno y separación de isótopos en nanomateriales

En los últimos años, el estudio de las propiedades de adsorción de nanomateriales, en particular su capacidad para absorber hidrógeno, ha atraído mucha atención. Este interés se debe principalmente a sus potenciales aplicaciones en el diseño y fabricación de dispositivos novedosos a escala nanométrica, capaces de contribuir a demandas tecnológicas como el almacenamiento o captura de distintos gases, el filtrado de compuestos y la detección de sustancias nocivas. En particular, la necesidad de diseñar dispositivos de almacenamiento de hidrógeno más ligeros y eficientes ha desencadenado un gran número de investigaciones [13-15]. A pesar de ser una fuente de energía renovable y ecológica, el uso del hidrógeno molecular como combustible en aplicaciones móviles se encuentra limitado actualmente por la carencia de tecnologías eficientes de almacenamiento de hidrógeno. El filtrado cuántico, por otro lado, puede proporcionar una alternativa para aumentar la abundancia natural de deuterio, menos costosa y con menor consumo energético que las técnicas estándares de separación de isótopos como la destilación criogénica.

Las simulaciones numéricas de los fenómenos a), b) y c) permiten identificar, a partir de la optimización de los parámetros que determinan la eficiencia de estos sistemas, los principios generales para el diseño de materiales con aplicaciones potenciales en el almacenamiento de hidrógeno y la conversión de energía solar. Las actividades concebidas para transmitir estos conocimientos a estudiantes y docentes, permiten incorporar a la educación sobre energías renovables el análisis de variables socioeconómicas como el costo de los materiales, su durabilidad, su impacto ambiental y sobre la salud (como consecuencia de su reactividad química y biológica) e ilustrar las relaciones que se establecen entre distintas ramas de la ciencia y la tecnología en la solución de los problemas de la sociedad (por ejemplo, entre las distintas ciencias básicas y entre éstas y las ingenierías).

Estos temas fueron incorporados en cursos regulares (afines) de pregrado y posgrado de la Facultad de Física de la Universidad de la Habana, para los cuales se elaboraron materiales didácticos. La introducción de contenidos sobre energías renovables fortalece los planes de estudio de pre y posgrado de la institución.

Con el objetivo de ilustrar los materiales elaborados para la enseñanza sobre energías renovables, en la figura 1 se representa esquemática el problema científico resuelto en el caso c). Para una nanoestructura determinada, se evaluó la cantidad de moléculas que son adsorbidas dentro de los poros del material, su distribución espacial y las propiedades

energéticas del fluido adsorbido, todo esto bajo condiciones de equilibrio con un gas de hidrógeno que se mantiene a una presión y temperatura constantes. Este esquema reproduce las condiciones experimentales típicas utilizadas para el estudio de las capacidades de almacenamiento de hidrógeno de los nanomateriales.

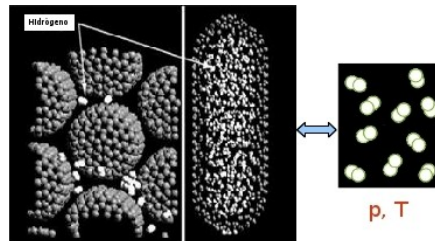


Figura 1. Representación esquemática del almacenamiento de hidrógeno en nanoestructuras, en equilibrio con un gas cuya presión p y temperatura T se fijan externamente.

Teniendo en cuenta el carácter colectivo y la naturaleza cuántica del fenómeno de adsorción de moléculas ligeras sobre sustratos sólidos, el proceso fue estudiado en el marco de la teoría funcional de la densidad para líquidos cuánticos a temperatura finita. Esta teoría permite reducir el problema de muchas partículas que se mueven en el potencial externo creado por la nanoestructura, al problema equivalente de una sola partícula que se mueve en un potencial efectivo, como se ilustra en la figura 2. Los recursos computacionales necesarios para la solución del problema equivalente son significativamente menores, lo que hace factible este tipo de estudios en las condiciones de nuestro país.

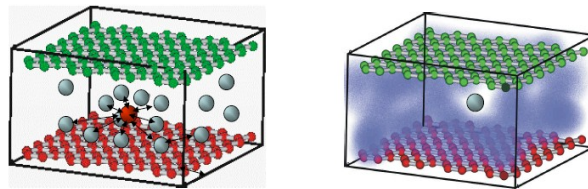


Figura 2. Transformación del problema original de muchas partículas (panel izquierdo) en un problema equivalente de 1 partícula que se mueve en un potencial efectivo (panel derecho).

Por otra parte, los autores participan en el “Grupo de Hidrógeno”, un grupo de consultoría adscrito al Ministerio de Educación Superior de Cuba, y han participado en varias ediciones de los talleres “Cuba Fotovoltaica”, un foro que promueve el intercambio de conocimientos entre representantes de ministerios y profesionales de la ingeniería y las ciencias básicas.

