

# MÁSTER UNIVERSITARIO EN INGENIERÍA ENERGÉTICA SOSTENIBLE

## TRABAJO FIN DE MÁSTER

### ***ANÁLISIS DE CICLO DE VIDA DE BATERÍAS DE SODIO: ALTERNATIVA SOSTENIBLE DE ALMACENAMIENTO DE ENERGÍA***

**Estudiante**  
**Director/Directora**  
**Departamento**  
**Curso académico**

*Rey Aguilera, Irene*  
*Lizundia Fernandez, Erlantz*  
*Expresión Gráfica y Proyectos de Ingeniería*  
*2021-22*

*Bilbao, 26 de junio de 2022*



## RESUMEN

En los últimos años, y debido principalmente al desarrollo de la industria del vehículo eléctrico, el uso de baterías de ion de litio o *lithium-ion batteries* (LIBs) ha experimentado un crecimiento considerable, provocando graves problemas ambientales. En este sentido, se está impulsando la investigación en sistemas de almacenamiento de energía alternativos que sean eficientes electroquímicamente, rentables económicamente y sostenibles ambientalmente. Las baterías de iones de sodio o *sodium-ion batteries* (NIBs) despiertan un interés especial en virtud de diferentes aspectos que las convierten en potentes competidoras de las LIBs; en particular, destaca su carácter sostenible en términos ambientales. El cátodo de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  (NVP) es una opción popular, pero requiere nuevas mejoras para aumentar su rendimiento electroquímico, especialmente en lo que respecta a la capacidad de retención y la vida útil. En este trabajo, se analiza la viabilidad ambiental de diez métodos de síntesis de cátodos de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  mediante la metodología del análisis de ciclo de vida (ACV) de la cuna a la puerta, utilizando el software libre OpenLCA. Se muestran los impactos de 18 indicadores normalizados a 1 kg de cátodo y 1 kWh de capacidad de almacenamiento, atendiendo a enfoques a escala de laboratorio. Se obtienen valores del GWP de 423.9-1380.0  $\text{kg}\cdot\text{CO}_2\text{-eq}\cdot\text{kg}_{\text{cátodo}}^{-1}$  y 539.8-1622.1  $\text{kg}\cdot\text{CO}_2\text{-eq}\cdot\text{kWh}_{\text{cátodo}}^{-1}$  considerando la configuración de media celda de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ . Los aditivos de carbono simples mezclados con  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  proporcionan un buen equilibrio entre el GWP y la capacidad de almacenamiento, aunque la capacidad de retención sacrificada dificulta las estrategias de reutilización. Un análisis de sensibilidad demuestra una reducción de entre el 16.93% y el 38.06% al pasar de un mix energético común a otro completamente renovable. Se espera que este trabajo sirva de base para lograr avances en el desarrollo de cátodos sostenibles más allá del ión de litio.

## ABSTRACT

In recent years, and mainly due to the development of the electric vehicle industry, the use of lithium-ion batteries (LIBs) has experienced considerable growth, causing serious environmental problems. In this regard, research into alternative energy storage systems that are electrochemically efficient, economically cost-effective and environmentally sustainable is being promoted. Sodium-ion batteries (NIBs) are of particular interest due to several aspects that make them strong competitors to LIBs, in particular their environmental sustainability. The  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  (NVP) cathode is a popular choice, but requires further improvements to increase its electrochemical performance, especially in terms of rate capability and lifetime. In this work, the environmental feasibility of ten  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  cathode synthesis methods is analysed by the cradle-to-gate life cycle analysis (LCA) methodology using the free OpenLCA software. The impacts of 18 indicators normalised to 1 kg of cathode and 1 kWh of storage capacity are shown,

based on lab-scale approaches. GWP values of 423.9-1380.0 kg·CO<sub>2</sub>-eq·kg<sub>cathode</sub><sup>-1</sup> and 539.8-1622.1 kg·CO<sub>2</sub>-eq·kWh<sub>cathode</sub><sup>-1</sup> are obtained considering the Na<sub>3</sub>V<sub>2</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub> half-cell configuration. Single carbon additives mixed with Na<sub>3</sub>V<sub>2</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub> provide a good balance between GWP and storage capacity, although the retention of sacrificed capacity hinders reuse strategies. A sensitivity analysis shows a reduction of between 16.93% and 38.06% when switching from a common to a fully renewable energy mix. This work is expected to serve as a basis for advances in the development of sustainable cathodes beyond lithium ion.

## LABURPENA

Azken urteotan, eta batez ere ibilgailu elektrikoaren industriaren garapenaren ondorioz, litio-ioizko baterien (LIB) erabilera nabarmen hazi da, ingurumen-arazo larriak eraginez. Zentzu horretan, elektrokimikoki eraginkorrak, ekonomikoki errentagarriak eta ingurumenaren aldetik jasagarriak diren energia biltegitratzeko sistema alternatiboen ikerketa sustatzen ari da. Sodio-ioizko bateriek (NIB) interes berezia pizten dute LIBen egokiak indartsuak bihurtzen dituzten alderdi ezberdinengatik. Na<sub>3</sub>V<sub>2</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub> (NVP) katodoa ezaguna da, baina hobekuntza gehiago behar ditu bere errendimendu elektrokimikoa hobetzeko, batez ere kargatze-abiadura eta bizitzairaupenari dagokionez. Lan honetan, 10 Na<sub>3</sub>V<sub>2</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub> katodoen sintesi metodoen ingurumen-bideragarritasuna aztertzen da *cradle-to-gate* bizi-zikloaren analisiaren metodologiaren bidez. Horretarako, OpenLCA software librea erabili da. 1 kg katodo eta 1 kWh biltegitratze-ahalmenarekin normalizatutako 18 adierazleren inpaktuak erakusten dira, laborategiko eskalan planteamenduak kontuan hartuta. GWP balioak 423.9-1380.0 kg·CO<sub>2</sub>-eq·kg eta 539.8-1622.1 kg·CO<sub>2</sub>-eq·kWh Na<sub>3</sub>V<sub>2</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub> erdi-zelula konfigurazioa kontuan hartuta lortzen dira. Na<sub>3</sub>V<sub>2</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub>-rekin nahasten diren karbono gehigarri sinpleek berotegi efektu eta biltegitratze-ahalmenaren arteko oreka ona eskaintzen dute. Sentsibilitate-analisiak %16.93 eta %38.06 arteko murrizketa erakusten du ohiko konfigurazio energetikotik guztiz berriztagarria den energia batera igarotzea. Lanak litio-ioiaz haratago katodo jasagarrien garapenean aurrera egiteko oinarri gisa balioko duela espero da.



# ÍNDICE

ÍNDICE DE FIGURAS .....	i
ÍNDICE DE GRÁFICAS .....	ii
ÍNDICE DE TABLAS .....	ii
LISTA DE ACRÓNIMOS .....	iv
1. INTRODUCCIÓN .....	1
2. CONTEXTO .....	3
3. OBJETIVOS .....	8
4. BENEFICIOS .....	9
5. ESTADO DEL ARTE .....	10
6. METODOLOGÍA .....	13
6.1. Análisis de ciclo de vida.....	15
6.2. OpenLCA .....	20
7. ANÁLISIS DE ALTERNATIVAS .....	25
8. SOLUCIÓN PROPUESTA.....	26
9. RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....	27
9.1. GPW .....	30
9.2. Categorías de impacto ReCiPe 2016 <i>Mindpoint</i> (H).....	31
9.3. Impacto ambiental y rendimiento electroquímico.....	33
9.4. Análisis de sensibilidad.....	38
10. PLANIFICACIÓN DEL PROYECTO .....	40
11. COSTE DEL PROYECTO .....	45
12. CONCLUSIONES .....	46
REFERENCIAS .....	48
ANEXO: INVENTARIOS .....	55

## ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Consumo de energía primaria a nivel mundial en Exajulios (EJ). Fuente: (bp, 2021). . . . .	3
Figura 2. Diagrama esquemático de una batería de ión de sodio. Fuente: (Galcerán, 2021). . . . .	6
Figura 3. Esquema de los cátodos de $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ analizados. Fuente: (Rey et al., 2022). . . . .	12
Figura 4. Concepto de la perspectiva de un análisis de Ciclo de Vida y Fases que se tienen en cuenta. Fuente: (Ihobe, Sociedad Pública de Gestión Ambiental, 2009). . . . .	15
Figura 5. Sistema de producto y procesos unitarios. Fuente: (Rey, 2021). . . . .	16
Figura 6. Etapas de un ACV. Fuente: (AENOR, 2006). . . . .	17
Figura 7. Esquema de la Fase de EICV según la norma ISO 14040. Fuente: (Ihobe, Sociedad Pública de Gestión Ambiental, 2009). . . . .	19
Figura 8. Entorno de OpenLCA. . . . .	20
Figura 9. Inserción de una nueva base de datos en OpenLCA. . . . .	21
Figura 10. Colecciones dentro de una base de datos y ejemplo de proceso con sus entradas y sus salidas en OpenLCA. . . . .	22
Figura 11. Último proceso del sistema y función habilitada para crear un <i>product system</i> en OpenLCA. . . . .	23
Figura 12. <i>Product system</i> y función para calcular su impacto en OpenLCA. . . . .	23
Figura 13. Diagrama del <i>product system</i> en OpenLCA. . . . .	24
Figura 14. Terminología relacionada con el alcance de un ACV. Fuente: (Ihobe, Sociedad Pública de Gestión Ambiental, 2009). . . . .	25
Figura 15. Análisis de sensibilidad para el cátodo 3, " <i>μPorous NVP</i> ", considerando 1 kWh de capacidad de almacenamiento como unidad funcional. . . . .	39
Figura 16. Diagrama de Gantt del proyecto. . . . .	44
Figura 17. Diagrama de flujo del proceso de producción del cátodo NVP " <i>Hierarchical carbon-NVP</i> ". Fuente: (Rey et al., 2022). . . . .	55
Figura 18. Diagrama de flujo del proceso de producción del cátodo NVP " <i>rGO-LbL NVP</i> ". Fuente: (Rey et al., 2022). . . . .	58
Figura 19. Diagrama de flujo del proceso de producción del cátodo NVP " <i>μPorous NVP</i> ". Fuente: (Rey et al., 2022). . . . .	61
Figura 20. Diagrama de flujo del proceso de producción del cátodo NVP " <i>N-doped carbon NVP</i> ". Fuente: (Rey et al., 2022). . . . .	64
Figura 21. Diagrama de flujo del proceso de producción del cátodo NVP " <i>N,B-doped carbon/NVP</i> ". Fuente: (Rey et al., 2022). . . . .	68
Figura 22. Diagrama de flujo del proceso de producción del cátodo NVP " <i>La<sup>3+</sup>-doped NVP</i> ". Fuente: (Rey et al., 2022). . . . .	71

Figura 23. Diagrama de flujo del proceso de producción del cátodo NVP "3D NVP nanofiber". Fuente: (Rey et al., 2022).	74
Figura 24. Diagrama de flujo del proceso de producción del cátodo NVP "Nanoplatelet NVP". Fuente: (Rey et al., 2022).	77
Figura 25. Diagrama de flujo del proceso de producción del cátodo NVP "Agarose carbon NVP". Fuente: (Rey et al., 2022).	80
Figura 26. Diagrama de flujo del proceso de producción del cátodo NVP "Glucomannan NVP". Fuente: (Rey et al., 2022).	83

## ÍNDICE DE GRÁFICAS

Gráfica 1. GWP para 1 kg sintetizado de material catódico de $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ de baterías de ión de sodio.	30
Gráfica 2. Valor de la categoría de impacto “escasez de recursos minerales” para 1 kg sintetizado de material catódico de $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ de baterías de ión de sodio.	32
Gráfica 3. Perfiles característicos de carga/descarga galvanostática de las células de $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3/\text{Na}$ . La zona sombreada de color naranja muestra el cálculo gráfico de la densidad de energía gravimétrica, que es el área bajo la curva de tensión frente a la capacidad específica. Fuente: (Rey et al., 2022).	34
Gráfica 4. GWP de las células de $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3/\text{Na}$ normalizado a 1 kWh de capacidad de almacenamiento (sólo catódico).	36
Gráfica 5. GWP para 1 kg sintetizado de material catódico de $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ y para 1 kWh de capacidad de almacenamiento sólo catódico de células de $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ .	37

## ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Categorías de impacto ReCiPe 2016 <i>Mindpoint</i> (H).	19
Tabla 2. Inventario de <i>inputs</i> y <i>outputs</i> de materiales y energías necesarios para la síntesis de cátodos de $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ (correspondientes a las cantidades utilizadas en cada uno de los trabajos analizados). Las cantidades se proporcionan en gramos si no se indica lo contrario.	28
Tabla 3. Impacto medioambiental de la fabricación de cátodos de $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ considerando 1 kg de material como unidad funcional.	29
Tabla 4. Rendimiento electroquímico de cátodos de $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ sintetizados en una configuración de media celda de $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3/\text{Na}^a$ .	35
Tabla 5. Hitos del proyecto.	43
Tabla 6. Coste del proyecto.	45
Tabla 7. Modelado del cátodo NVP "Hierarchical carbon-NVP".	57

Tabla 8. Modelado del cátodo NVP " <i>rGO-LbL NVP</i> " .....	60
Tabla 9. Modelado del cátodo NVP " <i>μPorous NVP</i> " .....	63
Tabla 10. Modelado del cátodo NVP " <i>N-doped carbon NVP</i> " .....	67
Tabla 11. Modelado del cátodo NVP " <i>N,B-doped carbon/NVP</i> " .....	70
Tabla 12. Modelado del cátodo NVP " <i>La<sup>3+</sup>-doped NVP</i> " .....	73
Tabla 13. Modelado del cátodo NVP " <i>3D NVP nanofiber</i> " .....	76
Tabla 14. Modelado del cátodo NVP " <i>Nanoplatelet NVP</i> " .....	79
Tabla 15. Modelado del cátodo NVP " <i>Agarose carbon NVP</i> " .....	82
Tabla 16. Modelado del cátodo NVP " <i>Glucomannan NVP</i> " .....	85
Tabla 17. La producción de 1 kg de <i>Acetylacetonate</i> se ha obtenido de (sólo se muestran los <i>inputs</i> ):.....	86
Tabla 18. La producción de 1 kg de <i>Ammonium hydrogen borate</i> se ha obtenido de (sólo se muestran los <i>inputs</i> ): .....	86
Tabla 19. La producción de 1 kg de GO se ha obtenido de (sólo se muestran los <i>inputs</i> ):.....	86
Tabla 20. La producción de 1 kg de <i>Lanthanum(III) nitrate</i> se ha obtenido de (sólo se muestran los <i>inputs</i> ): .....	86
Tabla 21. La producción de 1 kg de <i>Sodium acetate</i> se ha obtenido de (sólo se muestran los <i>inputs</i> ):.....	87
Tabla 22. La producción de 1 kg de <i>Vanadium pentoxide</i> se ha obtenido de (sólo se muestran los <i>inputs</i> ):.....	87
Tabla 23. La producción de 1 kg de <i>Ammonium metavanadate</i> se ha obtenido de (sólo se muestran los <i>inputs</i> ): .....	87
Tabla 24. La producción de 1 kg de <i>Vanadium (III) acetylacetonate</i> se ha obtenido de (sólo se muestran los <i>inputs</i> ): .....	87
Tabla 25. La producción de 1 kg de <i>Potassium fluoride</i> se ha obtenido de (sólo se muestran los <i>inputs</i> ):.....	88
Tabla 26. La producción de 1 kg de <i>Chloroethylene carbonate (CEC)</i> se ha obtenido de (sólo se muestran los <i>inputs</i> ): .....	88
Tabla 27. La producción de 1 kg de <i>Fluoroethylene carbonate (FEC)</i> se ha obtenido de (sólo se muestran los <i>inputs</i> ): .....	88
Tabla 28. La producción de 1 kg de <i>Propylene carbonate (PEC)</i> se ha obtenido de (sólo se muestran los <i>inputs</i> ): .....	88

## LISTA DE ACRÓNIMOS

<b>Acrónimo</b>	<b>Significado</b>
ACV	Análisis de ciclo de vida
CRM	<i>Critical Raw Material</i>
EICV	Evaluación del impacto ambiental del ciclo de vida
ICV	Inventario de ciclo de vida
ISO	<i>International Organization for Standardization</i>
LCA	<i>Lyfe cycle assessment</i>
LIB	<i>Lithium-ion battery</i>
NASICON	<i>Sodium (Na) Super Ionic CONductor</i>
NIB	<i>Sodium-ion battery</i>
NVP	$\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$
TGA	<i>Thermal gravimetric analysis</i>



# 1. INTRODUCCIÓN

El campo del almacenamiento de energía comprende los sistemas, las tecnologías y los métodos para conservar la energía producida y liberarla cuando sea necesario. Más concretamente, los sistemas de almacenamiento electroquímico se basan en el almacenamiento de la energía eléctrica a través de su conversión en energía química. Estos sistemas son elementos básicos para las energías renovables, los dispositivos electrónicos y los vehículos eléctricos.

En los últimos años, y debido principalmente al impulso del vehículo eléctrico, la utilización de sistemas electroquímicos de almacenamiento de energía ha experimentado un rápido crecimiento (Lv et al., 2018).

En este sentido, se han comercializado diferentes modelos de baterías que atienden a las necesidades técnicas y económicas, pero que no destacan por respetar los principios de sostenibilidad y economía circular. Las baterías de ion de litio o *lithium-ion batteries* (LIBs) han proporcionado una de las alternativas tecnológicas más atractivas y tradicionalmente seleccionadas a escala global, pero incluyen componentes tóxicos, materiales escasos y metales pesados de difícil reciclaje (Sun et al., 2020), presentándose en discordancia con los principios de sostenibilidad y economía circular.

Dentro de este marco, las baterías eficientes electroquímicamente, rentables económicamente y sostenibles ambientalmente, comienzan a recibir una mayor atención en el escenario actual, pudiendo despejar el camino hacia el modelo de economía circular.

Entre las diferentes posibilidades disponibles, las baterías de iones de sodio o *sodium-ion batteries* (NIBs) despiertan un interés especial en virtud de diferentes aspectos que las convierten en potentes competidoras de las LIBs, como la abundancia y abaratamiento de los diferentes materiales que las componen, las similitudes químicas y tecnológicas con las LIBs, y su carácter sostenible en términos ambientales.

Como componente crítico de la batería que determina su rendimiento electroquímico (Liu et al., 2016), se han desarrollado y analizado diversos materiales de cátodo para que las NIBs sean competitivas frente a las LIBs. Entre ellos, el cátodo de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  (NVP) es una opción popular. Aunque recientemente se ha anunciado la competitividad ambiental de varios cátodos de NIBs, no se ha dedicado ningún trabajo a analizar específicamente los cátodos de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  (Peters et al., 2021).

Considerando estas cuestiones y las acciones dentro del marco de la economía circular para fomentar el desarrollo de la industria de baterías ambientalmente sostenibles, se hace necesaria la evaluación, en esta línea, de la fabricación de cátodos de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ .

En este trabajo, se cuantifican, analizan y comparan exhaustivamente los impactos ambientales derivados de la síntesis de los materiales catódicos de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  diseñados para mostrar un mejor rendimiento electroquímico. Se han seleccionado diez cátodos de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  del estado de la técnica a escala de laboratorio para ofrecer una visión general representativa de las alternativas actualmente disponibles. A tal efecto, se recurre al método del análisis de ciclo de vida (ACV) o *life cycle assessment* (LCA), una herramienta de gestión ambiental que permite determinar los aspectos ambientales e impactos potenciales asociados a un producto. Para ello, se ha utilizado el software libre OpenLCA junto con la base de datos ecoinvent 3.8.

Los sistemas de almacenamiento electroquímico poseen el potencial de contribuir de manera importante a la implantación de la energía sostenible, constituyéndose como un elemento esencial en la transición energética. Así, el beneficio general de este trabajo consiste proporcionar apoyo a los desarrolladores de baterías y ayudar a los futuros avances en el desarrollo de cátodos sostenibles aplicados en tecnologías de almacenamiento de energía más allá del ión de litio, tan extendido en la actualidad, favoreciendo así el progreso hacia un sistema más sostenible.

## 2. CONTEXTO

El panorama al que venimos asistiendo de consumo desmedido de recursos y producción excesiva de residuos hace difícilmente sostenible el sistema económico actual. Nuestros hábitos de consumo, sumidos en la línea de la “moda rápida”, no permiten agotar el ciclo de vida útil de los productos. En este sentido, la economía circular propone un cambio de paradigma. Se basa en implementar un nuevo modelo económico fundamentado en el principio de cerrar el ciclo de vida, cuyo objetivo consiste en maximizar los recursos disponibles, reduciendo su consumo y reintroduciéndolos en el ciclo productivo, creando valor cuando los bienes llegan al final de su vida útil, así como en reducir la generación de residuos al mínimo y aprovechar aquellos cuya generación no ha sido posible evitar (Rey, 2021).

En el ámbito energético, la generación a partir de renovables (eólica, solar, bioenergía y geotermia, y excluyendo la hidroeléctrica) registró el mayor aumento de su historia en el año 2020 (358 TWh), debido al incremento de la generación eólica (173 TWh) y solar (148 TWh) (bp, 2021). Sin embargo, los combustibles fósiles siguen siendo los más consumidos a escala global; son elementos claves en el avance de las economías en desarrollo y en el mantenimiento de las más desarrolladas. De este sistema energético se deriva un grave problema a solucionar en un futuro lo más próximo posible: las emisiones de CO<sub>2</sub>.

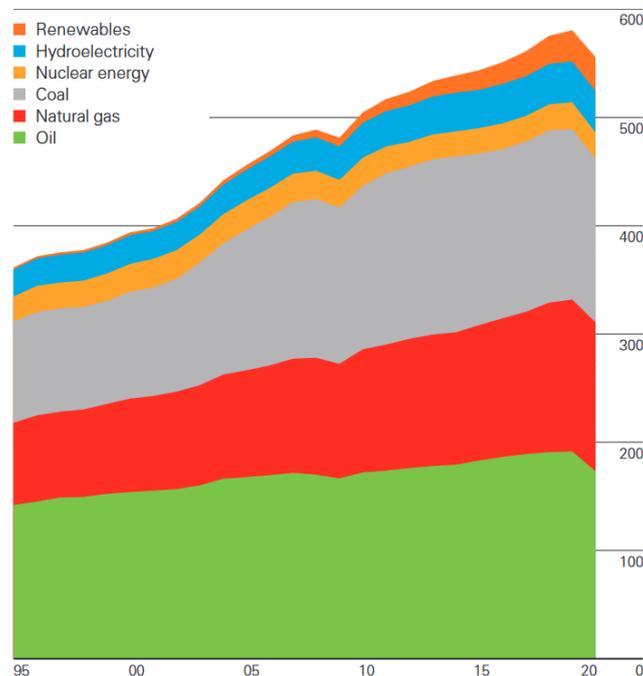


Figura 1. Consumo de energía primaria a nivel mundial en Exajulios (EJ). Fuente: (bp, 2021).

En la esfera legislativa, y a nivel comunitario, se produce un punto de inflexión en la política comunitaria de residuos con la aprobación de la Directiva 2008/98/CE, conocida como Directiva Marco de Residuos (DMR), que dota de un marco jurídico para controlar el ciclo de los residuos, desde su producción hasta su tratamiento final.

En el año 2015, la Comisión Europea (CE) presenta *Cerrar el círculo: un plan de acción de la UE para la economía circular*, un plan de acción específico en materia de economía circular, ligado a los objetivos de desarrollo sostenible de la Agenda 2030 de la ONU. En el año 2018, la CE aprueba un nuevo paquete con propuestas legislativas revisadas con el propósito de que los consumidores y las empresas puedan alcanzar, a largo plazo, los objetivos en materia de economía circular.

En el año 2019, la Comisión Europea presenta el Pacto Verde Europeo o *the European Green Deal*, una “nueva estrategia de crecimiento destinada a transformar la UE en una sociedad equitativa y próspera, con una economía moderna, eficiente en el uso de los recursos y competitiva, en la que no habrá emisiones netas de gases de efecto invernadero en 2050 y el crecimiento económico estará disociado del uso de los recursos”. Dentro de este plan, se destaca la necesidad de descarbonización del sistema energético de la UE como elemento fundamental para alcanzar los objetivos climáticos para 2030 y la estrategia de neutralidad en emisiones de carbono para 2050, favoreciendo la transición hacia una producción energética limpia. Para cumplir estos objetivos, los países de la UE debían implantar un plan nacional integrado de energía y clima (PNIEC) de 10 años para el período 2021-2030, que definiera cómo abordar cinco ámbitos: la eficiencia energética, las energías renovables, la reducción de las emisiones de gases de efecto invernadero, las interconexiones y la investigación e innovación.

Posteriormente, en el año 2020, la Comisión Europea presenta *Un nuevo Plan de Acción de Economía Circular para una Europa más limpia y competitiva*.

A nivel estatal, la Estrategia Española de Economía Circular (EEEC), España Circular 2030, se alinea con los dos planes de acción de economía circular de la Unión Europea, con el Pacto Verde Europeo y con los objetivos de desarrollo sostenible de la Agenda 2030, contribuyendo así a los esfuerzos por lograr una economía sostenible, descarbonizada, eficiente en el uso de los recursos y competitiva.

La Ley 7/2021, de 20 de mayo, de cambio climático y transición energética, establece los siguientes objetivos mínimos: reducir en el año 2030 las emisiones de gases de efecto invernadero del conjunto de la economía española en, al menos, un 23 % respecto del año 1990; alcanzar en el año 2030 una penetración de energías de origen renovable en el consumo de energía final de, al menos, un 42 %; alcanzar en el año 2030 un sistema eléctrico con, al menos, un 74 % de generación a partir de energías de origen renovables; y mejorar la eficiencia energética

disminuyendo el consumo de energía primaria en, al menos, un 39.5 %, con respecto a la línea de base conforme a normativa comunitaria. Cumpliendo con lo establecido por la UE, España también presentó el Plan Nacional de Energía y Clima 2021-2030 (PNIEC).