Luego, la implementación del proyecto ha contribuido a mejorar la capacidad de los miembros del equipo de investigación para participar en estas actividades consultivas. Adicionalmente, durante la ejecución de las tareas de investigación y educativas del proyecto y en la promoción de los proyectos de investigación, cursos y eventos de divulgación, se estimuló la incorporación de mujeres con el fin de lograr una composición de género equilibrada de los participantes.

Conclusiones:

El presente trabajo reporta generación de contenidos sobre energías renovables a través de simulaciones computacionales de fenómenos asociados, por ejemplo la captura y conversión eficiente de energía solar en materiales con aplicaciones potenciales en la fabricación de antenas moleculares y de celdas solares, las capacidades de producción y de almacenamiento de hidrógeno en superficies nanoestructuradas, así como su introducción en actividades de enseñanza-aprendizaje dirigidas a estudiantes y docentes. Los nuevos contenidos permiten abordar también las implicaciones socioeconómicas de estas aplicaciones, en particular aquellas relacionadas con los Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS) adoptados por los estados miembros de las Naciones Unidas.

El trabajo aborda, desde la perspectiva de las ciencias básicas, la promoción de fuentes de energía renovables y no dañinas para el medio ambiente, para hacer frente a problemas globales como el agotamiento de los combustibles fósiles y el cambio climático. Por lo tanto, responde principalmente a los ODS relacionados con el acceso a “energías asequibles y limpias” y al combate al “cambio climático y sus efectos”.

Nuestro país se ha planteado el reto de aumentar, en la próxima década, la contribución de las fuentes renovables hasta un 24% de la capacidad total de generación de energía. El conocimiento generado a través de la aplicación de herramientas de la física computacional puede conllevar importantes ahorros de recursos, asociados al diseño, síntesis, optimización y ensayo de nanocomponentes. En consecuencia, el trabajo contribuye a poner estos objetivos al alcance de países en desarrollo como el nuestro.

La composición de género equilibrada del equipo de investigación, ha permitido asegurar la participación equitativa de hombres y mujeres en las actividades de investigación, docencia y divulgación. Se ha garantizado una distribución de género equilibrada de las responsabilidades y de la exposición científica con respecto a los resultados del proyecto

(por ejemplo, autoría de publicaciones, presentaciones en conferencias internacionales). De esta manera, el proyecto contribuye modestamente al ODS de alcanzar la "igualdad de género" y la promoción de mejores prácticas educativas y de oportunidades de aprendizaje a lo largo de la vida (ODS "Educación de calidad").

Bibliografía:

- [1] N. S. Lewis, D. G. Nocera, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **103**, 15729 (2006)
- [2] A. C. Benniston, A. Harriman, Artificial photosynthesis. Materials Today **11**, 26 (2008)
- [3] http://www.heliatek.com/newscenter/latest_news/neuer-weltrekord-fur-organische-solar-zellen-heliatek-behauptet-sich-mit-12-zelleffizienz-als-technologiefuhrer/?lang=en
- [4] S. Günes, H. Neugebauer, N. S. Sariciftci, Chem. Rev. **107**, 1324 (2007)
- [5] Q. Wu, L. Yang, X. Wang, Z. Hu, Adv. Mater. **32**, 1904177 (2020)
- [6] D. Frenkel, B. Smit, Understanding Molecular Simulation, 2nd Ed. (Academic Press, 2001)
- [7] U. Flick, Introducción a la investigación cualitativa, Madrid (Editorial Morata S. L, 2002)
- [8] B. Rodríguez-Hernández, D. Ondarse-Álvarez, N. Oldani, A. Martínez-Mesa, L. Uranga-Piña, S. Tretiak, S. Fernández-Alberti, J. Phys. Chem. C **122**, 16639 (2018)
- [9] B. Rodríguez-Hernández, N. Oldani, A. Martínez-Mesa, L. Uranga-Piña, S. Tretiak, S. Fernández-Alberti, Phys. Chem. Chem. Phys. **22**, 15321 (2020)
- [10] B. Rodríguez-Hernández, T. Nelson, N. Oldani, A. Martínez-Mesa, L. Uranga-Piña, Y. Segawa, S. Tretiak, K. Itami, S. Fernandez-Alberti, J. Phys. Chem. Lett. **12**, 224 (2021)
- [11] F. Rodríguez-Hernández, D. C. Tranca, B. M. Szyja, R. A. van Santen, A. Martínez-Mesa, L. Uranga-Piña, G. Seifert, J. Phys. Chem. C **120**, 437 (2016)
- [12] F. Rodríguez-Hernández, D. C. Tranca, A. Martínez-Mesa, L. Uranga-Piña, G. Seifert, J. Phys. Chem. C **120**, 25851 (2016)
- [13] R. Moradi, K. M. Groth, Int. J. Hydrog. Energy **44**, 12254 (2019)
- [14] A. Martínez-Mesa, S. N. Yurchenko, S. Patchkovskii, T. Heine, G. Seifert, J. Chem. Phys. **135**, 214701 (2011)
- [15] A. Martínez-Mesa, L. Zhechkov, S. N. Yurchenko, T. Heine, G. Seifert, J. Rubayo-Soneira, J. Phys. Chem. C **116**, 19543 (2012)