A nivel autonómico, la CAPV adopta la Estrategia de Economía Circular de Euskadi 2030, que fija tres objetivos estratégicos: aumentar en un 30% la productividad material; aumentar en un 30% la tasa de uso de material circular; y reducir en un 30% la tasa de generación de residuos por unidad de PIB. En materia de energía, pretendiendo cumplir con los objetivos comunitarios, se desarrolla la Ley 4/2019, de 21 de febrero, de Sostenibilidad Energética de la Comunidad Autónoma Vasca.

Bajo esta creciente preocupación acerca de la importancia de la protección ambiental y los impactos asociados a la fabricación y el consumo de diferentes productos, así como la pretensión de alcanzar un sistema energético sostenible, sumado todo ello al paradigma legislativo, se ha impulsado el desarrollo de nuevos métodos para comprender, reducir y evitar, de una manera más eficiente, los impactos ambientales derivados.

El análisis de ciclo de vida (ACV) es una de las herramientas de gestión ambiental utilizadas para este propósito. Se trata de una metodología que permite evaluar los aspectos ambientales y los impactos potenciales asociados a lo largo de todo el ciclo de vida de un producto, desde la extracción y la adquisición de la materia prima, pasando por la fabricación, la distribución y el uso, hasta su disposición final (de la cuna a la tumba).

Las baterías secundarias se consideran elementos clave en el panorama de la transición hacia la energía verde y están destinadas a desempeñar un papel crucial en la electrificación y la descarbonización de la economía (Knobloch et al., 2020). Las baterías de ion de litio o *lithium-ion batteries* (LIBs) se constituyen como una de las alternativas mayormente utilizadas a nivel global como sistema electroquímico de almacenamiento de energía por sus destacables características. Sin embargo, de su extendida y creciente utilización se deriva un importante problema ambiental que afectará en un futuro relativamente cercano y que radica en la presencia en las LIBs desechadas de materiales peligrosos y de metales pesados, y en el rápido aumento en la demanda de metales críticos.

En este sentido, las baterías eficientes electroquímicamente, rentables económicamente y sostenibles ambientalmente, comienzan a recibir una mayor atención en el escenario actual de contaminación ambiental, escasez de materias primas y utilización incontrolada de combustibles fósiles (Piątek et al., 2021; Titirici, 2021). Estas baterías sostenibles pueden despejar el camino hacia el modelo de economía circular (Larcher & Tarascon, 2015).

Entre las diferentes posibilidades disponibles, las baterías de iones de sodio o *sodium-ion batteries* (NIBs) despiertan un interés especial. El desajuste existente entre la oferta y la demanda de materias primas de las LIBs podría reducirse en gran medida limitando la necesidad de materias primas críticas o *critical raw materials* (CRMs), como el cobalto, el litio, el manganeso o el grafito. Gracias al abaratamiento de los materiales activos del cátodo y a la ausencia del cobre en el colector de corriente, las NIBs son claramente más baratas que las LIBs (Peters et al., 2019). Este menor coste, junto con las similitudes químicas y tecnológicas con las baterías convencionales basadas en iones de litio, facilitan la sustitución de las LIBs por las NIBs a medio plazo. Además, la sostenibilidad medioambiental de las NIBs fue confirmada por Peters et al. (2016), que utilizó la metodología de análisis de ciclo de vida (ACV) para concluir que, en comparación con las LIBs, las NIBs presentan impactos menores en el calentamiento global, en el potencial de agotamiento de los fósiles, en la eutrofización del agua dulce y en el potencial de toxicidad humana por 1 kWh de capacidad de almacenamiento. A pesar de estos beneficios, las NIBs poseen densidades energéticas específicas más bajas, lo que limita su aplicación práctica (Choi & Aurbach, 2016; Luo et al., 2016).

Las NIBs poseen una estructura similar a LIBs; están compuestas básicamente por un cátodo, un ánodo, un electrolito y un separador que evita el contacto entre el cátodo y el ánodo y, por tanto, el cortocircuito de la celda.

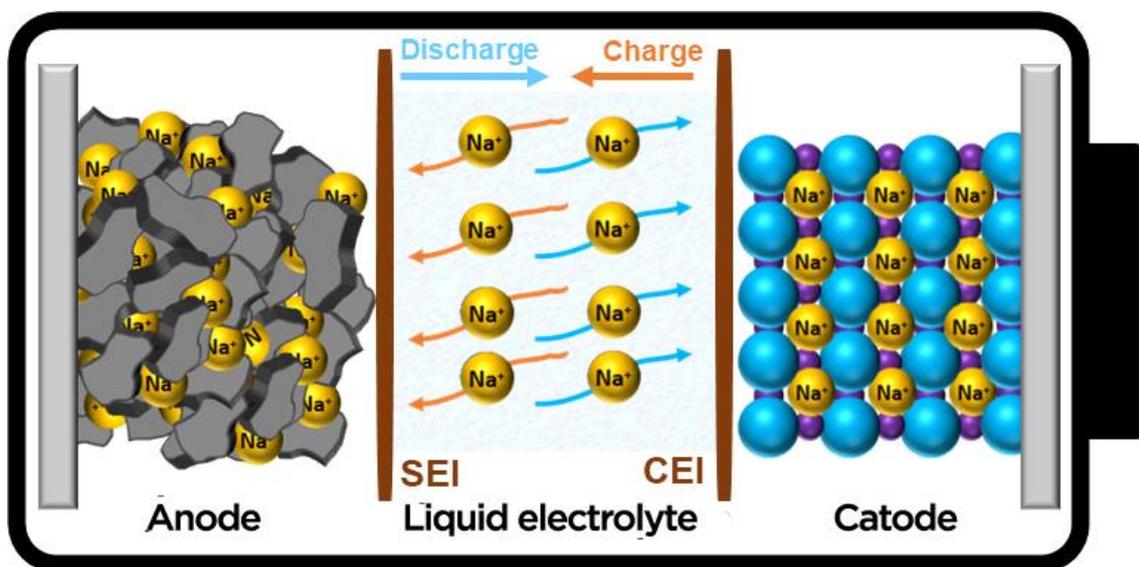


Figura 2. Diagrama esquemático de una batería de ión de sodio. Fuente: (Galcerán, 2021).

El cátodo es un componente crítico de la batería que determina su rendimiento electroquímico (Liu et al., 2016). Se han desarrollado diversos métodos de síntesis de materiales de cátodo para

que las NIBs sean competitivas frente a las LIBs. Entre ellos, el cátodo de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  (NVP) es una opción popular.

En general, los enfoques sintéticos de materiales catódicos se han centrado principalmente en la mejora de la conductividad electrónica y la estabilidad estructural del  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ . Sin embargo, no están diseñados según los principios de la química verde y, a menudo, implican un proceso con reactivos perjudiciales para el medio ambiente, así como grandes cantidades de energía. Además, el  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  contiene vanadio y fósforo, que son CRMs.

Considerando estas cuestiones y las acciones dentro del marco de economía circular para fomentar el desarrollo de industrias de baterías ambientalmente sostenibles, se hace necesaria la evaluación de la sostenibilidad ambiental de la fabricación de cátodos de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ . La metodología del ACV puede aplicarse a ese fin; la divulgación de los resultados obtenidos permite seleccionar el cátodo de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  preferido desde el punto de vista ambiental y proporcionar también información para la posible reducción de los impactos mediante la aplicación de estrategias de diseño ecológico (Civancik-Uslu et al., 2019).

### **3. OBJETIVOS**

El objetivo principal del presente trabajo consiste, básicamente, en realizar un análisis de ciclo de vida de diez diseños de materiales catódicos de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  aplicados en NIBs, representativos del estado del arte, publicados todos a partir de 2015.

Como objetivos secundarios o derivados, se destacan el avance en un conocimiento más profundo sobre el funcionamiento del software OpenLCA, utilizado para la realización de los análisis de ciclo de vida, y el desarrollo de un estudio que pueda servir de base para futuras investigaciones relacionadas con los sistemas de almacenamiento electroquímicos, facilitando la transición hacia un sistema energético sostenible y un modelo basado en la economía circular.

## 4. BENEFICIOS

Según se comenta anteriormente, las NIBs despiertan un interés especial como alternativa sostenible a las LIBs en el camino hacia la economía circular.

Aunque recientemente se ha anunciado la competitividad ambiental de varios cátodos de NIBs, no se ha dedicado ningún trabajo a analizar específicamente los cátodos de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ . En este trabajo se cuantifican, analizan y comparan exhaustivamente los impactos ambientales derivados de la síntesis de diez materiales catódicos de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  diseñados para mostrar un mejor rendimiento electroquímico a escala de laboratorio, con el fin de ofrecer una visión general representativa de las alternativas actualmente disponibles.

De esta manera, el principal beneficio de este trabajo consiste en proporcionar apoyo a los desarrolladores de baterías y ayudar a los futuros avances en el desarrollo de cátodos sostenibles aplicados en tecnologías de almacenamiento de energía más allá del ión de litio, tan extendido en la actualidad, favoreciendo así el progreso hacia un sistema más sostenible.

## 5. ESTADO DEL ARTE

La crisis del petróleo en 1973, iniciada con la decisión de la Organización de Países Árabes Exportadores de Petróleo de embargar el suministro de petróleo a los países que habían apoyado a Israel durante la guerra de Yom Kipur (Europa y Estados Unidos), despertó un interés especial por la metodología del ACV. El aumento en el precio del petróleo puso sobre la mesa los problemas en cuanto a la dependencia energética de los países desarrollados, estimulándose así un debate global sobre la necesidad de impulsar fuentes de energía alternativas y productos sostenibles ambientalmente (Chacón, 2008).

A finales de los años 90, la *International Organization for Standardization* (ISO) inició un gran esfuerzo para la normalización integral de la metodología del ACV, que culminó con el actual conjunto de normas ISO 14040 e ISO 14044.

En la actualidad, esta metodología se emplea extensamente para evaluar el comportamiento ambiental de productos de todo tipo. Más concretamente, a raíz de la problemática derivada del rápido crecimiento en la utilización de sistemas electroquímicos de almacenamiento de energía a causa del desarrollo del vehículo eléctrico, los proyectos de ACV en este sector han aumentado drásticamente. A pesar de la opinión extendida de que los vehículos eléctricos son más respetuosos en términos ambientales que los vehículos con motor de combustión interna, los impactos ambientales se desplazan de la fase de utilización a la fase de fabricación, principalmente de las baterías que llevan incorporadas. De esta manera, se hace evidente la realización de ACV como solución para identificar oportunidades con el fin de mejorar la sostenibilidad ambiental del proceso de fabricación de las baterías.

Matheys et al. (2009) evaluaron los impactos ambientales de diferentes tecnologías de baterías de tracción, como las de plomo-ácido, níquel-cadmio, níquel-hidruro metálico, sodio-cloruro de níquel e iones de litio, y descubrieron que los impactos de las baterías de níquel-cloruro de sodio e iones de litio eran menores que los de las otras baterías. Majeau-Bettez et al. (2011) analizaron los resultados del ACV de las baterías de níquel-hidruro metálico (NiMH), y demostraron que la tecnología de NiMH tenía el mayor impacto ambiental. Kushnir y Sanden (2011) estimaron el consumo de energía de las baterías con diferentes electrodos, demostrando que se consumía más energía durante la fabricación de cátodos y ánodos con nanomateriales, a pesar de tener una vida útil mayor y una eficiencia energética superior a los cátodos y ánodos que no emplean nanomateriales. Yu et al. (2014) realizaron un ACV de las baterías LIB y NiMH, y revelaron que las baterías con una alta densidad energética y una larga esperanza de vida tenían un bajo impacto ambiental. (Wu & Kong, 2018).

Según se comentaba anteriormente, las LIBs son el sistema electroquímico de almacenamiento de energía más atractivo y seleccionado mundialmente en virtud de su alta densidad energética, alto voltaje, buena capacidad de retención, baja tasa de autodescarga, efecto de memoria cero, amplio rango de temperaturas de funcionamiento y larga vida útil (Arshad et al., 2020), pero de su utilización se deriva una grave problemática ambiental.

Entre las diferentes posibilidades disponibles como alternativa prometedora de las LIBs, las NIBs despiertan un interés especial dado el potencial redox de  $E(\text{Na}^+/\text{Na}) = -2.71 \text{ V}$  del sodio, la abundancia natural de este elemento (2.36% en la corteza terrestre) (Park et al., 2020), su bajo precio de  $0.15 \text{ \$}\cdot\text{kg}^{-1}$  (Dühnen et al., 2020) y la posibilidad de utilizar colectores de corriente de aluminio, en lugar del cobre/aluminio necesario para las LIBs (Palomares et al., 2012). A pesar de los diferentes beneficios de las NIBs frente a las LIBs, la menor capacidad teórica de  $1165 \text{ mAh}\cdot\text{g}^{-1}$  del Na frente a los  $3829 \text{ mAh}\cdot\text{g}^{-1}$  del Li se traduce en densidades energéticas específicas más bajas, lo que limita su aplicación práctica (Choi & Aurbach, 2016; Luo et al., 2016).

El cátodo es un componente crítico de la batería que determina su rendimiento electroquímico (Liu et al., 2016). Los materiales catódicos deben permitir el transporte rápido de iones de Na, a la vez que mantienen la estabilidad estructural y evitan la distorsión estructural o el cambio de volumen en el proceso de extracción e inserción de iones de Na (Zeng et al., 2020).

En este sentido, se han desarrollado y analizado diversos materiales de cátodo para que las NIBs sean competitivas frente a las LIBs. Entre ellos, el cátodo de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  (NVP), con un marco NASICON (*sodium (Na) Super Ionic CONductor*) de transporte rápido de  $\text{Na}^+$ , es una opción popular dado su equilibrio entre la capacidad de descarga de  $117.6 \text{ mAh}\cdot\text{g}^{-1}$  y el voltaje de plataforma de  $\sim 3.4 \text{ V}$  (Zhang et al., 2019), superando el rendimiento electroquímico de muchos cátodos de NIBs reportados en la literatura anteriormente. Los prometedores resultados iniciales obtenidos con el  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  han suscitado notables esfuerzos científicos centrados en la mejora de la conductividad electrónica y la estabilidad estructural, con el objetivo de superar las bajas capacidades de descarga (a altas tasas) y la corta vida útil.

Los diferentes enfoques sintéticos desarrollados pueden clasificarse, a grandes rasgos, en la incorporación de diversos materiales carbonosos para mejorar la conductividad eléctrica, la disposición estructural, el dopaje de heteroátomos, la reducción del tamaño de las partículas y la modificación de la morfología para acortar las distancias de transporte del  $\text{Na}^+$  y los electrones, o la incorporación de biopolímeros. Sin embargo, estos enfoques no están diseñados según los principios de la química verde y, a menudo, implican un proceso sintético con reactivos perjudiciales para el medio ambiente e ingentes cantidades de energía. Además, el  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  contiene vanadio y fósforo, incluidos dentro de la lista de CRMs debido a su presión sobre los recursos naturales finitos, los riesgos de la cadena de suministro y la relevancia económica.

En este trabajo, como ejemplos representativos del estado del arte, se han seleccionado diez diseños de materiales catódicos de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  aplicados en NIBs, todos ellos publicados a partir de 2015 y recogidos en la Figura 3 en cuatro grupos de enfoques sintéticos: incorporación de estructuras carbonosas, dopaje de heteroátomos, nanoestructuración e incorporación de biopolímeros.

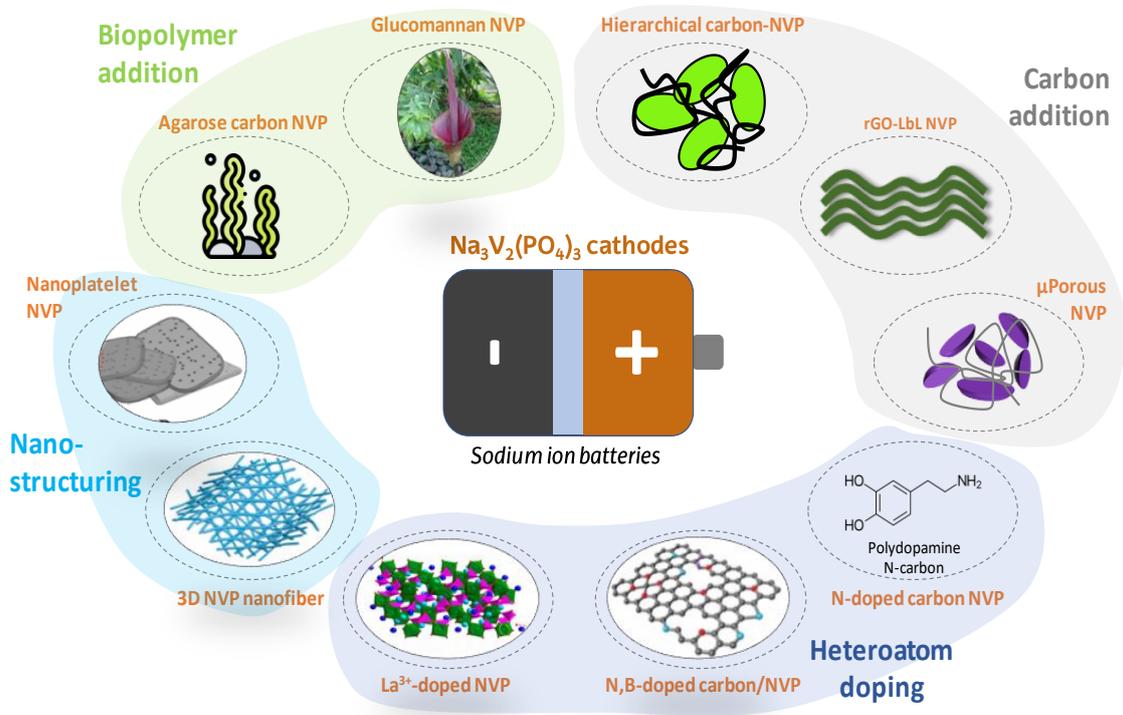


Figura 3. Esquema de los cátodos de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  analizados. Fuente: (Rey et al., 2022).

## 6. METODOLOGÍA

El desarrollo del trabajo se ha basado en los siguientes pasos esenciales:

- Lectura de artículos generales dedicados al análisis de ciclo de vida de NIBs.
- Selección de diez artículos específicos de síntesis de materiales catódicos de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ , en función de la abundancia de datos para realizar el análisis de ciclo de vida de cada uno y del interés del material sintetizado. Estos son:

– **Cátodo 1: Hierarchical carbon-NVP.**

Fang, Y., Xiao, L., Ai, X., Cao, Y., & Yang, H. (2015). Hierarchical carbon framework wrapped  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  as a superior high-rate and extended lifespan cathode for sodium-ion batteries. *Advanced materials*, 27(39), 5895-5900.

– **Cátodo 2: rGO-LbL NVP.**

Xu, Y., Wei, Q., Xu, C., Li, Q., An, Q., Zhang, P., ... & Mai, L. (2016). Layer-by-layer  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  embedded in reduced graphene oxide as superior rate and ultralong-life sodium-ion battery cathode. *Advanced Energy Materials*, 6(14), 1600389.

– **Cátodo 3:  $\mu$ Porous NVP.**

Tao, S., Cui, P., Huang, W., Yu, Z., Wang, X., Wei, S., ... & Chu, W. (2016). Sol-gel design strategy for embedded  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  particles into carbon matrices for high-performance sodium-ion batteries. *Carbon*, 96, 1028-1033.

– **Cátodo 4: N-doped carbon NVP.**

Kim, H., Lim, H., Kim, H. S., Kim, K. J., Byun, D., & Choi, W. (2019). Polydopamine-derived N-doped carbon-wrapped  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  cathode with superior rate capability and cycling stability for sodium-ion batteries. *Nano research*, 12(2), 397-404.

– **Cátodo 5: N,B-doped carbon/NVP.**

Jiang, Y., Zhou, X., Li, D., Cheng, X., Liu, F., & Yu, Y. (2018). Highly reversible Na storage in  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  by optimizing nanostructure and rational surface engineering. *Advanced Energy Materials*, 8(16), 1800068.

– **Cátodo 6:  $La^{3+}$ -doped NVP.**

Bi, L., Li, X., Liu, X., Zheng, Q., & Lin, D. (2019). Enhanced cycling stability and rate capability in a La-doped  $Na_3V_2(PO_4)_3/C$  cathode for high-performance sodium ion batteries. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 7(8), 7693-7699.

– **Cátodo 7: 3D NVP nanofiber.**

Ren, W., Zheng, Z., Xu, C., Niu, C., Wei, Q., An, Q., ... & Mai, L. (2016). Self-sacrificed synthesis of three-dimensional  $Na_3V_2(PO_4)_3$  nanofiber network for high-rate sodium-ion full batteries. *Nano Energy*, 25, 145-153.

– **Cátodo 8: Nanoplatelet NVP.**

Li, X., Wang, S., Tang, X., Zang, R., Li, P., Li, P., ... & Wang, G. (2019). Porous  $Na_3V_2(PO_4)_3/C$  nanoplates for high-performance sodium storage. *Journal of colloid and interface science*, 539, 168-174.

– **Cátodo 9: Agarose carbon NVP.**

Zhang, Q., Wang, W., Wang, Y., Feng, P., Wang, K., Cheng, S., & Jiang, K. (2016). Controllable construction of 3D-skeleton-carbon coated  $Na_3V_2(PO_4)_3$  for high-performance sodium ion battery cathode. *Nano Energy*, 20, 11-19.

– **Cátodo 10: Glucomannan NVP.**

Zhang, Y., Zhu, X., Kai, D., Jiang, Y., Yan, Q., & Chen, B. (2021). Konjac glucomannan biopolymer as a multifunctional binder to build a solid permeable interface on  $Na_3V_2(PO_4)_3/C$  cathodes for high-performance sodium ion batteries. *Journal of Materials Chemistry A*, 9(15), 9864-9874.

- Realización de los inventarios de ciclo de vida para los métodos propuestos en los diez trabajos de síntesis de materiales catódicos de  $Na_3V_2(PO_4)_3$  listados anteriormente.
- Inserción de procesos en OpenLCA, un software libre y gratuito para el análisis de ciclo de vida que cuenta con numerosas funcionalidades.
- Recogida, interpretación y análisis de los datos proporcionados por OpenLCA.
- Redacción del documento final.

Cabe señalar que, dentro del desarrollo del proyecto, no ha sido necesario el aprendizaje de OpenLCA. El software ha sido empleado en anteriores proyectos en los que se incluyeron tareas específicas de formación.

Los nombres de los diferentes cátodos se han conservado en inglés para facilitar el tratamiento de la información relativa a los trabajos. De igual manera, los diagramas de flujo y los inventarios recogen los compuestos con nombres en inglés puesto que la terminología en el software y en la base de datos se encuentra en este idioma.

Este trabajo se ha desarrollado en paralelo con el artículo titulado *Environmental Impact Assessment of Na<sub>3</sub>V<sub>2</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub> Cathode Production for Sodium-Ion Batteries*, publicado el 22 de mayo de 2022 en la revista *Advanced Energy and Sustainability Research*.

### 6.1. Análisis de ciclo de vida

El análisis de ciclo de vida (ACV) o *life cycle assessment (LCA)* es una herramienta que permite evaluar los aspectos ambientales y los impactos potenciales asociados a lo largo de todo el ciclo de vida de un producto, desde la extracción y la adquisición de la materia prima, pasando por la fabricación, la distribución y el uso, hasta su disposición final. Se caracteriza por su enfoque holístico, que destaca la necesidad de la integración total de todos los aspectos que participan en el ciclo de vida completo (Rey, 2021).

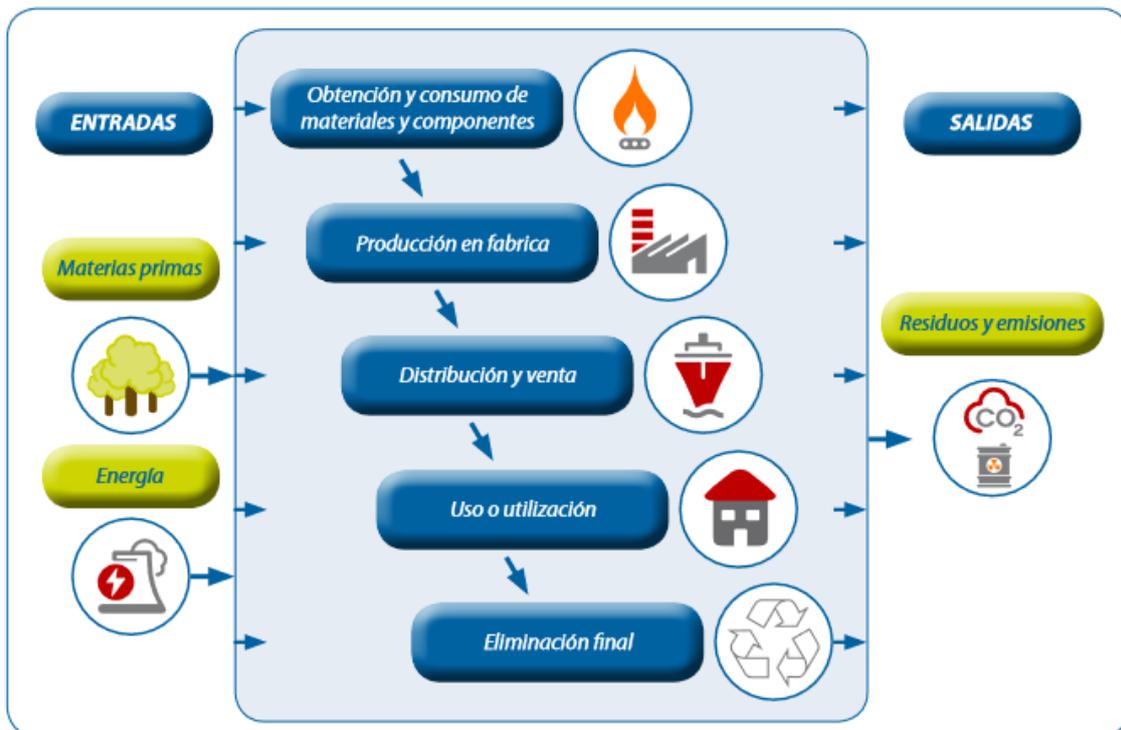


Figura 4. Concepto de la perspectiva de un análisis de Ciclo de Vida y Fases que se tienen en cuenta. Fuente: (Ihobe, Sociedad Pública de Gestión Ambiental, 2009).

El ACV modela el ciclo de vida de un producto como un sistema de producto, fraccionado en diferentes procesos unitarios vinculados entre sí por medio de flujos intermedios, vinculados con

otros sistemas de producto a través de flujos de producto y vinculados con el medio ambiente mediante flujos elementales. Estos flujos elementales comprenden los recursos, las emisiones al aire y los vertidos al suelo y al agua asociados al sistema.

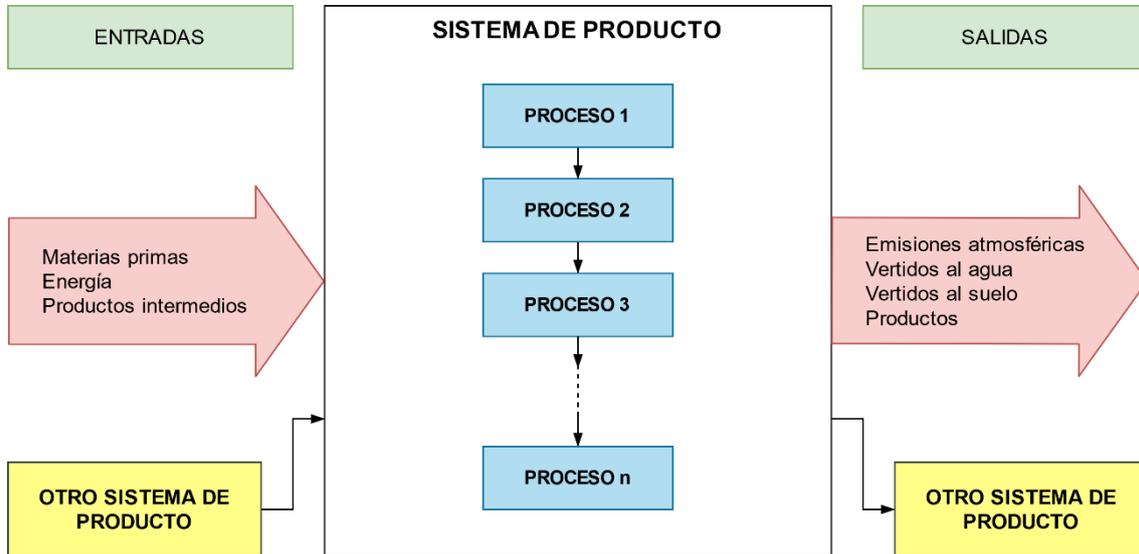


Figura 5. Sistema de producto y procesos unitarios. Fuente: (Rey, 2021).

De esta manera, es necesario recopilar los flujos de entrada (*inputs*), como materias primas, energía y productos intermedios, y los flujos de salida (*outputs*), como emisiones atmosféricas, vertidos al agua, vertidos al suelo y productos, desde y hacia la naturaleza, para obtener unos resultados que manifiesten los impactos ambientales potenciales asociados a dichos flujos. Se fundamenta en un enfoque relativo organizado en torno a una unidad funcional, que define aquello que se está estudiando, de manera que los análisis posteriores son relativos a dicha unidad funcional, fijando una referencia para relacionar las entradas y las salidas del sistema considerado.

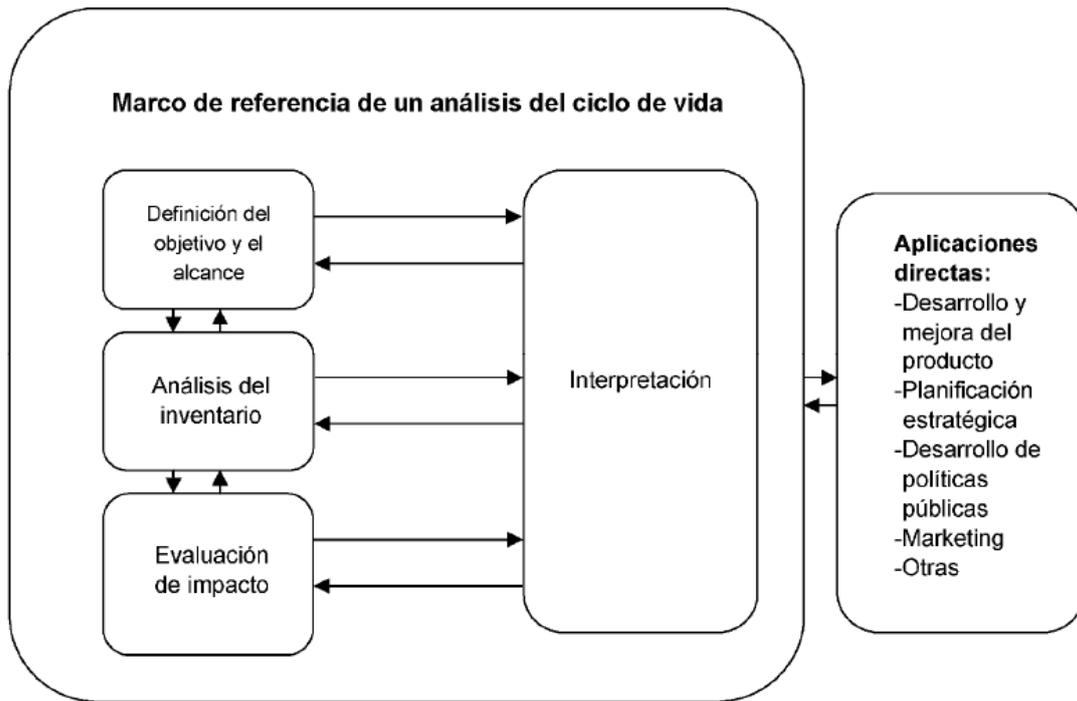


Figura 6. Etapas de un ACV. Fuente: (AENOR, 2006).

Según la norma UNE-EN ISO 14040:2006, y como se observa en la Figura 6, los estudios de ACV se componen de cuatro fases:

1. **Definición del objetivo y el alcance.** Consiste en definir el objetivo y el alcance del estudio realizado en relación con los límites del sistema impuestos, la unidad funcional escogida y los flujos de entrada y de salida dentro del ciclo de vida considerados, así como la calidad a cumplir de los datos obtenidos y los parámetros tecnológicos y de evaluación.
2. **Análisis del inventario de ciclo de vida (ICV).** Consiste en recopilar y cuantificar de entradas y salidas del producto a través de su ciclo de vida.
3. **Evaluación del impacto ambiental del ciclo de vida (EICV).** Consiste conocer y evaluar la magnitud y la significancia de los impactos ambientales potenciales de un sistema del producto a través de todo el ciclo de vida del producto. Esta fase es el núcleo central del ACV y se divide, a su vez, en las siguientes fases:
  - Selección de categorías de impacto, indicadores de categoría y modelos de caracterización. Las categorías seleccionadas representan los impactos ambientales de interés, es decir, para los cuales se desean asignar los resultados del EICV.

- Clasificación. Las sustancias del ICV son asignados a las categorías de impacto correspondientes.
- Caracterización. Tras la clasificación de las sustancias del ICV a las categorías de impacto, se determina la contribución de una sustancia a una categoría en relación con una sustancia de referencia asignada a dicha categoría multiplicando por los factores de caracterización.
- Normalización. Los resultados caracterizados se convierten a unidades globales neutras dividiendo por los factores de normalización, que representan el grado de contribución de cada una de las categorías de impacto al impacto ambiental del sistema.
- Agrupación. Las categorías de impacto se clasifican en grupos más amplios que engloban aquellas categorías de impacto con efectos similares.
- Ponderación. Los resultados caracterizados se convierten a una unidad común multiplicando por los factores de ponderación y se suman obteniendo una puntuación única total del impacto ambiental del sistema.

Las fases de normalización, agrupación y ponderación no son obligatorias, aunque sí recomendadas.

- **Interpretación del ciclo de vida.** Consiste en evaluar los resultados del análisis del ICV y/o de la EICV, en relación con el objetivo y el alcance definidos, para llegar a una serie de conclusiones y recomendaciones.

Durante la EICV, los impactos del sistema se clasifican en diferentes categorías de impacto, transformándolos en indicadores cuantificables y objetivos. Las fases de clasificación y caracterización se pueden realizar bajo una visión *mindpoint*, en la que los impactos son relativos al problema ambiental, o bajo una visión *endpoint*, en la que los impactos son relativos al daño sobre valores tangibles para la sociedad, como el impacto en la salud humana, la biodiversidad y los recursos. Las categorías de impacto consideradas en este estudio se basan en la metodología ReCiPe 2016 *Mindpoint* (H) (Rey, 2021).

Tabla 1. Categorías de impacto ReCiPe 2016 *Mindpoint* (H).

Categoría de impacto	Ud. de referencia
Formación de partículas finas	kg PM2.5-eq.
Escasez de recursos fósiles	kg oil-eq.
Ecotoxicidad del agua dulce	kg 1,4-DCB
Eutrofización del agua dulce	kg P-eq.
Calentamiento global	kg CO <sub>2</sub> -eq.
Toxicidad humana cancerígena	kg 1,4-DCB
Toxicidad humana no cancerígena	kg 1,4-DCB
Radiación ionizante	kBq Co-60-eq.
Uso del suelo	m <sup>2</sup> a crop-eq.
Ecotoxicidad marina	kg 1,4-DCB
Eutrofización marina	kg N-eq.
Escasez de recursos minerales	kg Cu-eq.
Formación de ozono, salud humana	kg NO <sub>x</sub> -eq.
Formación de ozono, ecosistemas terrestres	kg NO <sub>x</sub> -eq.
Agotamiento del ozono estratosférico	kg CFC11-eq.
Acidificación terrestre	kg SO <sub>2</sub> -eq.



Figura 7. Esquema de la Fase de EICV según la norma ISO 14040. Fuente: (Ihobe, Sociedad Pública de Gestión Ambiental, 2009).

## 6.2. OpenLCA

La herramienta utilizada en este trabajo es OpenLCA, un software libre y gratuito para el análisis de ciclo de vida que posee numerosas funcionalidades. En concreto, se ha recurrido la versión OpenLCA 1.10.2 junto con la base de datos ecoinvent 3.8.

En la última década, ecoinvent se ha establecido como líder mundial en la creación de bases de datos de inventario de ciclo de vida, por su relevancia, transparencia, consistencia y fiabilidad. Proporciona una amplia gama de datos de proceso bien documentados para miles de productos, siendo posible tomar decisiones informadas y fundamentadas sobre su impacto ambiental. Los datos que proporcionan pueden utilizarse para diferentes estudios de evaluación ambiental (análisis de ciclo de vida, huella de carbono, declaración ambiental de producto, etc.) y en diferentes herramientas de software (OpenLCA, MS Excel, SimaPro, etc.). A pesar de tratarse de una base de datos de pago, el Grupo de Investigación Life Cycle Thinking de la UPV/EHU encargado del presente estudio cuenta con licencia.

En cuanto a OpenLCA, el primer paso consiste en la vinculación de la base de datos al software para que este pueda trabajar. Las bases de datos se encuentran en unos archivos con la extensión “.zolca”, que se insertan en el software mediante un asistente habilitado para ello.

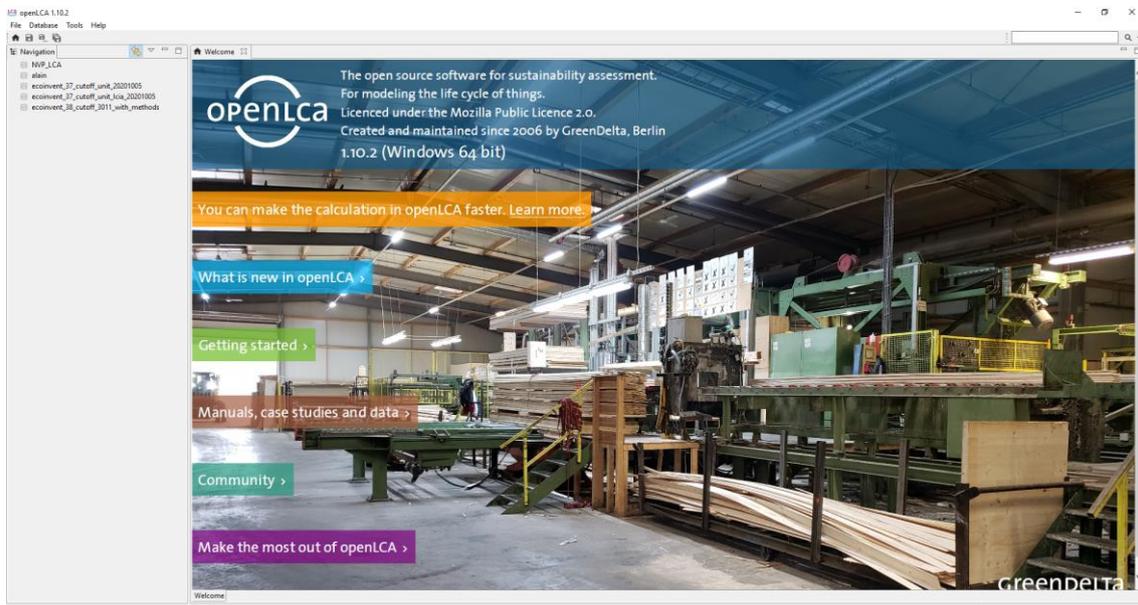


Figura 8. Entorno de OpenLCA.

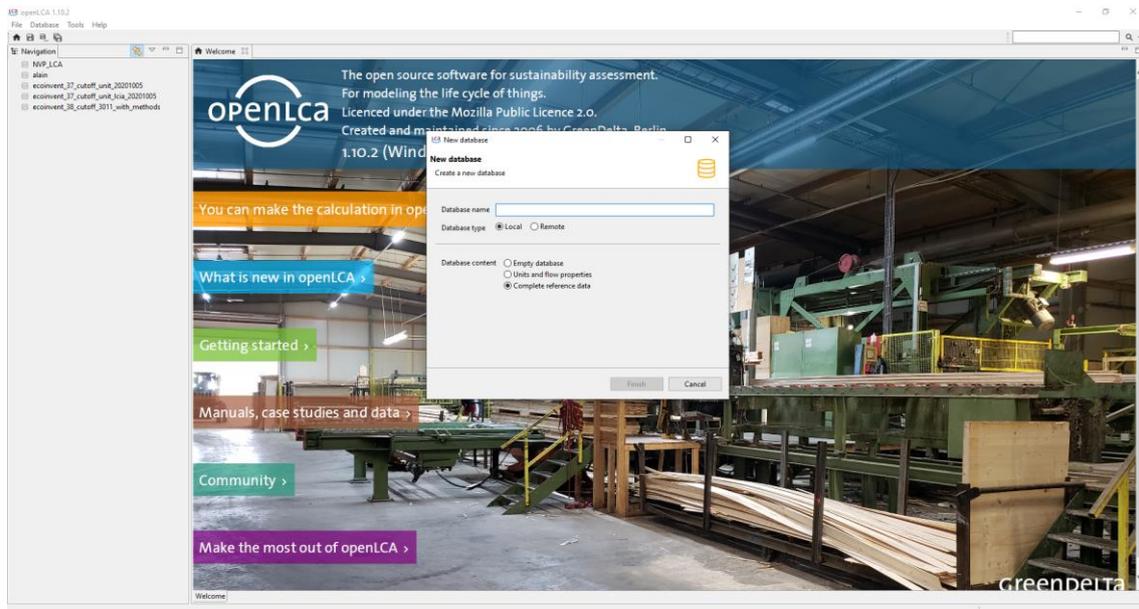


Figura 9. Inserción de una nueva base de datos en OpenLCA.

De la misma manera, es necesario insertar un archivo con la misma extensión “.zolca” que establezca el método para determinar los impactos ambientales de cada una de las categorías de impacto, es decir, la EICV o *life cycle impact assessment* (LCIA).

Para la realización del trabajo, se ha insertado un archivo “.zolca” con la base de datos y los métodos.

Antes de insertar los componentes en el software, y según la metodología ACV, se debe realizar el análisis del inventario de ciclo de vida (ICV), es decir, se deben recopilar y cuantificar de entradas y salidas de los sistemas considerados en base a la unidad funcional considerada. Los cálculos relativos a dicho inventario para los diez métodos de síntesis propuestos se recogen en el ANEXO: INVENTARIOS.

Tras la realización de los inventarios, se insertan los datos en el software. En el entorno de OpenLCA, y dentro de las bases de datos, existen tres colecciones destacables: *product systems*, *processes* y *flows*. En cada uno de los tres métodos propuestos, se desarrollan una serie de procesos (*processes*) con unas entradas y unas salidas (*flows*) ya identificadas en el inventario. En conjunto, estos procesos constituyen el sistema de producto (*product system*) con respecto al cual se evalúa el impacto ambiental del método.

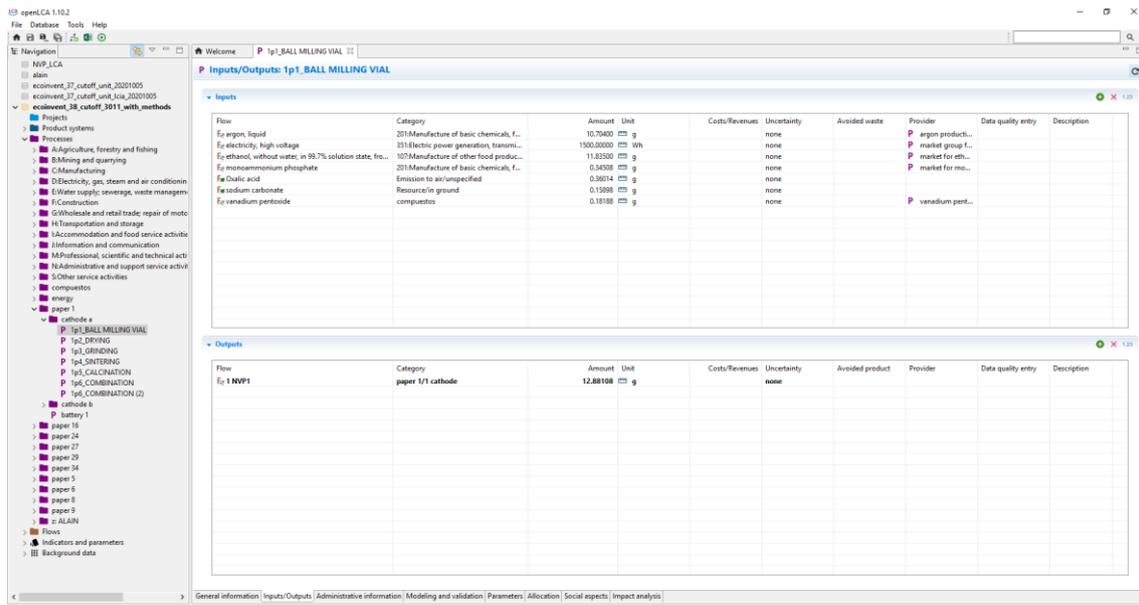


Figura 10. Colecciones dentro de una base de datos y ejemplo de proceso con sus entradas y sus salidas en OpenLCA.

En la Figura 10 se presentan las colecciones que se encuentran dentro de la base de datos mencionadas anteriormente y un ejemplo de un proceso con sus respectivas entradas (*inputs*) y salidas (*outputs*), identificadas y calculadas en el inventario.

Las salidas de unos procesos son las entradas de otros, por lo que los procesos se relacionan entre sí mediante estos *flows*. Tras la creación de los diferentes procesos con sus interrelaciones a través de los flujos que los conectan, se crea un *product system* para el último proceso que constituye el método. Los datos del impacto del *product system* se calculan, como se puede observar en la Figura 12, mediante la función *calculate*, en base a la salida del último proceso, es decir, la salida del sistema, que se corresponde con el cátodo sintetizado.

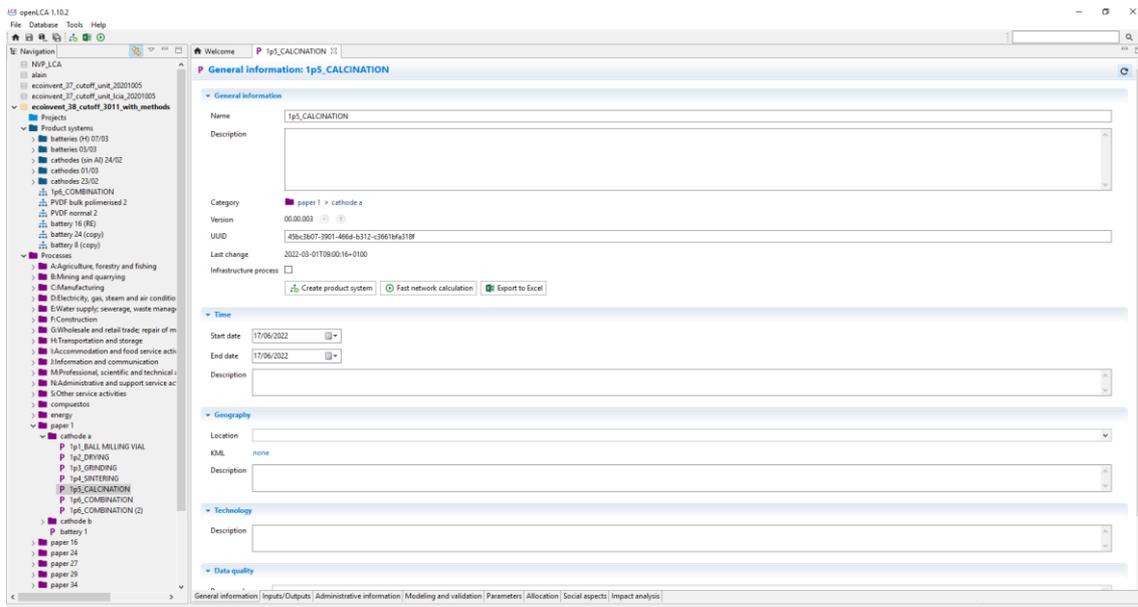


Figura 11. Último proceso del sistema y función habilitada para crear un *product system* en OpenLCA.

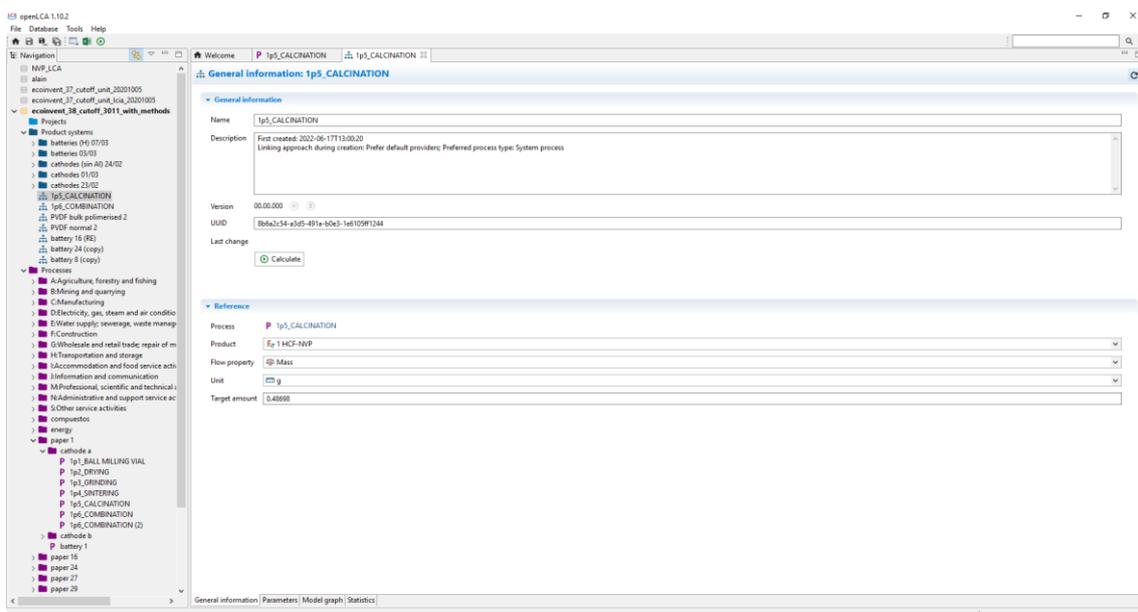


Figura 12. *Product system* y función para calcular su impacto en OpenLCA.

Tras la creación del *product system*, el software nos permite crear un diagrama del proceso global en el que es posible observar las conexiones entre los procesos unitarios y las entradas y salidas de cada uno de ellos.

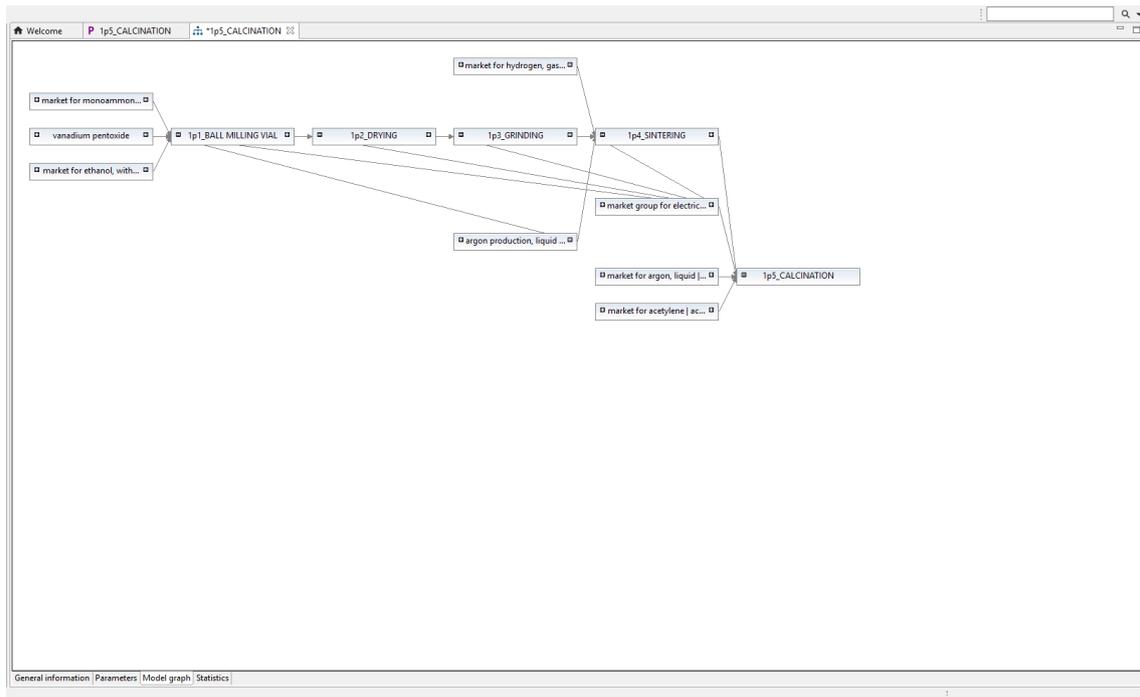


Figura 13. Diagrama del *product system* en OpenLCA.

OpenLCA concede la opción de exportar los resultados a un archivo Excel, que se utiliza como base para la gestión, análisis y comparación de los datos de los tres métodos propuestos.

## 7. ANÁLISIS DE ALTERNATIVAS

En función del alcance definido, de la evaluación realizada, del alcance definido o de los impactos ambientales a estudiar, existen diferentes formas de llevar a cabo un ACV: de la cuna a la tumba, de la cuna a la puerta, de la puerta a la puerta y de la cuna a la cuna.

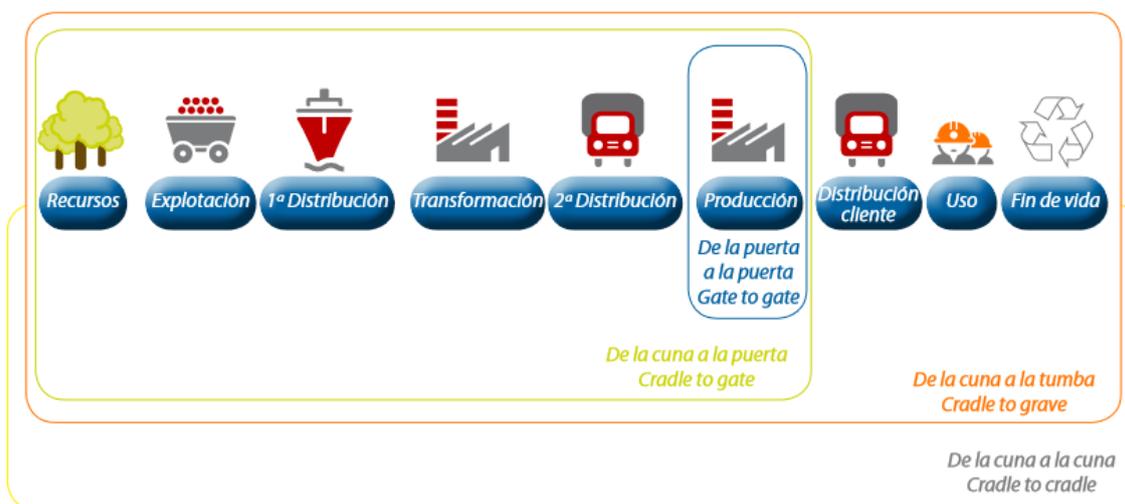


Figura 14. Terminología relacionada con el alcance de un ACV. Fuente: (Ihobe, Sociedad Pública de Gestión Ambiental, 2009).

- **De la cuna a la tumba.** Se utiliza en referencia a la perspectiva sobre el impacto ambiental creado por un determinado producto, servicio o actividad desde la extracción de recursos (cuna) hasta su fin de vida (tumba). Su objetivo es reducir residuos.
- **De la cuna a la puerta.** Se utiliza en referencia a la perspectiva parcial sobre el impacto ambiental creado por un determinado producto, servicio o actividad desde la extracción de recursos (cuna) hasta la producción (puerta), omitiendo las fases de distribución al cliente, uso y fin de vida.
- **De puerta a puerta.** Se utiliza en referencia a la perspectiva parcial sobre el impacto ambiental creado por un determinado producto, servicio o actividad desde un punto definido a lo largo del ciclo de vida hasta un segundo punto definido más adelante en el ciclo.
- **De la cuna a la cuna.** Se utiliza en referencia a la perspectiva cíclica sobre el impacto ambiental creado por un determinado producto, servicio o actividad, en vez de la perspectiva lineal “de la cuna a la tumba”. Su objetivo es intentar eliminar los residuos por completo.

## 8. SOLUCIÓN PROPUESTA

En este trabajo se muestran diez ACV diferentes, uno para cada material catódico de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  sintetizado. Según se señalaba anteriormente, existen diferentes enfoques de evaluación del ciclo de vida, cada uno de ellos con distintos alcances.

En este caso, el ámbito de estudio seleccionado implica un enfoque de ACV de la cuna a la puerta. De esta manera, las entradas de materias primas, de energía y de productos intermedios, y las salidas de emisiones atmosféricas, de vertidos al agua y al suelo, y de productos de estos diez ACV, únicamente se tienen en cuenta en las fases de extracción de recursos, explotación, distribución, transformación y producción, omitiendo las fases de distribución al cliente, uso y fin de vida.

Se han estudiado dieciséis categorías de impacto basadas en la metodología ReCiPe 2016 *Mindpoin* (H). Sin embargo, se ha prestado especial atención al indicador *global warming potencial* (GWP), medido en kg de  $\text{CO}_2$  equivalente, puesto que proporciona una media para una fácil comparación con los impactos ambientales asociados a otros sistemas de almacenamiento de energía.

## 9. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este apartado se presentan y analizan los impactos ambientales basados en la metodología ReCiPe 2016 *Mindpoin* (H), de los diez métodos específicos de síntesis de materiales catódicos de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  estudiados.

En la Tabla 2 se incluye el inventario de *inputs* y *outputs* de materiales y energía necesarios para la síntesis de estos diez cátodos, correspondientes a las cantidades utilizadas en cada uno de los trabajos analizados.

En la Tabla 3 se recogen los impactos ambientales de la fabricación de estos diez cátodos considerando 1 kg de material como unidad funcional.

Utilizando un enfoque de ACV de la cuna a la puerta, los impactos se normalizan a 1 kg de material de cátodo. Dado que el campo del almacenamiento de energía es un área impulsada por el rendimiento, los impactos ambientales se normalizan posteriormente a 1 kWh de capacidad de almacenamiento, teniendo en cuenta sólo el cátodo.

Tabla 2. Inventario de *inputs* y *outputs* de materiales y energías necesarios para la síntesis de cátodos de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  (correspondientes a las cantidades utilizadas en cada uno de los trabajos analizados). Las cantidades se proporcionan en gramos si no se indica lo contrario.

Cátodo 1		Cátodo 2		Cátodo 3		Cátodo 4		Cátodo 5		Cátodo 6		Cátodo 7		Cátodo 8		Cátodo 9		Cátodo 10	
<b>Inputs</b>																			
Material	Cantidad	Material	Cantidad	Material	Cantidad	Material	Cantidad	Material	Cantidad	Material	Cantidad	Material	Cantidad	Material	Cantidad	Material	Cantidad	Material	Cantidad
V <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	0.182	GO	0.009	NH <sub>4</sub> VO <sub>3</sub>	0.21396	NH <sub>4</sub> VO <sub>3</sub>	0.228	NH <sub>4</sub> HB <sub>4</sub> O <sub>7</sub>	37.981	NH <sub>4</sub> VO <sub>3</sub>	0.232	V <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	0.182	V <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	0.182	NaC <sub>2</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	0.246	KGM	0.840 mg
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	0.526	V(C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>3</sub>	0.697	Ar (liquid)	46.025	C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> NO <sub>2</sub>	0.500	V <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	0.720	La(NO <sub>3</sub> ) <sub>3</sub>	0.009	Ar (liquid)	48.168	Ar (liquid)	42.816	V(C <sub>3</sub> H <sub>7</sub> O <sub>2</sub> ) <sub>3</sub>	0.697	CB	0.135
Ar (liquid)	59.407	Ar (liquid)	74.928	CB	0.121	NaC <sub>2</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	0.241	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O	80.300	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> O <sub>7</sub>	0.192	CB	0.139	CB	0.004	Ar (liquid)	74.928	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> O <sub>7</sub>	0.384
CB	0.139	CB	0.134	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> O <sub>7</sub>	0.384	Tris	0.061	CB	0.138	NaHCO <sub>3</sub>	0.252	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>6</sub>	0.180	H <sub>2</sub> (gas)	0.114	CB	0.059	NH <sub>4</sub> H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub>	0.345
EtOH	11.835	H <sub>2</sub>	0.199	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O <sub>2</sub>	0.102	Ar (liquid)	120.886	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> O <sub>6</sub>	0.400	Ar (liquid)	40.140	DMF	28.320	NH <sub>4</sub> H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub>	0.333	H <sub>2</sub> (gas)	0.19895	N <sub>2</sub> (gas)	42.660
H <sub>2</sub> (gas)	0.114	NH <sub>4</sub> H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub>	0.345	H <sub>2</sub> (gas)	0.171	CB	0.030	H <sub>2</sub> (gas)	0.142	CB	0.136	NMP	40.165	DMF	28.320	NH <sub>4</sub> H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub>	0.34508	NMP	38.796
NH <sub>4</sub> H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub>	0.345	NMP	38.716	NMP	42.506	C <sub>6</sub> H <sub>8</sub> O <sub>7</sub>	0.110	N <sub>2</sub> (liquid)	35.550	NH <sub>4</sub> H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub>	0.345	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O <sub>4</sub> ·2H <sub>2</sub> O	0.378	NMP	19.867	NMP	38.63983	NaOH	0.120
NMP	40.127	PVDF	0.067	PVDF	0.064	EtOH	11.835	NMP	39.669	NMP	37.700	PVDF	0.070	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	0.450	(C <sub>3</sub> H <sub>5</sub> NO) <sub>n</sub>	0.01403	DI water	50.066
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	0.360	Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	0.159	NaH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub>	0.360	NH <sub>4</sub> H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub>	0.338	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O <sub>4</sub> ·2H <sub>2</sub> O	1.52000	PVDF	0.068	NaH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub>	0.360	PVDF	0.002	PVDF	0.05862	NH <sub>4</sub> VO <sub>3</sub>	0.234
PVDF	0.070	DI water	40.000	DI water	0.551	NMP	19.867	PVDF	0.069	H <sub>2</sub> (gas)	0.107	DI water	5.00	Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	0.005	DI water	0.46767		
Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	0.159					PVDF	0.030	NaH <sub>2</sub> PO <sub>4</sub>	1.411	DI water	50.000			DI water	10.000				
						DI water	39.495	DI water	44.036										
Energía	25.0 kWh	Energía	112.2 kWh	Energía	51.0 kWh	Energía	47.3 kWh	Energía	41.4 kWh	Energía	50.8 kWh	Energía	65.6 kWh	Energía	55.2 kWh	Energía	56.9 kWh	Energía	40.5 kWh
<b>Outputs</b>																			
Material	Cantidad	Material	Cantidad	Material	Cantidad	Material	Cantidad	Material	Cantidad	Material	Cantidad	Material	Cantidad	Material	Cantidad	Material	Cantidad	Material	Cantidad
CO <sub>2</sub>	0.242	H <sub>2</sub> O	40.000	CO <sub>2</sub>	0.528	CO <sub>2</sub>	0.132	CO <sub>2</sub>	0.308	CO <sub>2</sub>	0.396	CO	0.168	O <sub>2</sub>	0.008	H <sub>2</sub> O	0.468	CO <sub>2</sub>	0.264
NH <sub>3</sub>	0.051	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	0.601	N <sub>2</sub>	0.014	N <sub>2</sub>	0.035	CO	0.028	NH <sub>3</sub>	0.086	H <sub>2</sub> O	5.216	N <sub>2</sub>	0.001	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O <sub>2</sub>	0.343	N <sub>2</sub>	0.070
EtOH	11.835	(NH <sub>4</sub> )CO <sub>3</sub>	0.117	H <sub>2</sub> O	0.551	CH <sub>3</sub> COO	0.089	H <sub>2</sub> O	47.730	H <sub>2</sub> O	51.205	DMF	28.320	CO <sub>2</sub>	0.008	(NH <sub>4</sub> )C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> O <sub>2</sub>	0.258	CH <sub>3</sub> COO	0.141
H <sub>2</sub> O	0.189					H <sub>2</sub> O	39.50	NH <sub>4</sub> HB <sub>4</sub> O <sub>7</sub>	34.466					H <sub>2</sub> O	18.180			H <sub>2</sub> O	50.279
C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	0.360					EtOH	11.835	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> O	80.300					DMF	28.320				

Tabla 3. Impacto medioambiental de la fabricación de cátodos de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  considerando 1 kg de material como unidad funcional.

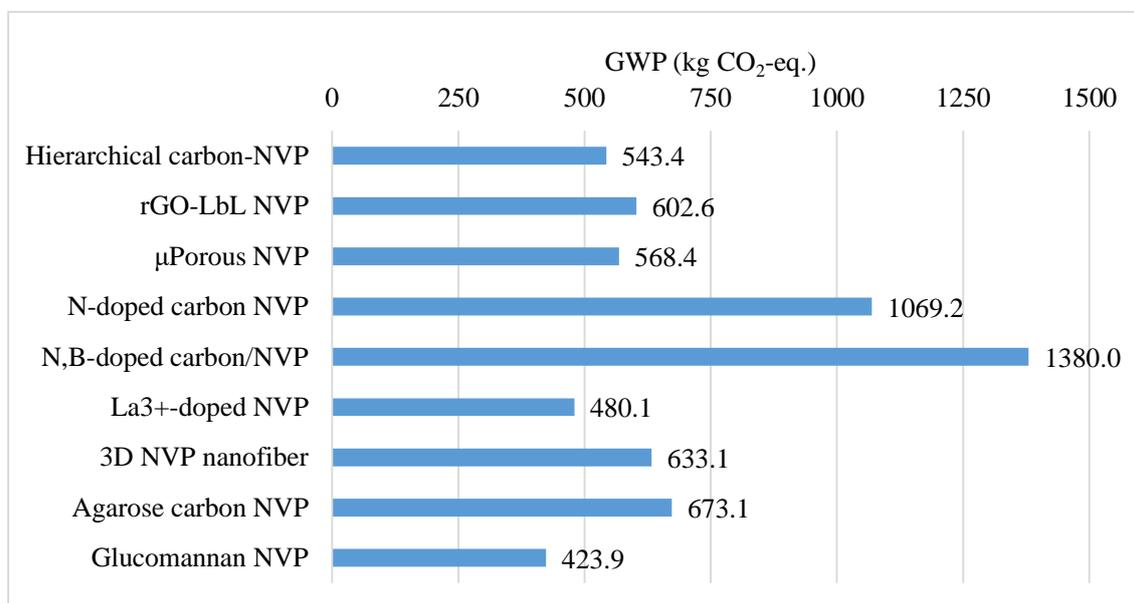
<b>Categoría de impacto</b>	<b>Cátodo 1</b>	<b>Cátodo 2</b>	<b>Cátodo 3</b>	<b>Cátodo 4</b>	<b>Cátodo 5</b>	<b>Cátodo 6</b>	<b>Cátodo 7</b>	<b>Cátodo 8</b>	<b>Cátodo 9</b>	<b>Cátodo 10</b>	<b>Unidades</b>
Formación de partículas finas	0.91	0.99	0.92	1.77	2.33	0.82	0.99	21.22	1.14	0.70	kg PM2.5-eq.
Escasez de recursos fósiles	182.54	201.94	195.45	328.03	526.94	165.04	238.92	5013.69	227.84	151.00	kg oil-eq.
Ecotoxicidad del agua dulce	21.33	24.85	22.00	44.21	57.01	18.44	24.51	499.05	28.80	15.88	kg 1,4-DCB
Eutrofización del agua dulce	0.26	0.32	0.26	0.72	0.54	0.22	0.27	5.57	0.35	0.16	kg P-eq.
Calentamiento global	543.43	602.57	568.42	1069.19	1380.04	480.11	633.09	12810.47	673.07	423.93	kg CO <sub>2</sub> -eq.
Toxicidad humana cancerígena	27.32	31.67	28.64	60.42	69.96	23.76	31.54	627.70	35.15	19.81	kg 1,4-DCB
Toxicidad humana no cancerígena	532.82	624.63	537.46	1188.96	1435.47	452.45	584.71	11785.77	704.23	373.50	kg 1,4-DCB
Radiación ionizante	99.66	132.59	93.35	337.65	72.87	79.71	98.04	2073.45	138.27	44.62	kBq Co-60-eq.
Uso del suelo	36.39	11.69	11.18	82.56	19.46	9.13	11.40	213.36	12.86	8.02	m <sup>2</sup> a crop-eq.
Ecotoxicidad marina	27.92	33.11	29.30	57.47	76.06	24.57	32.47	658.49	38.23	21.15	kg 1,4-DCB
Eutrofización marina	681.27	489.22	344.54	1553.51	519.16	323.93	1542.36	43990.88	612.89	254.62	x10 <sup>-4</sup> kg N-eq.
Escasez de recursos minerales	2.34	2.78	2.65	5.12	8.30	2.61	2.60	63.76	3.92	2.43	kg Cu-eq.
Formación de ozono, salud humana	1.15	1.23	1.17	2.17	24.17	0.99	1.29	33.43	1.39	0.90	kg NO <sub>x</sub> -eq.
Formación de ozono, ecosistemas terrestres	1.18	1.26	1.21	2.23	37.11	1.02	1.33	34.30	1.43	0.93	kg NO <sub>x</sub> -eq.
Agotamiento del ozono estratosférico	369.52	231.87	214.05	833.50	489.89	178.78	236.28	7524.61	255.54	152.47	x10 <sup>-6</sup> kg CFC11-eq.
Acidificación terrestre	244.21	252.23	232.59	487.12	653.46	226.38	246.27	5633.62	302.15	180.87	x10 <sup>-2</sup> kg SO <sub>2</sub> -eq.
Ecotoxicidad terrestre	1661.67	1844.58	1756.90	2520.24	4815.89	1468.65	1993.66	39159.59	3001.84	1442.36	kg 1,4-DCB
Consumo de agua	25.93	26.21	24.50	56.12	31.01	20.66	23.54	447.43	29.76	17.51	m <sup>3</sup>

## 9.1. GPW

Dada su relevancia predominante para cumplir los tratados internacionales jurídicamente vinculantes sobre el cambio climático, se estudia, en primer lugar, la categoría de impacto del *global warming potencial* (GWP). El GWP es un índice que define el efecto de calentamiento integrado que produce una liberación de 1 kg de un gas de efecto invernadero, en comparación con el calentamiento causado por el CO<sub>2</sub>. Se trata de un indicador importante a considerar en la actualidad para analizar la viabilidad ambiental de un proceso.

Según los datos recogidos en la Tabla 3, destaca el valor excesivamente superior de 12810.5 kg·CO<sub>2</sub>-eq·kg<sub>cátodo</sub><sup>-1</sup> para el cátodo 8, “*Nanoplatelet NVP*”. Este valor tan alto se debe principalmente a la baja cantidad de material catódico sintetizado; se obtienen 15.64 mg de material catódico en comparación con el promedio de 455.22 mg obtenido en los otros nueve procesos (las cantidades sintetizadas se incluyen en las figuras del ANEXO: INVENTARIOS). Este cátodo no se considera como representativo, por lo que se descarta en la discusión de resultados.

En la Gráfica 1 se muestran los valores del GWP para la fabricación de 1 kg de material catódico para las diez síntesis diferentes estudiadas a escala de laboratorio (enfoque de la cuna a la puerta).



Gráfica 1. GWP para 1 kg sintetizado de material catódico de Na<sub>3</sub>V<sub>2</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub> de baterías de ión de sodio.

Como se puede observar, los valores de GWP van desde un mínimo de 423.9 kg·CO<sub>2</sub>-eq·kg<sub>cátodo</sub><sup>-1</sup>, para el cátodo 10, “*Glucomannan NVP*”, hasta un máximo de 1380.0 kg·CO<sub>2</sub>-eq·kg<sub>cátodo</sub><sup>-1</sup> para el cátodo 5, “*N,B-doped carbon/NVP*”.

Según la clasificación en los cuatro grupos de enfoques sintéticos señalada con anterioridad, se pueden extraer las siguientes conclusiones. Por un lado, la incorporación de biopolímeros en los materiales catódicos (cátodo 9, “*Agarose carbon NVP*”, y cátodo 10, “*Glucomannan NVP*”), es la opción con el valor del GWP promedio más bajo:  $548.5 \text{ kg} \cdot \text{CO}_2\text{-eq} \cdot \text{kg}_{\text{cátodo}}^{-1}$ . Tras este enfoque, se destaca la incorporación de nanoestructuras carbonosas (cátodo 1, “*Hierarchical carbon-NVP*”, cátodo 2, “*rGO-LbL NVP*”, y cátodo 3, “*μPorous NVP*”), con un valor promedio del GWP de  $571.5 \text{ kg} \cdot \text{CO}_2\text{-eq} \cdot \text{kg}_{\text{cátodo}}^{-1}$ . La razón se basa en la sencillez de los procesos sintéticos y en el uso de materiales abundantes, no críticos. Por otro lado, la nanoestructuración (cátodo 7, “*3D NVP nanofiber*”), con un valor del GWP de  $633.1 \text{ kg} \cdot \text{CO}_2\text{-eq} \cdot \text{kg}_{\text{cátodo}}^{-1}$ , y, especialmente, el dopaje de heteroátomos (cátodo 4, “*N-doped carbon NVP*”, cátodo 5, “*N,B-doped carbon/NVP*”, y cátodo 6, “*La<sup>3+</sup>-doped NVP*”), con un valor promedio del GWP de  $976.5 \text{ kg} \cdot \text{CO}_2\text{-eq} \cdot \text{kg}_{\text{cátodo}}^{-1}$ , suponen el mayor impacto de calentamiento global debido a la necesidad de agentes de dopaje y los requerimientos energéticos para su síntesis.

Los impactos obtenidos son muy superiores a los obtenidos en procesos de síntesis de materiales catódicos basados en el ión de litio, que no superan apenas los  $35 \text{ kg} \cdot \text{CO}_2\text{-eq} \cdot \text{kg}_{\text{cátodo}}^{-1}$ . Por ejemplo, los valores del GWP del cátodo  $\text{LiFePO}_4$  (LFP) producido por síntesis hidrotérmica (enfoque de la cuna a la puerta) y del cátodo  $\text{LiNi}_{0.4}\text{Co}_{0.2}\text{Mn}_{0.4}\text{O}_2$  (NMC) obtenido por precipitación acuosa seguida de calcinación (enfoque de la cuna a la puerta) (Majeau-Bettez et al., 2011), ascendieron ambos a  $22 \text{ kg} \cdot \text{CO}_2\text{-eq} \cdot \text{kg}_{\text{cátodo}}^{-1}$ .

Es necesario señalar que los valores del GWP obtenidos en este trabajo, más de 10 veces superiores en todos los casos, se deben, seguramente, a los enfoques sintéticos notablemente más complejos, que comprenden procesos de múltiples pasos con altos requerimientos de energía y que utilizan productos químicos relativamente peligrosos.

De esta manera, es más lógico comparar los impactos de la producción de cátodos de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  con la síntesis de nanomateriales. Por ejemplo, se han reportado valores de  $217\text{-}501 \text{ kg} \cdot \text{CO}_2\text{-eq} \cdot \text{kg}^{-1}$  para la síntesis de óxido de grafeno mediante los métodos de Hummers y Marcano (Serrano-Luján et al., 2019).

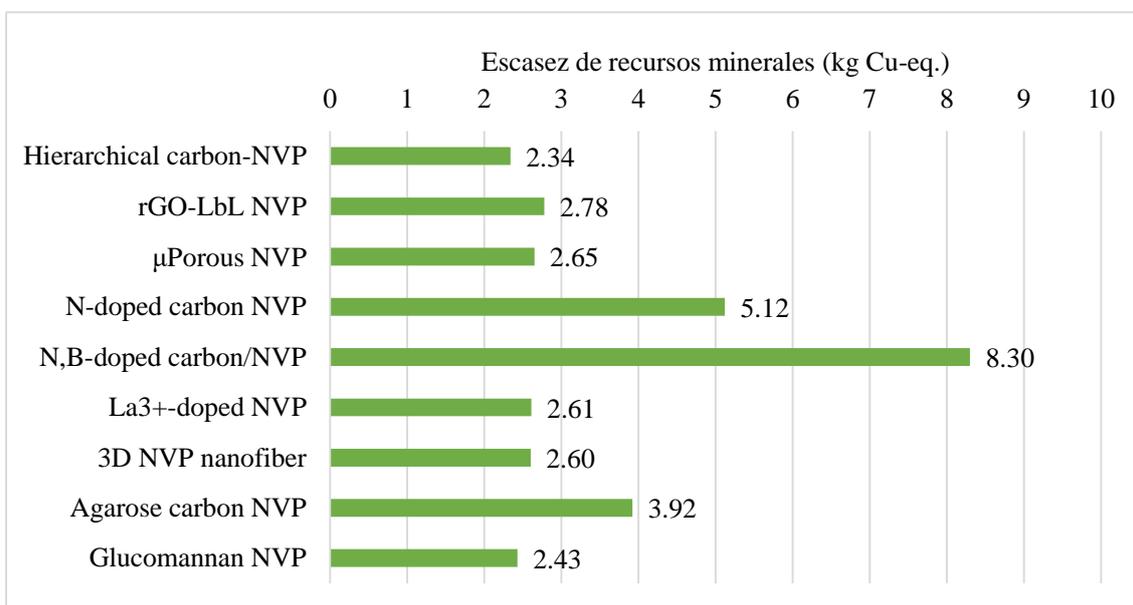
## 9.2. Categorías de impacto ReCiPe 2016 *Mindpoint* (H)

En este punto se realiza un análisis más detallado de todas las categorías de impactos basadas en la metodología ReCiPe 2016 *Mindpoint* (H) y recogidas en la Tabla 3. De esta manera, es posible identificar los puntos problemáticos, en términos ambientales, de los procesos de síntesis de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ , y sentar las bases para la futura optimización de los mismos en la línea del ecodiseño. Como se señalaba anteriormente, el cátodo 8, “*Nanoplatelet NVP*”, se descarta de la discusión.

De igual manera que para el GWP, el cátodo 10, “*Glucomannan NVP*”, presenta los impactos más bajos en 16 de las 18 categorías consideradas, posiblemente derivados de la sencillez del proceso de síntesis. Sin embargo, es importante señalar que tanto este proceso de síntesis como el del resto de cátodos, incluyen compuestos inorgánicos altamente peligrosos que contienen vanadio, por lo que de todos ellos se derivan ciertos niveles de toxicidad.

Según la clasificación en los cuatro grupos de enfoques sintéticos señalada con anterioridad, se pueden extraer las siguientes conclusiones. Por un lado, la incorporación de nanoestructuras carbonosas (cátodo 1, “*Hierarchical carbon-NVP*”, cátodo 2, “*rGO-LbL NVP*”, y cátodo 3, “*μPorous NVP*”), presenta valores intermedios en la mayoría de categorías de impacto, destacándose como una opción sostenible en términos ambientales. Por otro lado, el dopaje de heteroátomos (cátodo 4, “*N-doped carbon NVP*”, y cátodo 5, “*N,B-doped carbon/NVP*”, excluyendo el cátodo 6, “*La<sup>3+</sup>-doped NVP*”) presenta los valores más altos en las diferentes categorías de impacto.

En puntos anteriores se destacaba la problemática de ciertos materiales incluidos en las LIBs, considerados como CRMs por la UE. En este sentido, es importante incidir en la categoría de impacto “escasez de recursos minerales” como una de las más críticas en el ámbito del almacenamiento de energía (Trost, 1991).



Gráfica 2. Valor de la categoría de impacto “escasez de recursos minerales” para 1 kg sintetizado de material catódico de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  de baterías de ión de sodio.

Los procesos de síntesis que utilizan precursores abundantes (*sodium carbonate*) u orgánicos (*oxalic acid*, un biopolímero, *citric acid*), como el cátodo 1, “*Hierarchical carbon-NVP*”, y el cátodo 10, “*Glucomannan NVP*”, presentan los valores más bajos: 2.34 y 2.43 kg Cu-eq.,

respectivamente. Por el contrario, el cátodo 4, "*N-doped carbon NVP*", y el cátodo 5, "*N,B-doped carbon/NVP*", presentan los valores más altos: 5.12 y 8.30 kg Cu-eq., respectivamente; se utilizan cantidades relativamente grandes de reactivos que tienen vanadio, boro o fósforo.

En general, los procesos de síntesis de cátodos deberían estar diseñados para lograr elevadas eficiencias atómicas y en cuanto al uso del material (relación entre el producto obtenido y la masa total de material utilizado). Estos objetivos podrían lograrse seleccionando cuidadosamente la estequiometría de la reacción, evitando el exceso de reactivos y aprovechando el reciclaje de los disolventes.

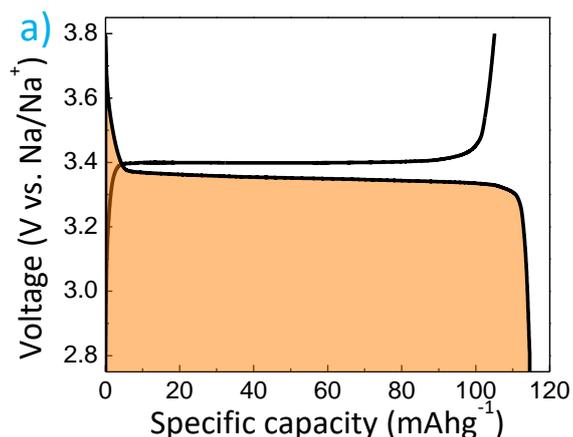
### **9.3. Impacto ambiental y rendimiento electroquímico**

El campo del almacenamiento de energía viene impulsado por el rendimiento, por lo que los impactos ambientales no pueden estudiarse adecuadamente sin considerar el análisis del comportamiento electroquímico.

La mayoría de trabajos se centran en las configuraciones de media celda en vez de celda completa, puesto que proporcionan información más detallada sobre el electrodo de trabajo, en este caso, el cátodo de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ , atendiendo así a la capacidad de descarga y la densidad energética gravimétrica para esta configuración de media celda. La densidad energética gravimétrica viene definida por la expresión

$$\text{Densidad energética gravimétrica [Wh}\cdot\text{kg}^{-1}] = \text{Voltaje nominal [V]} \cdot \text{Capacidad de descarga [mAh}\cdot\text{g}^{-1}]$$

Se considera 1 kWh de capacidad de almacenamiento de cátodo como unidad funcional. Esta normalización permite considerar el rendimiento electroquímico para el análisis del impacto ambiental y evita las incertidumbres asociadas a la falta de información. Los valores de densidad energética gravimétrica se han extraído de los trabajos publicados, seleccionado para todas las baterías una tasa C de 0.5C, es decir, una descarga de 2 h, permitiendo una base común de comparación.



Gráfica 3. Perfiles característicos de carga/descarga galvanostática de las células de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3/\text{Na}$ . La zona sombreada de color naranja muestra el cálculo gráfico de la densidad de energía gravimétrica, que es el área bajo la curva de tensión frente a la capacidad específica. Fuente: (Rey et al., 2022).

En la Gráfica 3 se muestra la curva de carga y descarga galvanostática característica de las semiceldas de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3/\text{Na}$  (Ojanguren et al., 2021). En general, el cátodo de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  presenta una meseta plana centrada en  $\sim 3.4$  V frente a  $\text{Na}/\text{Na}^+$  durante los procesos de sodiación/desodiación (Zhang et al., 2019), lo que, unido a una capacidad de descarga de hasta  $117.6 \text{ mAh g}^{-1}$  (valor teórico) (Feng et al., 2017), hace que las densidades energéticas gravimétricas superen los  $300 \text{ Wh kg}_{\text{cátodo}}^{-1}$ .

Con el objetivo de evaluar los impactos de los cátodos cuando se implementan en las celdas de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3/\text{Na}$ , se han realizado nuevos ACV teniendo en cuenta los materiales empleados, y se han considerado los requisitos de energía para procesar el cátodo, el separador, el electrolito líquido y el ánodo metálico de Na.

En la Tabla 4 se muestra la composición del cátodo, conformado por el material activo  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ , un aditivo carbonoso destinado a aumentar la conductividad electrónica y un aglutinante polimérico. Este cátodo se procesa utilizando un disolvente. La cantidad del cátodo se ha estimado en base a la carga de masa del cátodo y el diámetro de la celda que se indican en los trabajos analizados, excepto en el caso del cátodo 4, "*N-doped carbon*" y del cátodo 9, "*Agarose carbon NVP*", en los que se establece una carga de masa media de  $1.5 \text{ g cm}^{-2}$  debido a la falta de disponibilidad de datos.

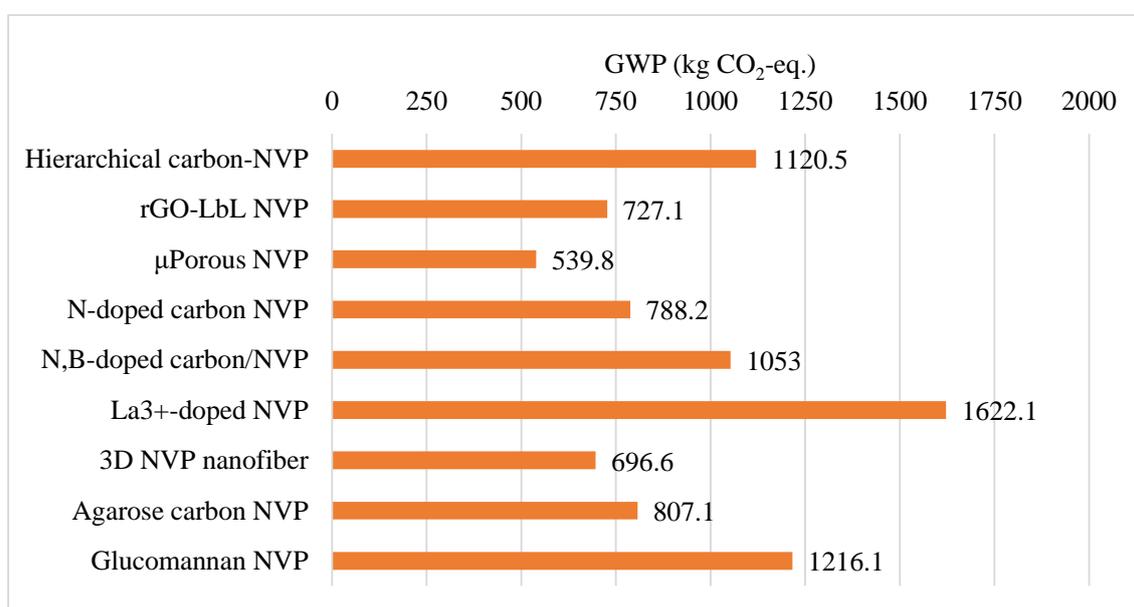
Tabla 4. Rendimiento electroquímico de cátodos de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  sintetizados en una configuración de media celda de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3/\text{Na}^a$ .

Cátodo	Aglutinante	Aditivo	Solvente	Separador	Electrolito	Ánodo	Cycle capacity ( $\text{mAh}\cdot\text{g}^{-1}$ )	Rate capacity ( $\text{mAh}\cdot\text{g}^{-1}$ )
Cátodo 1	10 wt.% PVDF	20 wt.% CB	-	Glass fiber	1 M $\text{NaClO}_4$ en EC/DEC (1:1 vol.)	Na metal	115 @ 0.2C	112 @ 0.5C 110 @ 1C
Cátodo 2	10 wt.% PVDF	20 wt.% CB	NMP	Glass fiber	1 M $\text{NaClO}_4$ en EC/DMC (1:1 wt.) con 5 % FEC	Na metal	117 @ 1C	118 @ 0.5C 115 @ 1C
Cátodo 3	10 wt.% PVDF	10 wt.% CB	NMP	Glass fiber	1 M $\text{NaClO}_4$ en EC/PC (1:1 vol.)	Na metal	116.5 @ 0.2C 110 @ 1C	112.5 @ 0.5C
Cátodo 4	10 wt.% PVDF	10 wt.% CB	NMP	Glass fiber	1 M $\text{NaClO}_4$ en EC/PC/DEC (1:1:1 vol.) con 5 wt.% FEC	Na metal	102.6 @ 0.5C	99.06 @ 0.5C 94.61 @ 1C
Cátodo 5	10 wt.% PVDF	20 wt.% CB	-	Glass fiber	1 M $\text{NaClO}_4$ en PC con 5% FEC	Configuración NVP/NVP	112 @ 1C	114 @ 1C
Cátodo 6	10 wt.% PVDF	20 wt.% CB	NMP	Glass fiber	1 M $\text{NaClO}_4$ en EC/DC (1:1 vol.) con 5 wt.% FEC	Na metal	104.5 @ 1C	110.3 @ 1C
Cátodo 7	10 wt.% PVDF	20 wt.% CB	NMP	Glass fiber	1 M $\text{NaClO}_4$ en EC/PC (1:1 wt.) con 5 % FEC	Na metal	113 @ 1C	113 @ 1C
Cátodo 8	10 wt.% PTFE	20 wt.% CB	NMP	Glass fiber	1 M $\text{NaClO}_4$ con 5 wt.% FEC	Configuración NVP/NVP	112 @ 0.5C	113.5 @ 0.5C 109.5 @ 1C
Cátodo 9	10 wt.% PVDF	10 wt.% CB	NMP	Polypropylene	1 M $\text{NaPF}_6$ en EC/DMC (1:1 vol.) con FEC	-	113 @ 1C	118 @ 1C
Cátodo 10	10 wt.% KGM en $\text{H}_2\text{O}$ (1.25% wt.)	20 wt.% CB	Agua	Glass fiber	1 M $\text{NaClO}_4$ en EC/DC (1:1 vol.) + 5% FEC	Hard carbon	109 @ 0.5C	101 @ 0.5C 99 @ 1C

<sup>a</sup>: PVDF, *polyvinylidene difluoride*; PTFE, *polytetrafluoroethylene*; CB: *carbon black*, NVP, *N-methyl-2-pyrrolidone*; EC, *ethylene carbonate*, DEC, *diethyl carbonate*, DMC, *dimethyl carbonate*, FEC, *fluoroethylene carbonate*, PC, *propylene carbonate*. 1C =  $117.6 \text{ mA}\cdot\text{g}^{-1}$ .

En la mayoría de los cátodos, se emplea una lámina metálica de Na, estimada en 200 mg, como material anódico. Entre el ánodo y el cátodo se coloca un separador físico eléctricamente aislante, pero iónicamente conductor. Para ello, se empapa una membrana en un electrolito orgánico, estimado en 100  $\mu\text{L}$ , con sales de Na disueltas. Para el montaje de la semicelda, se requiere una atmósfera inerte sin humedad, por lo que también se considera el uso de argón y de aportes energéticos adicionales. Los colectores de corriente y el sistema de gestión de la batería se mantienen fuera del inventario.

En la Gráfica 4 se muestran los valores de GWP de las células de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3/\text{Na}$  normalizado a 1 kWh de capacidad de almacenamiento (sólo catódico).

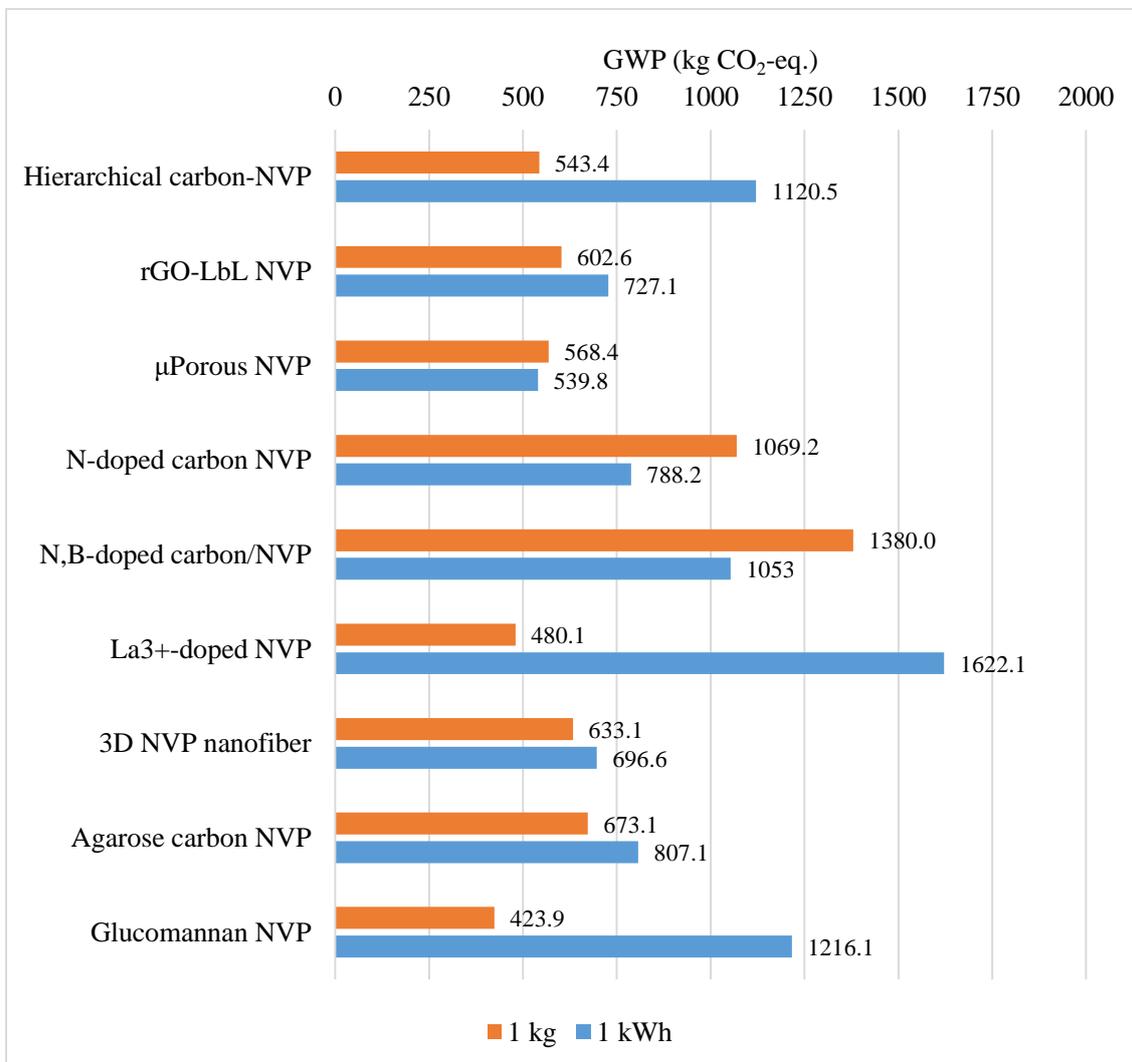


Gráfica 4. GWP de las células de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3/\text{Na}$  normalizado a 1 kWh de capacidad de almacenamiento (sólo catódico).

Como se puede observar, los valores de GWP van desde un mínimo de 539.8  $\text{kg}\cdot\text{CO}_2\text{-eq}\cdot\text{kWh}_{\text{cátodo}}^{-1}$  para el cátodo 3, “ $\mu\text{Porous NVP}$ ”, hasta 1622.1  $\text{kg}\cdot\text{CO}_2\text{-eq}\cdot\text{kWh}_{\text{cátodo}}^{-1}$  para el cátodo 6, “ $\text{La}^{3+}$ -doped NVP”. Destaca, como en ocasiones anteriores, el valor excesivamente superior de 6137.3  $\text{kg}\cdot\text{CO}_2\text{-eq}\cdot\text{kWh}_{\text{cátodo}}^{-1}$  para el cátodo 8, “*Nanoplatelet NVP*”, que ha sido descartado de la discusión.

En la Gráfica 5 se representan los valores del GWP para 1 kg de cátodo y para 1 kWh de capacidad de almacenamiento de cátodo. Se advierte que la elección más sostenible ambientalmente para 1 kg de cátodo no se corresponde necesariamente con el diseño más adecuado cuando se considera el rendimiento de la batería. Por ejemplo, aunque los impactos del GWP para la incorporación de nanoestructuras carbonosas (cátodo 1, “*Hierarchical carbon-NVP*”, cátodo 2, “*rGO-LbL NVP*”, y cátodo 3, “ $\mu\text{Porous NVP}$ ”), son aproximadamente iguales en términos de masa, la mayor

densidad de energía y la carga de masa del cátodo pueden reducir a la mitad el valor del GWP, pasando de 1102.5 kg·CO<sub>2</sub>-eq·kWh<sub>cátodo</sub><sup>-1</sup> del cátodo 1, “*Hierarchical carbon-NVP*”, a 539.8 kg·CO<sub>2</sub>-eq·kWh<sub>cátodo</sub><sup>-1</sup> del cátodo 3, “*μPorous NVP*”.



Gráfica 5. GWP para 1 kg sintetizado de material catódico de Na<sub>3</sub>V<sub>2</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub> y para 1 kWh de capacidad de almacenamiento sólo catódico de células de Na<sub>3</sub>V<sub>2</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub>.

Teniendo en cuenta el valor del GWP considerablemente superior de los cátodos analizados en este trabajo en comparación con los impactos originados por la fabricación a escala industrial de cátodos de Na<sub>3</sub>V<sub>2</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub>, y que las diferencias de capacidad de descarga durante los ciclos iniciales de carga/descarga son bajas (véase la columna de “*cycle capacity*” en la Tabla 4), es necesario cuestionarse hasta qué punto es interesante, en términos ambientales, mejorar el rendimiento electroquímico a expensas de procesos complejos tóxicos y con altos consumos energéticos. En este sentido, cabe sopesar la realización de ACV focalizados en la fase de uso de la batería, considerando parámetros como la capacidad de descarga, la capacidad de retención, la eficiencia

culombiana o la vida útil de la operación (Porzio & Scown, 2021). En resumen, es necesario fomentar la búsqueda de cátodos que combinen bajos valores de GWP, alta densidad energética y durabilidad.

Los cátodos que contienen grafeno (cátodo 1, “*Hierarchical carbon-NVP*”, y cátodo 2, “*rGO-LbL NVP*”) se encuentran entre los que muestran los mayores valores de capacidad de descarga a 1C, por lo que el grafeno resulta un aditivo adecuado para proporcionar una conductividad electrónica superior y mejorar esta capacidad.

Es imprescindible tener en cuenta la capacidad de retención, puesto que garantiza la estrategia de reutilización, tan importante en el marco de la economía circular. La columna de “*rate capacity*” de la Tabla 4 resume la capacidad de retención en porcentaje tras un número determinado de ciclos de carga/descarga. La comparación resulta compleja debido a las diferentes tasas de C utilizadas. En general, la mayoría de los cátodos muestran grandes valores de capacidad de retención, con valores especialmente notables para el cátodo 2, “*rGO-LbL NVP*”, cátodo 5, “*N,B-doped carbon/NVP*”, cátodo 7, “*3D NVP nanofiber*” y cátodo 8, “*Nanoplatelet NVP*”, que mantienen más del 80% de su capacidad de descarga inicial tras más de 5 000 ciclos a tasas de C muy altas. Estos cátodos son interesantes para aplicaciones de larga duración donde los cátodos convencionales de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  fallan. Por el contrario, el cátodo 3, “ *$\mu$ Porous NVP*”, resulta tener el valor más pobre, por lo que, a pesar de su menor valor de GWP por 1 kWh, podría derivar en mayores impactos ambientales al considerar la fase de uso.

Los cátodos convencionales de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  fallan en las dos aplicaciones específicas de larga vida útil de funcionamiento y alta carga; apenas pueden funcionar más allá de 100 ciclos a una tasa de 2-3C (Casas et al., 2020).

#### **9.4. Análisis de sensibilidad**

Analizando los resultados de los procesos de síntesis de los materiales catódicos, resulta especialmente relevante la contribución del consumo de energía eléctrica a diferentes categorías de impacto. De hecho, los requisitos de energía para la fabricación se han destacado como una de las principales causas del GWP en la producción de cátodos de baterías (Majeau-Bettez et al., 2011).

El cátodo 3, “ *$\mu$ Porous NVP*” se erige como un diseño representativo que comprende los pasos sintéticos comunes, y los *inputs* energéticos y de materiales promedio. Para evaluar el potencial de reducción del impacto ambiental bajo una modificación del proceso de síntesis de este cátodo, se realiza un análisis de sensibilidad, pasando de un mix de energía eléctrica estándar (Market group for electricity, high voltage | electricity, high voltage | Cutoff, U - ENTSO-E) a un mix de

energía eléctrica totalmente renovable. En este sentido, se ha modelado una nueva fuente de electricidad teniendo en cuenta la proporción actual de fuentes renovables de Alemania, Dinamarca y Países Bajos, y modificando, además, el mix eléctrico deecoinvent 3.8 para convertirlo en 100% renovable (76% de viento, 12% de biomasa, 7% de biogás y 5% de energía hidráulica), de modo que se obtengan valores representativos sobre el mix energético renovable europeo (de Lapuente et al., 2022).

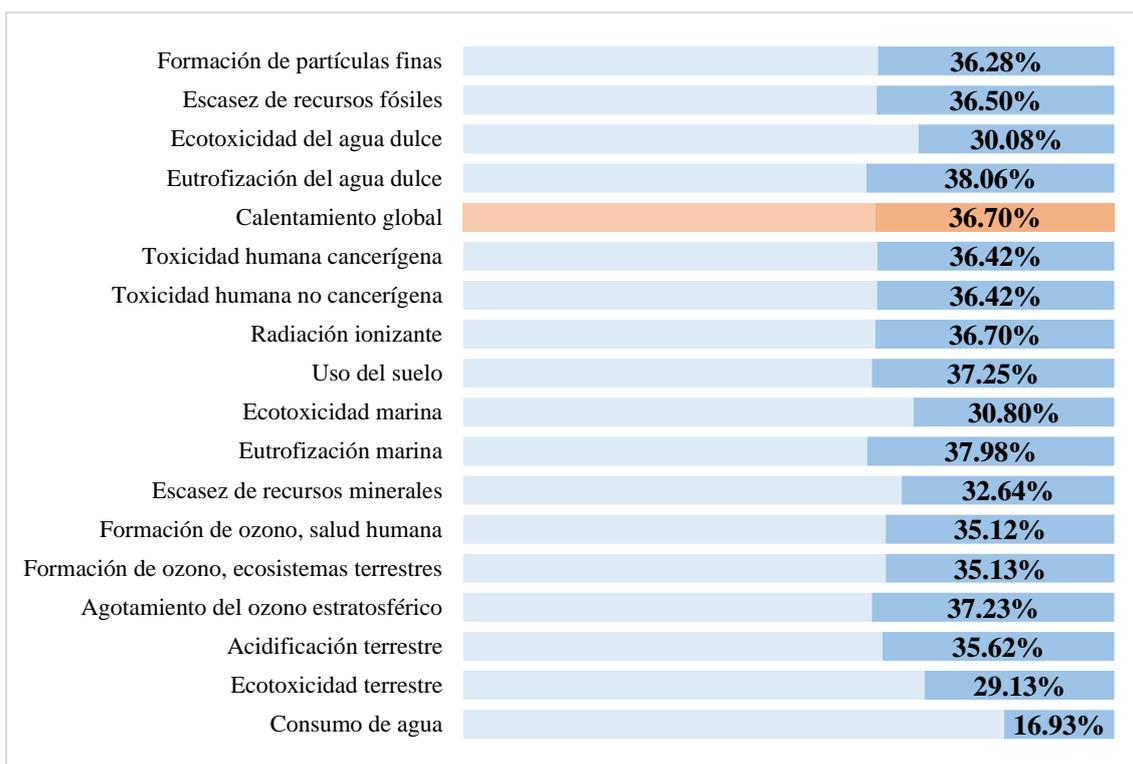


Figura 15. Análisis de sensibilidad para el cátodo 3, "*μPorous NVP*", considerando 1 kWh de capacidad de almacenamiento como unidad funcional.

Como se puede observar en la Figura 15, si se considera 1 kWh de capacidad de almacenamiento como unidad funcional y el cambio del mix energético a uno totalmente renovable, los impactos ambientales podrían reducirse entre un 16.93% y un 38.06%, dependiendo de la categoría. En el caso del GWP, el índice de mayor relevancia, el valor se reduce de 539.8 a 341.7 kg CO<sub>2</sub>-eq·kWh<sub>cathode</sub><sup>-1</sup>, es decir, un 36.70%. Se trata de una reducción considerable teniendo en cuenta la problemática actual de emisiones de CO<sub>2</sub> derivada del sistema energético.

## 10. PLANIFICACIÓN DEL PROYECTO

En este apartado se describen los diferentes paquetes de tareas que componen el proyecto. Para cada uno de ellos, se enumeran las tareas que lo componen, incluyendo su descripción, los recursos necesarios y su duración. Se ha considerado una jornada diaria máxima de 3 horas, durante 5 días a la semana.

### P.T.1. Preparación inicial

#### H.1. Reunión inicial (8 de noviembre 2021)

##### T.1.1. Lectura de artículos generales

Descripción: Lectura de artículos generales dedicados análisis de ciclo de vida de NIBs, con el objetivo de obtener conclusiones generales y establecer un contexto de partida para el desarrollo del proyecto.

Recursos humanos:

Ingeniero junior (15 horas)

Duración: 1 semana.

##### T.1.2. Selección de artículos específicos

Descripción: Selección de diez artículos específicos de síntesis de materiales catódicos de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  entre treinta y siete trabajos representativos del estado del arte, en función de la abundancia de datos para realizar el análisis de ciclo de vida de cada uno de ellos y del interés de los materiales de síntesis, teniendo en cuenta diversidad en cuanto a los seleccionados.

Recursos humanos:

Ingeniero junior (30 horas).

Duración: 2 semanas.

#### H.2. Entrega tabla datos (29 de noviembre de 2021)

Descripción: Elaboración de una tabla que recoge el *Electrochemical Performance* de los cátodos de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  sintetizados en una configuración de media celda de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3/\text{Na}$ , incluyendo los materiales de componentes, su *cycle capacity* y su *rate capacity*.

## **P.T.2. Desarrollo específico**

### **T.2.1. Lectura de artículos específicos**

Descripción: Lectura de los diez artículos seleccionados, poniendo especial atención en el desarrollo de los métodos de síntesis de materiales catódicos de NVP propuestos en ellos, y extracción de ideas más específicas acerca del tema.

Recursos humanos:

Ingeniero junior (45 horas).

Duración: 3 semanas.

### **H.3. Reunión dudas específicas (20 de diciembre de 2021)**

## **P.T.3. Diagramas de flujo**

### **T.3.1. Ejecución de diagramas de flujo**

Descripción: Ejecución aproximada de los diagramas de flujo de los diez métodos de síntesis de materiales catódicos de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  para facilitar el cálculo posterior del ICV.

Recursos humanos:

Ingeniero junior (15 horas)

Ingeniero senior (5 horas)

Director de proyecto (10 horas)

Duración: 1 semana.

### **H.4. Presentación de diagramas (27 de diciembre de 2022)**

## **P.T.4. Cálculo de ICVs**

### **T.4.1. Cálculo de ICVs**

Descripción: Realización del ICV de los diez métodos de síntesis de materiales catódicos de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ , con apoyo de los diagramas de flujo previos.

Recursos humanos:

Ingeniero junior (60 horas)

Ingeniero senior (15 horas)

Director de proyecto (15 horas)

Duración: 4 semanas.

#### **H.5. Presentación de ICVs (24 de enero de 2021)**

#### **P.T.5. OpenLCA**

##### **T.5.1. Inserción de datos en OpenLCA**

Descripción: Inserción de los datos del ICV de los diez métodos de síntesis de materiales catódicos de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  en OpenLCA.

Recursos humanos:

Ingeniero junior (45 horas)

Duración: 3 semanas.

#### **H.6. Finalización OpenLCA (14 de febrero de 2022)**

#### **P.T.6. Análisis de resultados**

##### **T.6.1. Análisis de resultados**

Descripción: Comparación de los resultados obtenidos a través de OpenLCA de la evaluación del inventario de ciclo de vida (EICV) entre los diez métodos de síntesis de materiales catódicos de NVP propuestos y con otros estudios anteriores.

Recursos humanos:

Ingeniero junior (30 horas)

Ingeniero senior (5 horas)

Director de proyecto (15 horas)

Duración: 2 semanas.

#### **H.7. Finalización análisis de resultados (28 de febrero de 2022)**

#### **P.T.7. Redacción del documento**

##### **T.7.1 Redacción del documento provisional**

Descripción: Redacción del documento provisional del trabajo.

Recursos humanos:

Ingeniero junior (45 horas).

Duración: 4 semanas.

#### **H.8. Entrega documento provisional (13 de junio de 2022)**

##### **T.7.2. Redacción del documento final**

Descripción: Redacción del documento provisional del trabajo.

Recursos humanos:

Ingeniero junior (15 horas).

Duración: 1 semana.

#### **H.9. Entrega del documento final (20 de junio de 2022)**

En la planificación de cualquier proyecto se deben considerar una serie de hitos, es decir, los puntos de control o fechas críticas del mismo. En este caso, los hitos son los que se presentan en la Tabla 5.

Tabla 5. Hitos del proyecto.

Hito	Nombre	Fecha
H1	Reunión inicial	8 de noviembre de 2021
H2	Entrega tabla datos	10 de marzo de 2021
H3	Reunión dudas específicas	20 de diciembre de 2021
H4	Presentación de diagramas	27 de diciembre de 2022
H5	Presentación de ICVs	24 de enero de 2021
H6	Finalización OpenLCA	14 de febrero de 2022
H7	Finalización análisis de resultados	28 de febrero de 2022
H8	Entrega documento provisional	13 de junio de 2022
H9	Entrega documento final	20 de junio de 2022

En la siguiente figura se muestra el diagrama de Gantt del proyecto. La duración total del proyecto, considerando una jornada de 3 horas al día máximas durante 5 días a la semana, es de 21 semanas. Como se puede observar, el proyecto comienza el 8 de noviembre de 2021 y finaliza el 20 de junio de 2022, con un período de parada entre el 28 de febrero y el 16 de mayo de 2022 (11 semanas).

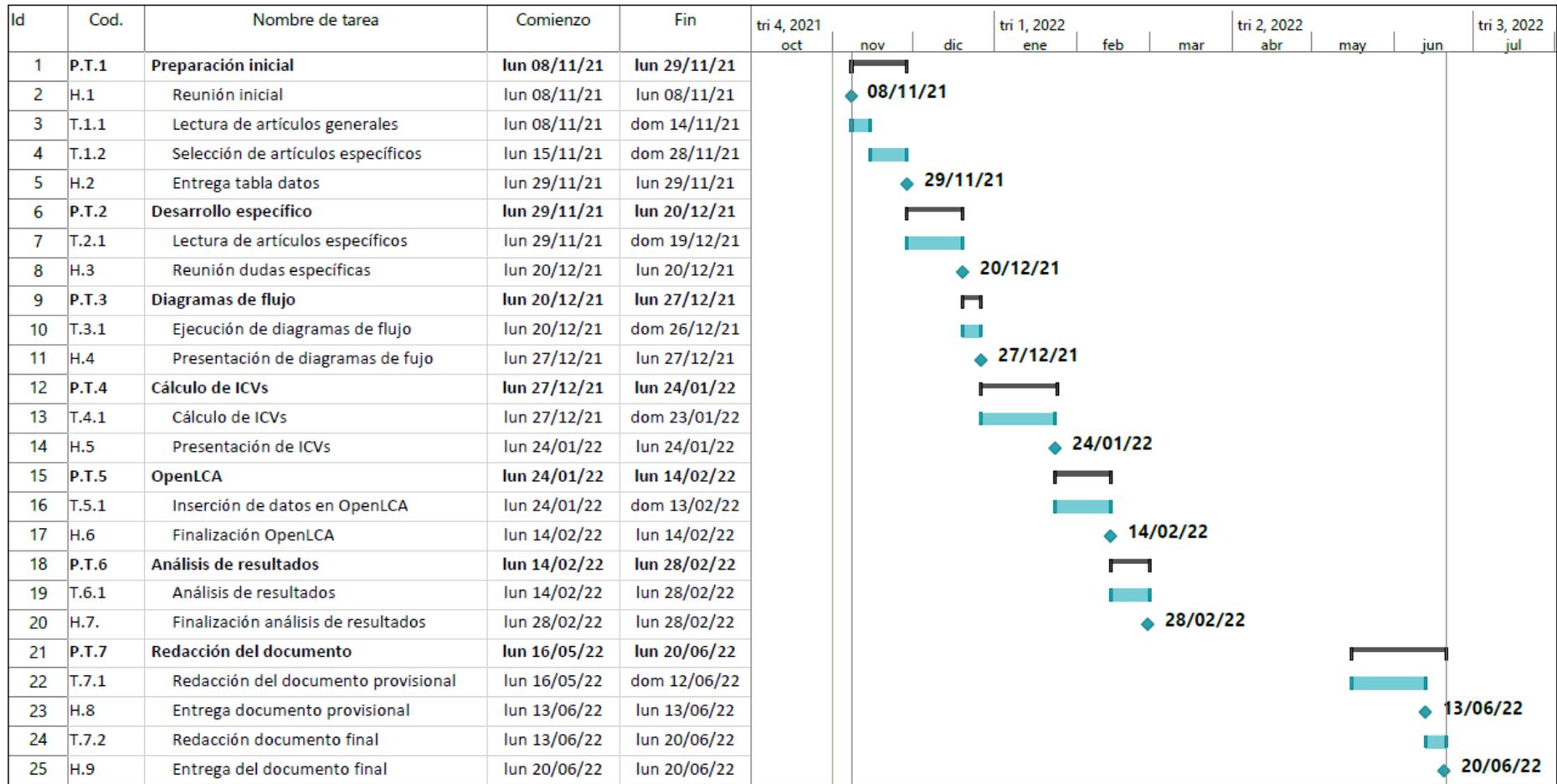


Figura 16. Diagrama de Gantt del proyecto.

## 11. COSTE DEL PROYECTO

En este capítulo se presenta el coste del proyecto, incluyendo las horas internas, las amortizaciones y otros gastos. Se considera que los costes indirectos son el 10 % de los costes directos. De esta manera, el coste total del proyecto asciende a 18 816.60 €.

Tabla 6. Coste del proyecto.

CONCEPTO	UNIDAD	Nº UNIDADES	TASA UNITARIA	COSTE
<b>HORAS INTERNAS</b>				
Ingeniero junior	h	300	40.00 €	12 000.00 €
Ingeniero senior	h	25	55.00 €	1 375.00 €
Director de proyecto	h	45	70.00 €	3 150.00 €
<b>AMORTIZACIONES</b>				
Ordenador	h	300	0.50 €	150.00 €
Licencia Microsoft Office 365	meses	8	7.00 €	56.00 €
<b>OTROS GASTOS</b>				
Internet	meses	8	35.00 €	280.00 €
Electricidad	h	300	0.15 €	45.00 €
Material de oficina	-	-	-	50.00 €
<b>COSTES DIRECTOS</b>				17 106.00 €
Costes indirectos	-	-	-	1 710.60 €
<b>TOTAL (IVA no incluido)</b>				<b>18 816.60 €</b>

## 12. CONCLUSIONES

En este trabajo de fin de máster se expone la problemática ambiental derivada del uso creciente de las baterías de ion de litio o *lithium-ion batteries* (LIBs) como sistema electroquímico de almacenamiento. Existen diferentes presiones en el ámbito legislativo que abogan por la evolución hacia un sistema sostenible e impulsan políticas basadas en los conceptos de economía circular y energía limpia.

Dentro de este marco, la línea de investigación se centra actualmente en la búsqueda de baterías eficientes electroquímicamente, rentables económicamente y sostenibles ambientalmente. Entre las diferentes posibilidades disponibles, las baterías de iones de sodio o *sodium-ion batteries* (NIBs) despiertan un interés especial en virtud de diferentes aspectos que las convierten en potentes competidoras de las LIBs. Concretamente, el cátodo de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  es una opción popular.

Motivado por esta particular cuestión, se presenta el objetivo principal del trabajo: la realización, análisis y comparación del análisis de ciclo de vida de diez diseños de materiales catódicos de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  aplicados en NIBs, representativos del estado del arte, publicados todos a partir de 2015.

La metodología seguida se basa en el análisis de ciclo de vida (ACV) o *life cycle assessment* (LCA). En este sentido, se ha seleccionado OpenLCA para la realización del proyecto, por ser un software libre, gratuito y profesional que permite realizar ACV completos. Se explica resumidamente su funcionamiento basado en la metodología ACV. Los impactos se contabilizan en 18 categorías según la metodología ReCiPe 2016 *Mindpoint* (H), haciendo especial hincapié en el GWP.

En cuanto a los resultados obtenidos, se pueden extraer una serie de conclusiones principales. En primer lugar, considerando 1 kg de producción de cátodo, los valores del GWP oscilan entre 423.9  $\text{kg}\cdot\text{CO}_2\text{-eq}\cdot\text{kg}_{\text{cátodo}}^{-1}$  y 1380.0  $\text{kg}\cdot\text{CO}_2\text{-eq}\cdot\text{kg}_{\text{cátodo}}^{-1}$ , siendo los cátodos que utilizan precursores de biopolímeros o los que incorporan estructuras carbonosas los que menor impacto tienen. Por el contrario, los cátodos con dopaje presentan impactos mayores. En segundo lugar, considerando 1 kWh de capacidad de almacenamiento y teniendo en cuenta únicamente el cátodo, los valores del GWP oscilan entre 539.8  $\text{kg}\cdot\text{CO}_2\text{-eq}\cdot\text{kWh}_{\text{cátodo}}^{-1}$  y 1622.1  $\text{kg}\cdot\text{CO}_2\text{-eq}\cdot\text{kWh}_{\text{cátodo}}^{-1}$ . Por otro lado, un análisis de sensibilidad demuestra el potencial de reducción de los impactos ambientales entre un 16.9 % y un 38.0% a través de la transición a una mix energético totalmente renovable.

Según el rendimiento electroquímico en la configuración de media celda de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3/\text{Na}$ , el cátodo 3, “*μPorous NVP*”, presenta el menor valor de GWP por 1 kWh de capacidad de

almacenamiento. Sin embargo, al considerar la fase de uso, el dopaje de heteroátomos y la modificación de la morfología son buenas alternativas.

Resulta necesario tener en cuenta el material del que se componen los cátodos y los procesos de síntesis, pero también diferentes características de funcionamiento, como la capacidad de almacenamiento, la tasa C, la vida útil y la capacidad de descarga, para llegar a un análisis completo sobre la viabilidad ambiental y económica de las baterías de ión de sodio a escala industrial.

Es necesario realizar esfuerzos adicionales para optimizar los procesos de síntesis, tanto en términos de temperatura como de tiempo, para reducir el consumo de energía. El hecho de diseñar estos procesos a escala industrial, permitiría reducir notablemente este consumo. Además, si el mix energético empleado para satisfacer el consumo energético fuese totalmente renovable, se lograrían desarrollar de materiales catódicos de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  más sostenibles ambientalmente.

Se espera que este trabajo sirva de base para estudios futuros, proporcionando apoyo a los desarrolladores de baterías y ayudando a los futuros avances en el desarrollo de cátodos sostenibles aplicados en tecnologías de almacenamiento de energía más allá del ión de litio.

## REFERENCIAS

- Adams, R. A., Pol, V. G., & Varma, A. (2017). Tailored Solution Combustion Synthesis of High Performance  $\text{ZnCo}_2\text{O}_4$  Anode Materials for Lithium-Ion Batteries. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 56(25), 7173-7183. 10.1021/acs.iecr.7b00295
- AENOR. (2006). *UNE-EN ISO 14040:2006. Gestión ambiental. Análisis del ciclo de vida. Principios y marco de referencia.*
- Aichberger, C., & Jungmeier, G. (2020). *Environmental Life Cycle Impacts of Automotive Batteries Based on a Literature Review*10.3390/en13236345
- Arshad, F., Li, L., Amin, K., Fan, E., Manurkar, N., Ahmad, A., Yang, J., Wu, F., & Chen, R. (2020). A Comprehensive Review of the Advancement in Recycling the Anode and Electrolyte from Spent Lithium Ion Batteries. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 8(36), 13527-13554. 10.1021/acssuschemeng.0c04940
- Bi, L., Li, X., Liu, X., Zheng, Q., & Lin, D. (2019). Enhanced Cycling Stability and Rate Capability in a La-Doped  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3/\text{C}$  Cathode for High-Performance Sodium Ion Batteries. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 7(8), 7693-7699. 10.1021/acssuschemeng.8b06385
- bp. (2021). *bp Statistical Review of World Energy 2021*. Londres: Statistical Review of World Energy. <https://www.bp.com/content/dam/bp/business-sites/en/global/corporate/pdfs/energy-economics/statistical-review/bp-stats-review-2021-full-report.pdf>
- Casas, X., Niederberger, M., & Lizundia, E. (2020). A Sodium-Ion Battery Separator with Reversible Voltage Response Based on Water-Soluble Cellulose Derivatives. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 12(26), 29264-29274. 10.1021/acсами.0c05262
- Chacón, J. R. (2008). Historia ampliada y comentada del análisis de ciclo de vida (ACV). *Revista De La Escuela Colombiana De Ingeniería*, 72, 37-70.
- Choi, J. W., & Aurbach, D. (2016). Promise and reality of post-lithium-ion batteries with high energy densities. *Nature Reviews Materials*, 1(4), 16013. 10.1038/natrevmats.2016.13
- Civancik-Uslu, D., Puig, R., Voigt, S., Walter, D., & Fullana-i-Palmer, P. (2019). Improving the production chain with LCA and eco-design: application to cosmetic packaging. *Resources, Conservation and Recycling*, 151, 104475. <https://doi.org/10.1016/j.resconrec.2019.104475>
- Comisión Europea. (2020). *Nuevo Plan de acción para la economía circular por una Europa más limpia y más competitiva.* <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/ES/TXT/?uri=COM:2020:98:FIN>
- de Lapuente Díaz de Otazu, Rocío López, Akizu-Gardoki, O., de Ulibarri, B., Iturrondobeitia, M., Minguez, R., & Lizundia, E. (2022). Ecodesign coupled with Life Cycle Assessment to reduce the environmental impacts of an industrial enzymatic cleaner. *Sustainable Production and Consumption*, 29, 718-729. <https://doi.org/10.1016/j.spc.2021.11.016>

- Dühnen, S., Betz, J., Kolek, M., Schmuch, R., Winter, M., & Placke, T. (2020). Toward Green Battery Cells: Perspective on Materials and Technologies. *Small Methods*, 4(7), 2000039. <https://doi.org/10.1002/smt.202000039>
- European Commission. (2020). *Green Deal: Sustainable batteries for a circular and climate neutral economy*. European Commission. [https://ec.europa.eu/commission/presscorner/detail/en/ip\\_20\\_2312](https://ec.europa.eu/commission/presscorner/detail/en/ip_20_2312)
- Fang, Y., Xiao, L., Ai, X., Cao, Y., & Yang, H. (2015). Hierarchical Carbon Framework Wrapped  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  as a Superior High-Rate and Extended Lifespan Cathode for Sodium-Ion Batteries. *Advanced Materials*, 27(39), 5895-5900. <https://doi.org/10.1002/adma.201502018>
- Feng, P., Wang, W., Wang, K., Cheng, S., & Jiang, K. (2017).  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3/\text{C}$  synthesized by a facile solid-phase method assisted with agarose as a high-performance cathode for sodium-ion batteries. *Journal of Materials Chemistry A*, 5(21), 10261-10268. 10.1039/C7TA01946G
- Galcerán, M. (2021). *Sodium-ion batteries: towards a sustainable, low-cost energy storage technology*. cicenergigune. <https://cicenergigune.com/en/blog/sodium-ion-batteries-sustainable-lowcost-energy-storage-technology>
- Gobierno de España. (2020). *Estrategia Española de Economía Circular, España Circular 2030*. <https://www.miteco.gob.es/es/calidad-y-evaluacion-ambiental/temas/economia-circular/estrategia/>
- Gobierno Vasco. (2015). *Plan de Prevención y Gestión de Residuos de la CAPV 2020*. [https://www.euskadi.eus/web01-a2aznscp/es/k75aWebPublicacionesWar/k75aObtenerPublicacionDigitalServlet?R01HNNoPortal=true&N\\_LIBR=052188&N\\_EDIC=0001&C\\_IDIOM=es&FORMATO=.pdf](https://www.euskadi.eus/web01-a2aznscp/es/k75aWebPublicacionesWar/k75aObtenerPublicacionDigitalServlet?R01HNNoPortal=true&N_LIBR=052188&N_EDIC=0001&C_IDIOM=es&FORMATO=.pdf)
- Gobierno Vasco. (2020). *Estrategia de Economía Circular de Euskadi 2030* (). <https://www.euskadi.eus/documentacion/2020/estrategia-de-economia-circular-de-euskadi-2030/web01-a2ingkut/es/>
- Gustavsson, P., & Larsson, P. (1996). Superporous agarose, a new material for chromatography. *Journal of Chromatography A*, 734(2), 231-240. [https://doi.org/10.1016/0021-9673\(95\)01304-0](https://doi.org/10.1016/0021-9673(95)01304-0)
- Ihobe, Sociedad Pública de Gestión Ambiental. (2009). *Análisis de ciclo de vida y huella de carbono. Dos maneras de medir el impacto ambiental de un producto*. <https://www.ihobe.eus/publicaciones/analisis-ciclo-vida-y-huella-carbono-dos-maneras-medir-impacto-ambiental-un-producto>
- Iturrondobeitia, M., Akizu-Gardoki, O., Amondarain, O., Minguez, R., & Lizundia, E. (2022). Environmental Impacts of Aqueous Zinc Ion Batteries Based on Life Cycle Assessment. *Advanced Sustainable Systems*, 6(1), 2100308. <https://doi.org/10.1002/adsu.202100308>
- Jiang, Y., Zhou, X., Li, D., Cheng, X., Liu, F., & Yu, Y. (2018). Highly Reversible Na Storage in  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  by Optimizing Nanostructure and Rational Surface Engineering. *Advanced Energy Materials*, 8(16), 1800068. <https://doi.org/10.1002/aenm.201800068>

- Jung, Y. H., Lim, C. H., & Kim, D. K. (2013). Graphene-supported  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  as a high rate cathode material for sodium-ion batteries. *Journal of Materials Chemistry A*, *1*(37), 11350-11354. 10.1039/C3TA12116J
- Kim, H., Lim, H., Kim, H., Kim, K. J., Byun, D., & Choi, W. (2019). Polydopamine-derived N-doped carbon-wrapped  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  cathode with superior rate capability and cycling stability for sodium-ion batteries. *Nano Research*, *12*(2), 397-404. 10.1007/s12274-018-2229-z
- Knobloch, F., Hanssen, S. V., Lam, A., Pollitt, H., Salas, P., Chewprecha, U., Huijbregts, M. A. J., & Mercure, J. (2020). Net emission reductions from electric cars and heat pumps in 59 world regions over time. *Nature Sustainability*, *3*(6), 437-447. 10.1038/s41893-020-0488-7
- Kushnir, D., & Sandén, B. A. (2011). Multi-level energy analysis of emerging technologies: a case study in new materials for lithium ion batteries. *Journal of Cleaner Production*, *19*(13), 1405-1416. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2011.05.006>
- Larcher, D., & Tarascon, J. (2015). Towards greener and more sustainable batteries for electrical energy storage. *Nature Chemistry*, *7*(1), 19-29. 10.1038/nchem.2085
- Ley 7/2021, de 20 de mayo, de cambio climático y transición energética. *Boletín Oficial del Estado*, *121*, de 21 de mayo de 2021. [https://www.boe.es/diario\\_boe/txt.php?id=BOE-A-2021-8447](https://www.boe.es/diario_boe/txt.php?id=BOE-A-2021-8447)
- Li, X., Wang, S., Tang, X., Zang, R., Li, P., Li, P., Man, Z., Li, C., Liu, S., Wu, Y., & Wang, G. (2019). Porous  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3/\text{C}$  nanoplates for high-performance sodium storage. *Journal of Colloid and Interface Science*, *539*, 168-174. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2018.12.071>
- Liu, C., Neale, Z. G., & Cao, G. (2016). Understanding electrochemical potentials of cathode materials in rechargeable batteries. *Materials Today*, *19*(2), 109-123. <https://doi.org/10.1016/j.mattod.2015.10.009>
- Lopez, S., Akizu-Gardoki, O., & Lizundia, E. (2020). Comparative life cycle assessment of high performance lithium-sulfur battery cathodes. *Journal of Cleaner Production*, *282*, 124528. 10.1016/j.jclepro.2020.124528
- Luo, W., Shen, F., Bommier, C., Zhu, H., Ji, X., & Hu, L. (2016). Na-Ion Battery Anodes: Materials and Electrochemistry. *Accounts of Chemical Research*, *49*(2), 231-240. 10.1021/acs.accounts.5b00482
- Lv, W., Wang, Z., Cao, H., Sun, Y., Zhang, Y., & Sun, Z. (2018). A Critical Review and Analysis on the Recycling of Spent Lithium-Ion Batteries. *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, *6*(2), 1504-1521. 10.1021/acssuschemeng.7b03811
- Majeau-Bettez, G., Hawkins, T. R., & Strømman, A. H. (2011). Life Cycle Environmental Assessment of Lithium-Ion and Nickel Metal Hydride Batteries for Plug-In Hybrid and Battery Electric Vehicles. *Environmental Science & Technology*, *45*(10), 4548-4554. 10.1021/es103607c

- Matheys, J., Timmermans, J., Van Mierlo, J., Meyer, S., & Peter Van, d. B. (2009). Comparison of the environmental impact of five electric vehicle battery technologies using LCA. *International Journal of Sustainable Manufacturing*, 1(3), 318-329. 10.1504/IJSM.2009.023977
- Ojanguren, A., Mittal, N., Lizundia, E., & Niederberger, M. (2021). Stable Na Electrodeposition Enabled by Agarose-Based Water-Soluble Sodium Ion Battery Separators. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 13(18), 21250-21260. 10.1021/acsami.1c02135
- Palomares, V., Serras, P., Villaluenga, I., Hueso, K. B., Carretero-González, J., & Rojo, T. (2012). Na-ion batteries, recent advances and present challenges to become low cost energy storage systems. *Energy & Environmental Science*, 5(3), 5884-5901. 10.1039/C2EE02781J
- Park, J., Lee, J., Alfaruqi, M. H., Kwak, W., Kim, J., & Hwang, J. (2020). Initial investigation and evaluation of potassium metal as an anode for rechargeable potassium batteries. *Journal of Materials Chemistry A*, 8(33), 16718-16737. 10.1039/D0TA03562A
- Peters, J. F., Peña Cruz, A., & Weil, M. (2019). *Exploring the Economic Potential of Sodium-Ion Batteries*10.3390/batteries5010010
- Peters, J., Baumann, M., Binder, J., & Weil, M. (2021). On the environmental competitiveness of sodium-ion batteries under a full life cycle perspective – a cell-chemistry specific modelling approach. *Sustainable Energy & Fuels*, 510.1039/D1SE01292D
- Peters, J., Buchholz, D., Passerini, S., & Weil, M. (2016). Life cycle assessment of sodium-ion batteries. *Energy & Environmental Science*, 9(5), 1744-1751. 10.1039/C6EE00640J
- Piątek, J., Afyon, S., Budnyak, T. M., Budnyk, S., Sipponen, M. H., & Slabon, A. (2021). Sustainable Li-Ion Batteries: Chemistry and Recycling. *Advanced Energy Materials*, 11(43), 2003456. <https://doi.org/10.1002/aenm.202003456>
- Piccinno, F., Hischier, R., Seeger, S., & Som, C. (2018). Predicting the environmental impact of a future nanocellulose production at industrial scale: Application of the life cycle assessment scale-up framework. *Journal of Cleaner Production*, 174, 283-295. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2017.10.226>
- Porzio, J., & Scown, C. D. (2021). Life-Cycle Assessment Considerations for Batteries and Battery Materials. *Advanced Energy Materials*, 11(33), 2100771. <https://doi.org/10.1002/aenm.202100771>
- Ren, W., Zheng, Z., Xu, C., Niu, C., Wei, Q., An, Q., Zhao, K., Yan, M., Qin, M., & Mai, L. (2016). Self-sacrificed synthesis of three-dimensional Na<sub>3</sub>V<sub>2</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub> nanofiber network for high-rate sodium-ion full batteries. *Nano Energy*, 25, 145-153. <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2016.03.018>
- Rey, I. (2021). *Análisis de ciclo de vida comparativo de baterías para una economía circular*. UPV/EHU. Escuela de Ingeniería de Bilbao. Grado en Ingeniería Ambiental.

- Rey, I., Iturrondobeitia, M., Akizu-Gardoki, O., Minguez, R., & Lizundia, E. (2022). Environmental Impact Assessment of  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  Cathode Production for Sodium-Ion Batteries. *Advanced Energy and Sustainability Research*, n/a, 2200049. <https://doi.org/10.1002/aesr.202200049>
- Serrano-Luján, L., Víctor-Román, S., Toledo, C., Sanahuja-Parejo, O., Mansour, A. E., Abad, J., Amassian, A., Benito, A. M., Maser, W. K., & Urbina, A. (2019). Environmental impact of the production of graphene oxide and reduced graphene oxide. *SN Applied Sciences*, 1(2), 179. 10.1007/s42452-019-0193-1
- Sun, X., Luo, X., Zhang, Z., Meng, F., & Yang, J. (2020). Life cycle assessment of lithium nickel cobalt manganese oxide (NCM) batteries for electric passenger vehicles. *Journal of Cleaner Production*, 273, 123006. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2020.123006>
- Tao, S., Cui, P., Huang, W., Yu, Z., Wang, X., Wei, S., Liu, D., Song, L., & Chu, W. (2016). Sol-gel design strategy for embedded  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  particles into carbon matrices for high-performance sodium-ion batteries. *Carbon*, 96, 1028-1033. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2015.10.054>
- Titirici, M. (2021). Sustainable Batteries—Quo Vadis? *Advanced Energy Materials*, 11(10), 2003700. <https://doi.org/10.1002/aenm.202003700>
- Trost, B. M. (1991). The Atom Economy—A Search for Synthetic Efficiency. *Science*, 254(5037), 1471-1477. 10.1126/science.1962206
- Wu, Z., & Kong, D. (2018). Comparative life cycle assessment of lithium-ion batteries with lithium metal, silicon nanowire, and graphite anodes. *Clean Technologies and Environmental Policy*, 20(6), 1233-1244. 10.1007/s10098-018-1548-9
- Xu, Y., Wei, Q., Xu, C., Li, Q., An, Q., Zhang, P., Sheng, J., Zhou, L., & Mai, L. (2016). Layer-by-Layer  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  Embedded in Reduced Graphene Oxide as Superior Rate and Ultralong-Life Sodium-Ion Battery Cathode. *Advanced Energy Materials*, 6(14), 1600389. <https://doi.org/10.1002/aenm.201600389>
- Yu, Y., Chen, B., Huang, K., Wang, X., & Wang, D. (2014). Environmental impact assessment and end-of-life treatment policy analysis for Li-ion batteries and Ni-MH batteries. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 11(3), 3185-3198. 10.3390/ijerph110303185
- Zeng, X., Peng, J., Guo, Y., Zhu, H., & Huang, X. (2020). Research Progress on  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  Cathode Material of Sodium Ion Battery. *Frontiers in Chemistry*, 8 <https://www.frontiersin.org/article/10.3389/fchem.2020.00635>
- Zhang, Q., Wang, W., Wang, Y., Feng, P., Wang, K., Cheng, S., & Jiang, K. (2016). Controllable construction of 3D-skeleton-carbon coated  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  for high-performance sodium ion battery cathode. *Nano Energy*, 20, 11-19. <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2015.12.005>
- Zhang, X., Rui, X., Chen, D., Tan, H., Yang, D., Huang, S., & Yu, Y. (2019).  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ : an advanced cathode for sodium-ion batteries. *Nanoscale*, 11(6), 2556-2576. 10.1039/C8NR09391A

Zhang, Y., Zhu, X., Kai, D., Jiang, Y., Yan, Q., & Chen, B. (2021). Konjac glucomannan biopolymer as a multifunctional binder to build a solid permeable interface on  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3/\text{C}$  cathodes for high-performance sodium ion batteries. *Journal of Materials Chemistry A*, 9(15), 9864-9874. 10.1039/D1TA01167G



## ANEXO: INVENTARIOS

**Diagramas de flujo que resumen los procesos de fabricación de los diez cátodos de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$  junto con su correspondiente modelización de inventarios de materiales y energía (de ecoinvent v3.8):**

**Para el cátodo 1, denominado “Hierarchical carbon-NVP”:**

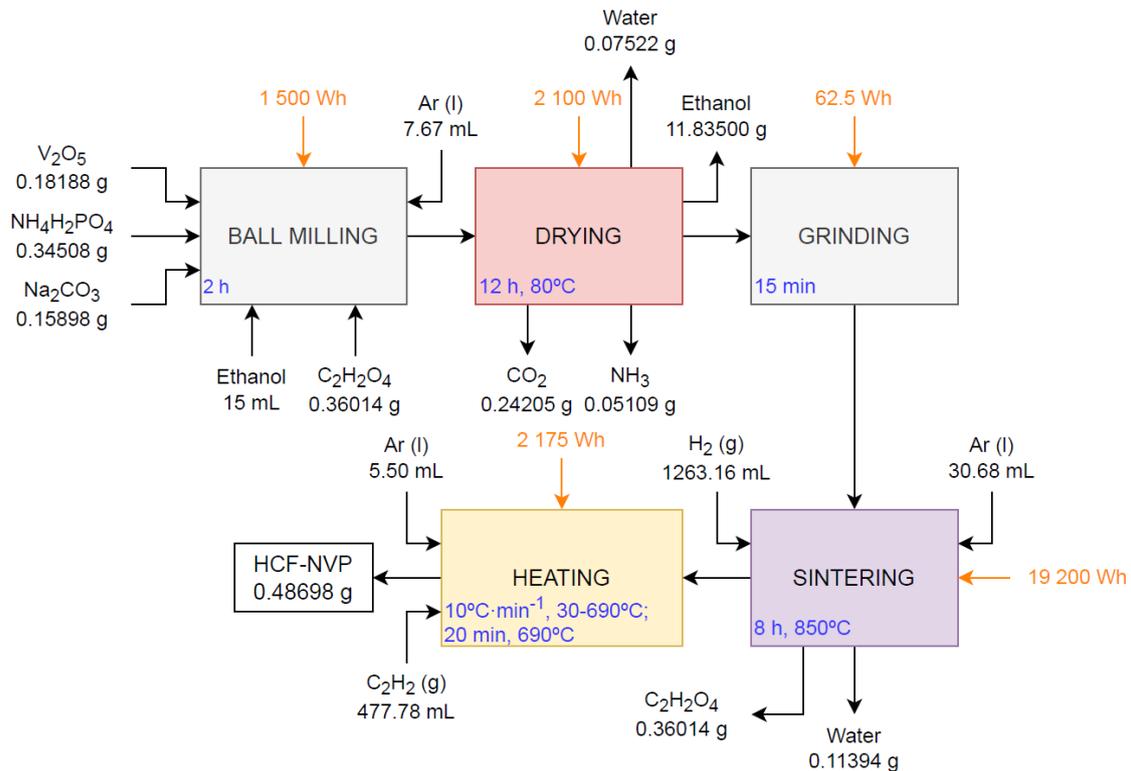


Figura 17. Diagrama de flujo del proceso de producción del cátodo NVP "Hierarchical carbon-NVP". Fuente: (Rey et al., 2022).

Una proporción estequiométrica de *vanadium pentoxide* ( $\text{V}_2\text{O}_5$ )<sup>1</sup>, *monoammonium phosphate* ( $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ ) y *sodium carbonate* ( $\text{Na}_2\text{CO}_3$ ), suponiendo 1 mmol, 3 mmol y 1.5 mmol, respectivamente, se introduce en un vial de molienda con 15 mL de *ethanol*. Se añade *oxalic acid* ( $\text{C}_2\text{H}_2\text{O}_4$ ) como agente reductor en una proporción molar de  $\text{V}_2\text{O}_5:\text{C}_2\text{H}_2\text{O}_4 = 1:4$ . La mezcla se muele con bolas de alta energía durante 2 horas en atmósfera de argón. En este tipo de proceso, el uso de gas argón<sup>2</sup> suele ser de  $50 \text{ mL}\cdot\text{min}^{-1}$ , por lo que se ha utilizado esta proporción. La

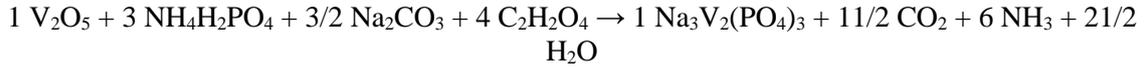
<sup>1</sup> *Vanadium pentoxide* no aparece en la base de datos ecoinvent 3.8, por lo que se ha realizado un proceso de síntesis.

<sup>2</sup> *Argon gas* no aparece en la base de datos ecoinvent 3.8, por lo que es necesario un proceso de conversión a *liquid argon*.

electricidad consumida es de 1 500 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- TMAX® molino planetario de bolas, modelo TMAX-XQM-0.4 para volúmenes hasta 0.1 L; 0.75 kW.

Se considera la siguiente reacción:



El precursor de la mezcla se seca a 80°C durante 6 h. Se supone que en este proceso el sólido retiene agua (20 vol.%). La electricidad consumida es de 2 100 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- GenLab® horno, modelo MINO/6 para volúmenes hasta 6 L; temperatura máxima 250°C; 350 W.

La muestra seca se tritura. Se supone un tiempo de 15 minutos. La electricidad consumida es de 62.5 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Retsch® molino de mortero, modelo RM 2000; 250 W.

La muestra molida se sinteriza a 850°C durante 8 h en una atmósfera de argón/hidrógeno (Ar:H<sub>2</sub> = 95:5 en vol.). En este tipo de proceso, el uso de gas argón suele ser de 50 mL·min<sup>-1</sup>, por lo que se ha utilizado esta proporción. Por lo tanto, la electricidad consumida es de 19 200 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Carbolite® horno de cámara estándar, modelo CWF 11/5 para volúmenes hasta 5 L; temperatura máxima 1000°C; 2.4 kW.

Después de la sinterización, las partículas creadas de Na<sub>3</sub>V<sub>2</sub>(PO<sub>4</sub>) se colocan en un horno de tubo y se calientan a una velocidad de 10°C·min<sup>-1</sup> en una atmósfera de argón. Se introduce gas acetileno (Ar:C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> = 90:10 en vol.) mientras se aumenta la temperatura a 690°C y se mantiene a 690°C durante 20 minutos. Al igual que antes, el uso de gas argón es de 50 mL·min<sup>-1</sup>. La descomposición del acetileno a alta temperatura da lugar a la deposición de carbono en la superficie de las partículas de Na<sub>3</sub>V<sub>2</sub>(PO<sub>4</sub>) y al crecimiento de las nanofibras para obtener Na<sub>3</sub>V<sub>2</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub> con marco jerárquico de carbono (HCF-NVP). El consumo de electricidad es de 2 175 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Nabertherm® horno tubular compacto, modelo RD 30/200/11; temperatura máxima 1100°C; 1.5 kW.

Según el análisis elemental que figura en el artículo publicado, el contenido de carbono resultó ser de aproximadamente 6.41 % en peso. Así, la masa total de HCF-NVP es de 0.48698 g.

El cátodo se prepara aplicando la pasta que contiene un 70 wt% de HCF-NVP, un 20 wt% de *acetylene black* y un 10 wt% de *poly(vinyl difluoride)* (PVDF) sobre una lámina de Al (la lámina de Al no se contabiliza al no considerarse parte del cátodo). Se supone que la pasta recubierta se seca durante la noche (12 h) a 120°C. El consumo de electricidad es de 7 200 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- ThermoFisher® estufa de vacío, modelo 6256 para volúmenes hasta 19.8 L; temperatura máxima 220°C; 600 W.

Tabla 7. Modelado del cátodo NVP "*Hierarchical carbon-NVP*".

Item	Amount	Source/provider
Vanadium pentoxide	0.18188 g	<b>Own source</b>
Acetylene	0.52555 g	Market for acetylene   acetylene   Cutoff, U - RER
Argon, liquid	59.4072 g	Argon production, liquid   argon, liquid   Cutoff, U - RER
Carbon black	0.13914 g	Market for carbon black   carbon black   Cutoff, U - GLO
Ethanol, without water, in 99.7% solution state, from fermentation	11.83500 g	Market for ethanol, without water, in 99.7% solution state, from fermentation   ethanol, without water, in 99.7% solution state, from fermentation   Cutoff, U - GLO
Hydrogen, gaseous	0.11356 g	Market for hydrogen, gaseous   hydrogen, gaseous   Cutoff, U - GLO
Monoammonium phosphate	0.34508 g	Market for monoammonium phosphate   monoammonium phosphate   Cutoff, U - RER
N-methyl-2-pyrrolidone	40.12715 g	Market for N-methyl-2-pyrrolidone   N-methyl-2-pyrrolidone   Cutoff, U - GLO
Oxalic acid	0.36014 g	Oxalic acid   elementary flow   emission to air   unspecified
Polyvinylfluoride	0.06957 g	Market for polyvinylfluoride   polyvinylfluoride   Cutoff, U - GLO
Sodium carbonate	0.15898 g	Sodium carbonate   elementary flow   resource   in ground
Energy usage (drying, milling, sintering and calcination)	25 037.5 Wh	Market group for electricity, high voltage   electricity, high voltage   Cutoff, U - ENTSO-E

Para el cátodo 2, denominado “*rGO-LbL NVP*”:

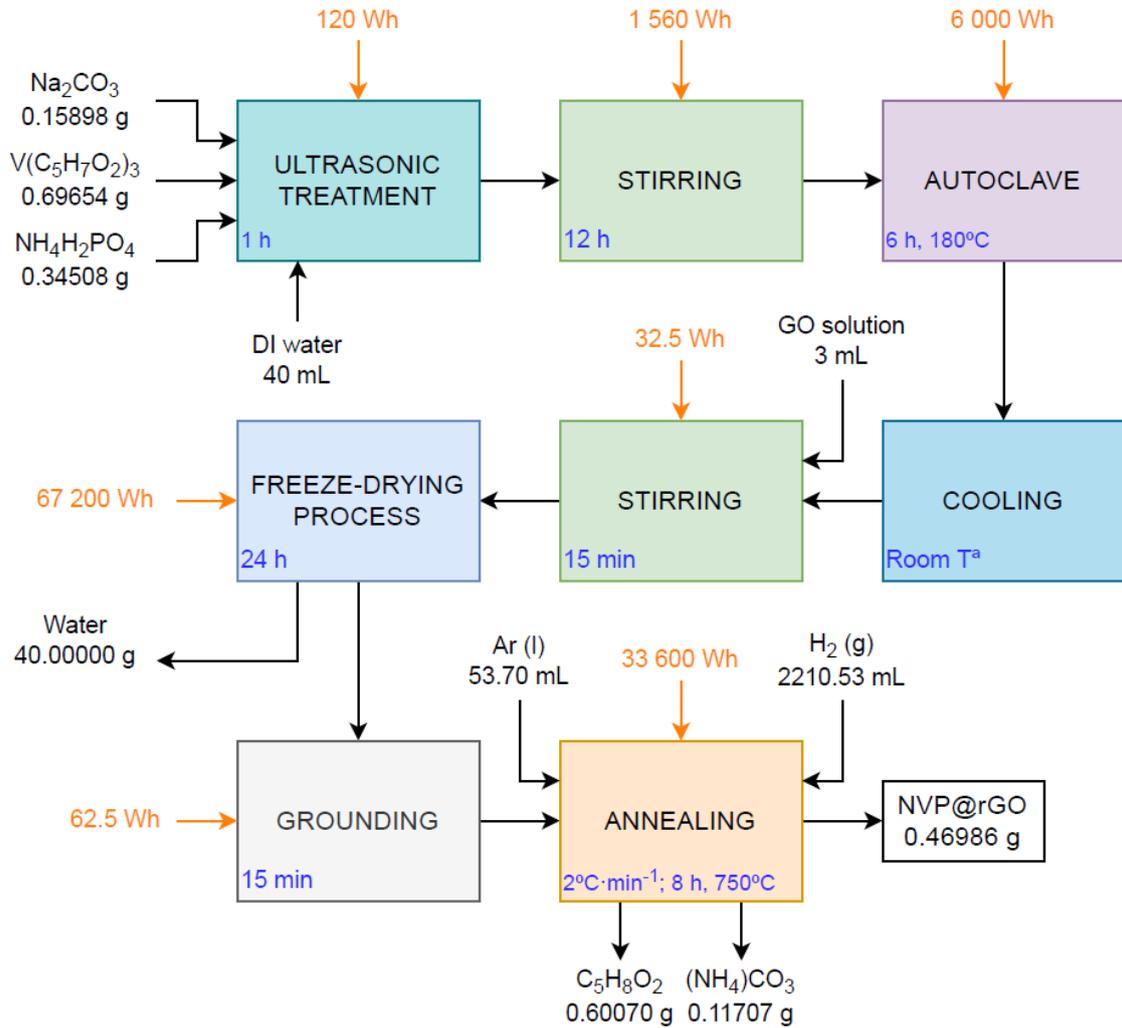
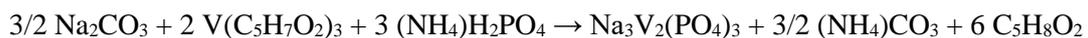


Figura 18. Diagrama de flujo del proceso de producción del cátodo NVP "*rGO-LbL NVP*". Fuente: (Rey et al., 2022).

En un vaso de precipitado que contiene 40 mL de *deionised water*, se añade una proporción estequiométrica (1.5 mmol : 2 mmol : 3 mmol) de *sodium carbonate* ( $\text{Na}_2\text{CO}_3$ ), *vanadium (III) acetylacetonate* ( $\text{V}(\text{C}_5\text{H}_7\text{O}_2)_3$ )<sup>3</sup> y *ammonium dihydrogen phosphate* ( $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ ).

Se considera la siguiente reacción:



<sup>3</sup> *Vanadium (III) acetylacetonate* no aparece en la base de datos ecoinvent 3.8, por lo que se ha realizado un proceso de síntesis.

A continuación, se realiza un tratamiento de ultrasonidos durante 1 hora. El consumo de electricidad es de 120 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- VEVOR® limpiador ultrasónico digital, para volúmenes de hasta 3 L; 120 W.

La solución tratada se agita durante la noche (12 h). El consumo de electricidad es de 1 560 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Scilogex® agitador, modelo OS40-PRO; capacidad máxima de agitación 40 L; 130 W.

El precursor homogéneo se transfiere a un autoclave de acero inoxidable revestido de teflón y se mantiene a 180°C durante 6 horas. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Thermoconcept® horno de mufla compacto, modelo KLE 03/11 para volúmenes hasta 3 L; temperatura máxima 1100°C; 1 kW.

Tras el enfriamiento natural a temperatura ambiente, se añaden 3 mL de solución de GO<sup>4</sup> (*graphite oxide*) (3 mg·mL<sup>-1</sup>) bajo agitación vigorosa. Se supone un tiempo de 15 min. La electricidad consumida es de 32.5 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Scilogex® agitador, modelo OS40-PRO; capacidad máxima de agitación 40 L; 130 W.

A continuación, se realiza un proceso de liofilización. Se supone un tiempo de 24 h. El consumo de electricidad es de 67 200 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Liofilizador Telstar® liofilizador, modelo LyoAlfa Plus 10-55; temperatura final del condensador -55°C; 2.8 kW.

El producto se muele. Se supone un tiempo de 15 minutos. La electricidad consumida es de 62.5 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Retsch® molino de mortero, modelo RM 2000; 250 W.

La muestra molida se recuece a 750°C durante 8 h con una velocidad de calentamiento de 2 °C·min<sup>-1</sup> en una atmósfera de argón/hidrógeno (Ar:H<sub>2</sub> = 95:5 en vol.) para obtener el compuesto NVP@rGO. En este tipo de proceso, el uso de gas argón suele ser de 50 mL·min<sup>-1</sup>, por lo que se ha utilizado esta proporción. La electricidad consumida es de 33 600 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

---

<sup>4</sup> GO no aparece en la base de datos ecoinven 3.8, por lo que se ha realizado un proceso de síntesis.

- Carbolite® horno de cámara estándar, modelo CWF 11/5 para volúmenes hasta 5 L; temperatura máxima 1000°C; 2.4 kW.

De acuerdo con las trazas del TGA (*thermal gravimetric analysis*) que figura en el artículo publicado, se encontró que el contenido de carbono era de alrededor del 3 wt%. Así, la masa total de NVP@rGO es de 0.46986 g.

El cátodo se prepara aplicando una pasta que contiene un 70 wt% de NVP@rGO, un 20 wt% de *carbón black* y un 10 wt% de *poly(vinyl difluoride)* (PVDF) con la cantidad adecuada de *N-methyl-2-pyrrolidone* (NMP) como disolvente sobre una lámina de Al. Se supone una proporción de NMP:material activo = 0,8 mL:10 mg. Por lo tanto, se requiere una cantidad de 37.58880 mL de NMP. A continuación, el electrodo de trabajo se seca en un horno de vacío durante 6 h a 100°C. La electricidad consumida es de 3 600 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- ThermoFisher® estufa de vacío, modelo 6256 para volúmenes hasta 19.8 L; temperatura máxima 220°C; 600 W.

Tabla 8. Modelado del cátodo NVP "rGO-LbL NVP".

Item	Amount	Source/provider
GO solution	0.00900 g	Own source
Vanadium (III) acetylacetonate	0.69654 g	Own source
Argon, liquid	74.92800 g	Argon production, liquid   argon, liquid   Cutoff, U - RER
Carbon black	0.13425 g	Market for carbon black   carbon black   Cutoff, U - GLO
Hydrogen, gaseous	0.19895 g	market for hydrogen, gaseous   hydrogen, gaseous   Cutoff, U - GLO
Monoammonium phosphate	0.34508 g	Market for monoammonium phosphate   monoammonium phosphate   Cutoff, U - RER
N-methyl-2-pyrrolidone	38.71646 g	Market for N-methyl-2-pyrrolidone   N-methyl-2-pyrrolidone   Cutoff, U - GLO
Polyvinylfluoride	0.06712 g	Market for polyvinylfluoride   polyvinylfluoride   Cutoff, U - GLO
Sodium carbonate	0.15898 g	Sodium carbonate   elementary flow   resource   in ground
Water, deionised	40.00000 g	Market for water, deionised   water, deionised   Cutoff, U - Europe without Switzerland
Energy usage (ultrasonic treatment, stirring, heating, freeze-drying process and annealing)	112 175.0 Wh	Market group for electricity, high voltage   electricity, high voltage   Cutoff, U - ENTSO-E

**Para el cátodo 3, denominado “ $\mu$ Porous NVP”:**

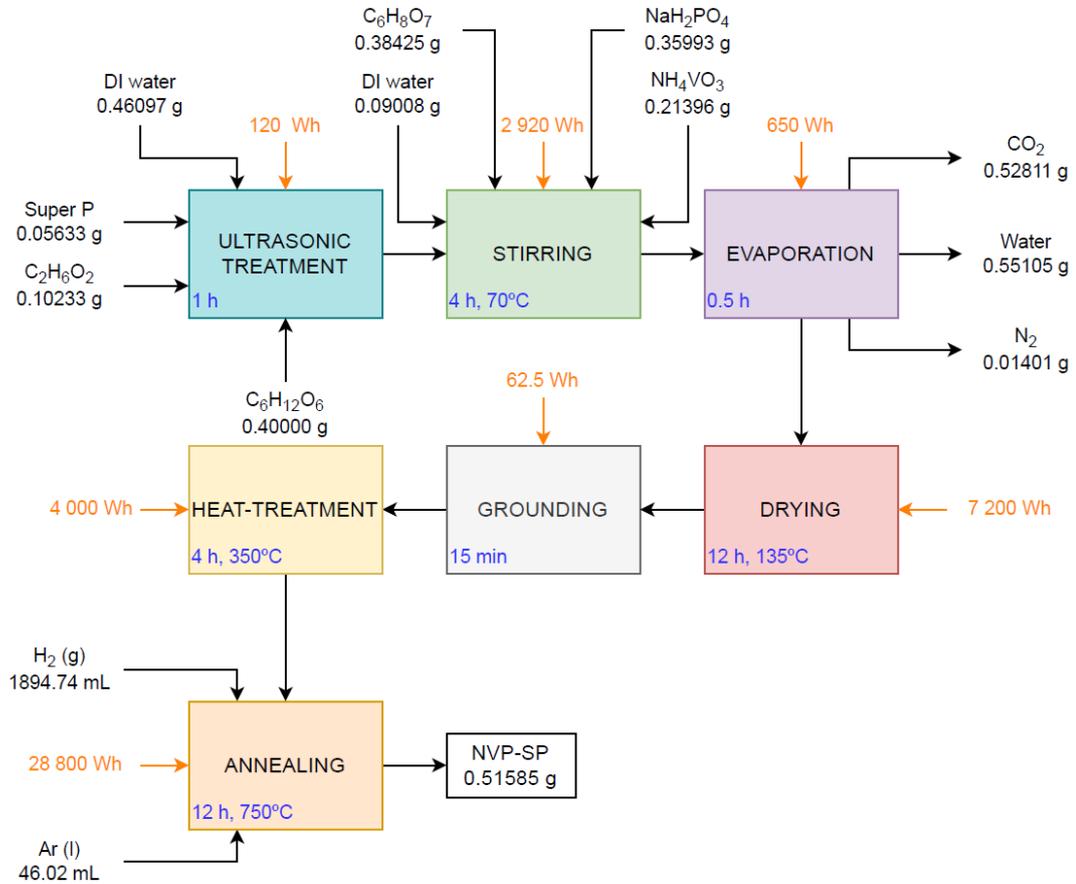


Figura 19. Diagrama de flujo del proceso de producción del cátodo NVP " $\mu$ Porous NVP". Fuente: (Rey et al., 2022).

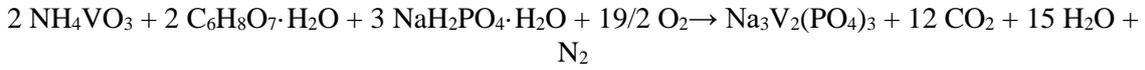
En primer lugar, se añade una cierta cantidad de Super P (*carbón black*) en un disolvente mezclado de *distilled water* y *ethylene glycol* con la proporción volumétrica de 5:1. Se asume una concentración de Super P del 10 wt%. Así, considerando la reacción señalada más adelante, la cantidad de Super P es de 0.05633 g. Por lo tanto, se añaden 0.46100 g de *distilled water* y 0.10233 g de *ethylene glycol*. Se realiza un tratamiento con ultrasonidos durante 1 hora. El consumo de electricidad es de 120 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- VEVOR® limpiador ultrasónico digital, para volúmenes hasta 3 L; 120 W.

*Ammonium metavanadate* ( $NH_4VO_3$ ), *sodium phosphate monohydrated* ( $NaH_2PO_4 \cdot H_2O$ ) y *citric acid monohydrated* ( $C_6H_8O_7 \cdot H_2O$ ) en una proporción molar de 2:3:2, suponiendo 2 mmol, 3 mmol y 2 mmol, respectivamente, se añaden a la solución anterior bajo agitación constante a 70 °C durante 4 h. La electricidad consumida es de 2 920 Wh. El consumo de energía se ha calculado con los siguientes instrumentos de laboratorio:

- Scilogex® agitador, modelo OS40-PRO; capacidad máxima de agitación 40 L; 130 W.
- AccuPlate® placa calefactora, modelo D0400-230V; rango de temperatura 5°C - 550 °C; 600 W.

Se considera la siguiente reacción (Adams et al., 2017):



Los productos de la mezcla se transfieren a un evaporador rotativo durante 0.5 horas para evaporar el agua y formar un gel. El consumo de electricidad es de 650 Wh. El consumo de energía se ha calculado utilizando el siguiente instrumento de laboratorio:

- Heidolph® evaporador rotativo, modelo Hei-VAP Core para volúmenes hasta 3 L; matraz de evaporación de tamaño máximo de 5 L; 1,3 kW.

A continuación, el gel se seca en un horno de vacío a 135 °C durante toda la noche (12 h). La electricidad consumida es de 7 200 Wh. El consumo de energía se ha calculado utilizando el siguiente instrumento de laboratorio:

- ThermoFisher® estufa de vacío, modelo 6256 para volúmenes hasta 19.8 L; temperatura máxima 220°C; 600 W.

Los productos se trituran. Se supone un tiempo de 15 min. La electricidad consumida es de 62.5 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Retsch® molino de mortero, modelo RM 2000; 250 W.

La muestra molida se trata térmicamente a 350°C durante 4 h. La electricidad consumida es de 4 000 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Thermoconcept® mufla compacta, modelo KLE 03/11 para volúmenes hasta 3 L; temperatura máxima 1100°C; 1 kW.

Se realiza un recocido a 750°C durante 12 h en una atmósfera de argón/hidrógeno (Ar:H<sub>2</sub> = 95:5 en vol.) para conseguir los productos finales NVP/SP. En este tipo de proceso, el uso de gas argón suele ser de 50 mL·min<sup>-1</sup>, por lo que se ha utilizado esta proporción. El consumo de electricidad es de 28 800 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Carbolite® horno de cámara estándar, modelo CWF 11/5 para volúmenes hasta 5 L; temperatura máxima 1000°C; 2.4 kW.

De acuerdo con las trazas del TGA que figura en el artículo publicado, se encontró que el contenido de carbono era de alrededor de 11.65 % en peso. Así, la masa total de NVP-SP es de 0.51585 g.

El cátodo se prepara mezclando el 80 wt% en peso del material activo, el 10wt % de *acetylene carbon* y el 10 wt% de aglutinante de *poly(vinyl difluoride)* (PVDF) en 41.26800 mL de *N-methyl-2-pyrrolidone* (NMP). Se supone una proporción de NMP:material activo = 0.8 mL:10 mg. La pasta obtenida se pega en una lámina de Al y se seca a 80°C durante 4 h en una estufa de aire y luego a 110°C durante 12 h en una estufa de vacío. La electricidad consumida es de 7 203.2 Wh. El consumo de energía se ha calculado utilizando los siguientes instrumentos de laboratorio:

- Faithful® estufa de secado de aire forzado, modelo WGL-30B para volúmenes hasta 30 L; 0.8 kW.
- ThermoFisher® estufa de vacío, modelo 6256 para volúmenes hasta 19,8 L; temperatura máxima 220°C; 600 W.

Tabla 9. Modelado del cátodo NVP "*μPorous NVP*".

Item	Amount	Source/provider
Ammonium metavanadate	0.21396 g	<b>Own source</b>
Argon, liquid	46.02551 g	Argon production, liquid   argon, liquid   Cutoff, U - RER
Carbon black	0.12081 g	Market for carbon black   carbon black   Cutoff, U - GLO
Citric acid	0.38425 g	Market for citric acid   citric acid   Cutoff, U - GLO
Ethylene glycol	0.10233 g	Market for ethylene glycol   ethylene glycol   Cutoff, U - GLO
Hydrogen, gaseous	0.17053 g	Market for hydrogen, gaseous   hydrogen, gaseous   Cutoff, U - GLO
N-methyl-2-pyrrolidone	42.50604 g	Market for N-methyl-2-pyrrolidone   N-methyl-2-pyrrolidone   Cutoff, U - GLO
Polyvinylfluoride	0.06448 g	Market for polyvinylfluoride   polyvinylfluoride   Cutoff, U - GLO
Sodium phosphate	0.35993 g	Market for sodium phosphate   sodium phosphate   Cutoff, U - RER
Water, deionised	0.55105 g	Market for water, deionised   water, deionised   Cutoff, U - Europe without Switzerland
Energy usage (ultrasonic treatment, rotary evaporating, drying, grounding, heating and annealing)	50 955.7 Wh	Market group for electricity, high voltage   electricity, high voltage   Cutoff, U - ENTSO-E

Para el cátodo 4, denominado “*N-doped carbon NVP*”:

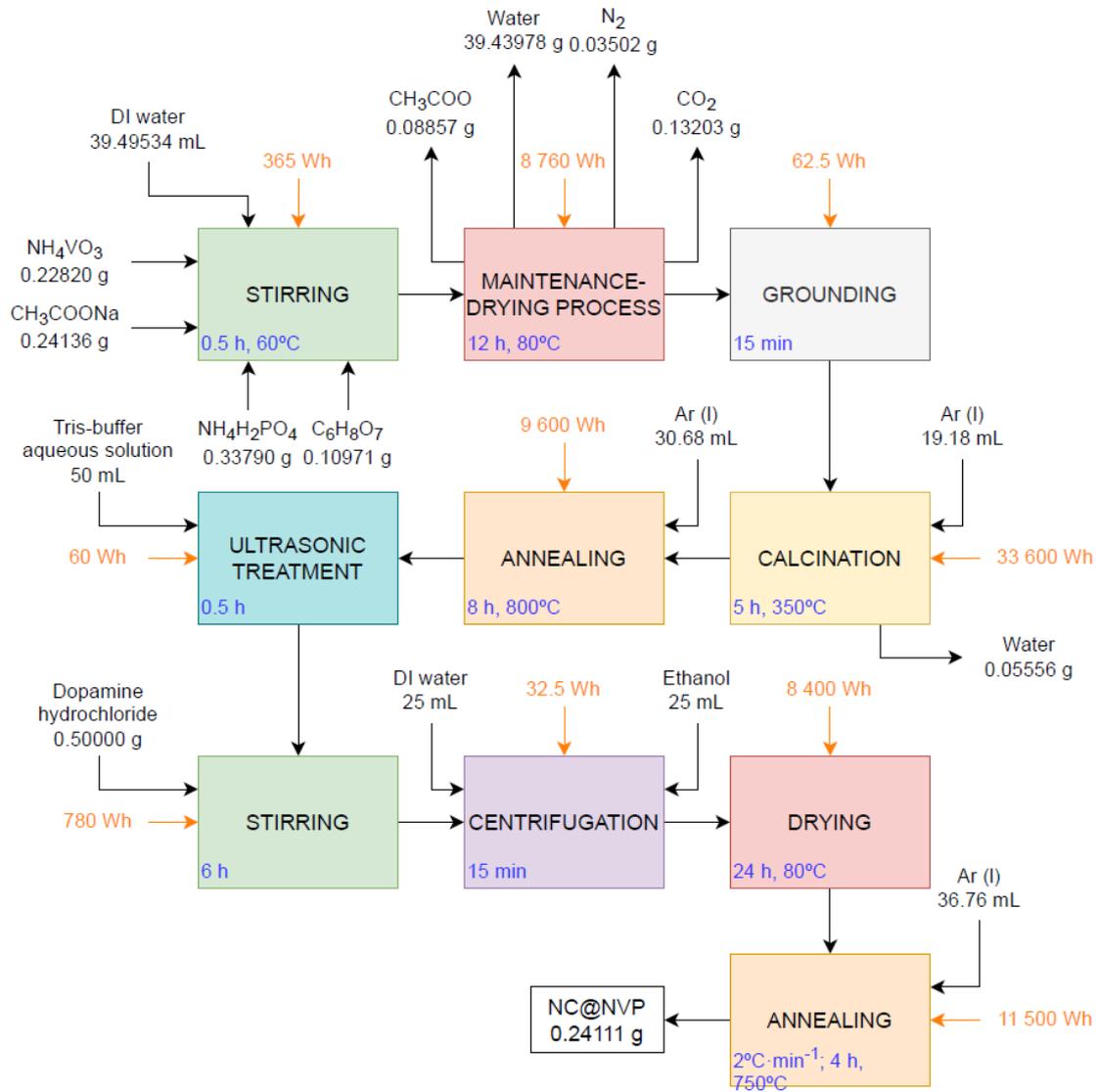


Figura 20. Diagrama de flujo del proceso de producción del cátodo NVP "*N-doped carbon NVP*". Fuente: (Rey et al., 2022).

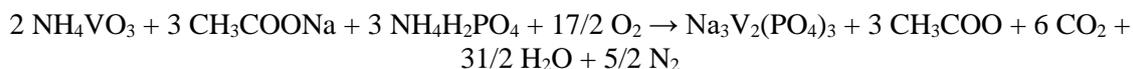
En primer lugar, se disuelven 0.22820 g de *ammonium metavanadate* ( $\text{NH}_4\text{VO}_3$ )<sup>5</sup> en 39.49534 mL de *distilled water* con agitación a 60°C, y a continuación se añaden 0.24136 g de *sodium acetate* ( $\text{CH}_3\text{COONa}$ ), 0.33790 g de *monoammonium phosphate* ( $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ ) y 0.10971 g de *citric acid* ( $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7$ ). Se supone un tiempo de 0.5 h. La electricidad consumida es de 365 Wh. El consumo de energía se ha calculado con los siguientes instrumentos de laboratorio:

- Scilogex® agitador, modelo OS40-PRO; capacidad máxima de agitación 40 L; 130 W.

<sup>5</sup> *Ammonium metavanadate* no aparece en la base de datos ecoinvent 3.8, por lo que se ha realizado un proceso de síntesis.

- AccuPlate® placa calefactora, modelo D0400-230V; rango de temperatura 5°C - 550 °C; 600 W.

Se considera la siguiente reacción:



Una vez que la solución se transforma en un gel transparente, se mantiene a 80°C hasta que se seca. Se supone un tiempo de 12 h. Se supone que en este proceso el sólido retuvo agua (20 vol.%). El consumo de electricidad es de 8.760 Wh. El consumo de energía se ha calculado con los siguientes instrumentos de laboratorio:

- Scilogex® agitador, modelo OS40-PRO; capacidad máxima de agitación 40 L; 130 W.
- AccuPlate® placa calefactora, modelo D0400-230V; rango de temperatura 5°C - 550 °C; 600 W.

Se tritura el gel seco. Se supone un tiempo de 15 min. La electricidad consumida es de 62.5 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Molino de mortero Retsch® molino de mortero, modelo RM 2000; 250 W.

El precursor molido se calcina a 350°C durante 5 h en una atmósfera de argón. En este tipo de proceso, el uso de gas argón suele ser de 50 mL·min<sup>-1</sup>, por lo que se ha utilizado esta proporción. La electricidad consumida es de 33 600 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Carbolite® horno de cámara estándar, modelo CWF 11/5 para volúmenes hasta 5 L; temperatura máxima 1000°C; 2,4 kW.

El producto se recuece en un horno de cuarzo a 800°C durante 8 h con una velocidad de calentamiento de 5°C·min<sup>-1</sup> en atmósfera de argón para obtener el NVP. Se ha utilizado la misma proporción de argón anteriormente señalada. La electricidad consumida es de 9 600 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- MTI® horno de tubo de cuarzo, modelo GSL-1100X; temperatura máxima 1100°C; velocidad máxima de calentamiento 10°C·min<sup>-1</sup>; 1.2 kW.

A continuación, se dispersan 0.2 g de polvo de NVP preparado en una *tris-buffer aqueous solution* (50 mL, 10 mM, 10 pH) mediante ultrasonidos durante 30 minutos. La *tris-buffer aqueous solution* (50 mL, 10 mM, 10 pH) se prepara añadiendo 0.06067 g de *tris(hydroxymethyl)aminomethane* a 50 mL de *deionised water*. La electricidad consumida es de 60 Wh. El consumo de energía se ha calculado el siguiente instrumento de laboratorio:

- VEVOR® limpiador ultrasónico digital, para volúmenes de hasta 3 L; 120 W.

A continuación, se disuelven 0.5 g de *dopamine hydrochloride* con un agitado vigoroso durante 6 h. El consumo de electricidad es de 780 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Scilogex® agitador, modelo OS40-PRO; capacidad máxima de agitación 40 L; 130 W.

El NVP recubierto de *polydopamine* se lava mediante una centrifugadora con una cantidad supuesta de 25 mL de agua destilada y 25 mL de etanol. Se supone un tiempo de 15 min. La electricidad consumida es de 32.5 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- SIGMA® centrifugadora, modelo 2-6E; capacidad máxima 4 x 120 mL, 30 x 15 mL; velocidad máxima de giro 4 000 rpm; 130 W.

El producto se seca a 80 °C en un horno durante 24 h. Se supone que en este proceso el sólido retiene agua (20 vol.%). La electricidad consumida es de 8 400 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- GenLab® horno, modelo MINO/6 para volúmenes hasta 6 L; temperatura máxima 250°C; 350 W.

Por último, el NVP envuelto en carbono dopado con N (NC@NVP) se obtiene tras el recocido en un horno de cuarzo a 750 °C durante 4 h en atmósfera de argón con una velocidad de calentamiento de 2°C·min<sup>-1</sup>. En este tipo de procesos, el uso de gas argón suele ser de 50 mL·min<sup>-1</sup>, por lo que se ha utilizado esta proporción. La electricidad consumida es de 4 800 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- MTI® horno de tubo de cuarzo, modelo GSL-1100X; temperatura máxima 1100°C; velocidad máxima de calentamiento 10°C·min<sup>-1</sup>; 1,2 kW.

Según las trazas del TGA que figura en el artículo publicado, el contenido de carbono resultó ser de 15.43 wt%. Además, como el contenido de carbono es el resultado de la carbonización del precursor de la *polydopamine*, se espera que el material de carbono del NC@NVP contenga grupos ricos en nitrógeno en la molécula. El análisis elemental mencionado en el manuscrito indica que el contenido de N en la capa de carbono envuelta y dopada con N del NC@NVP es de 1.62 wt% en peso. En consecuencia, la masa total del NC@NVP es de 0.24111 g.

El cátodo se prepara a partir de una suspensión de 80 wt% del material activo, 10 wt% carbón black (Super P) y 10 wt% en peso de aglutinante de *poly(vinyl difluoride)* (PVDF) en 19.28880 mL de *N-methyl-2-pyrrolidone* (NMP). Se supone una proporción de NMP:material activo = 0.8

mL:10 mg. La lechada se recubre sobre una lámina de Al. El electrodo se seca a 80°C durante 24 h en un horno de vacío. La electricidad consumida es de 14 400 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- ThermoFisher® estufa de vacío, modelo 6256 para volúmenes hasta 19,8 L; temperatura máxima 220°C; 600 W.

Tabla 10. Modelado del cátodo NVP "*N-doped carbon NVP*".

Item	Amount	Source/provider
Ammonium metavanadate	0.22820 g	Own source
Dopamine hydrochloride	0.50000 g	Own source
Sodium acetate	0.24136 g	Own source
Tris(hydroxymethyl) aminomethane	0.06067 g	Own source
Argon, liquid	120.88600 g	Argon production, liquid   argon, liquid   Cutoff, U - RER
Carbon black	0.03014 g	Market for carbon black   carbon black   Cutoff, U - GLO
Citric acid	0.10971 g	Market for citric acid   citric acid   Cutoff, U - GLO
Ethanol, without water, in 99.7% solution state, from fermentation	11.83500 g	Market for ethanol, without water, in 99.7% solution state, from fermentation   ethanol, without water, in 99.7% solution state, from fermentation   Cutoff, U - GLO
Monoammonium phosphate	0.33790 g	Market for monoammonium phosphate   monoammonium phosphate   Cutoff, U - RER
N-methyl-2-pyrrolidone	19.86746 g	Market for N-methyl-2-pyrrolidone   N-methyl-2-pyrrolidone   Cutoff, U - GLO
Polyvinylfluoride	0.03014 g	Market for polyvinylfluoride   polyvinylfluoride   Cutoff, U - GLO
Water, deionised	39.49534 g	Market for water, deionised   water, deionised   Cutoff, U - Europe without Switzerland
Energy usage (ultrasonic treatment, rotary evaporating, drying, grounding, heating and annealing)	47 260.0 Wh	Market group for electricity, high voltage   electricity, high voltage   Cutoff, U - ENTSO-E

Para el cátodo 5, denominado “*N,B-doped carbon/NVP*”:

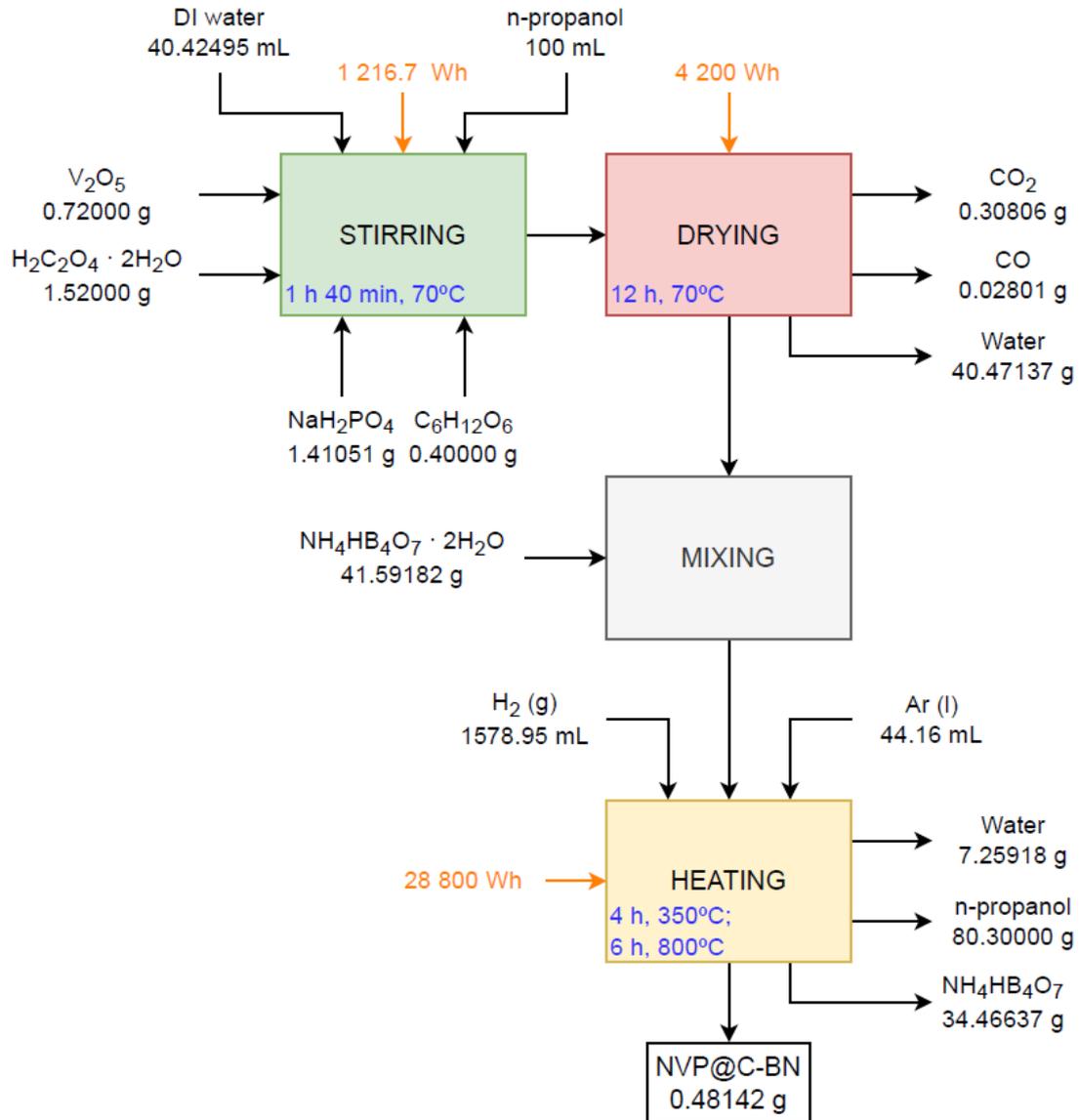


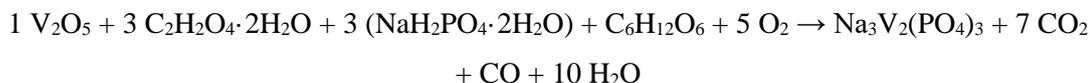
Figura 21. Diagrama de flujo del proceso de producción del cátodo NVP "*N,B-doped carbon/NVP*". Fuente: (Rey et al., 2022).

En primer lugar, se vierten 0.72 g de *vanadium pentoxide* ( $V_2O_5$ ) y 1.52 g de *oxalate dehydrated* ( $C_2H_2O_4 \cdot 2H_2O$ ) en 40 mL de *deionised water* y se agita a 70°C durante 1 h. A continuación, se disuelven 1.84 g de *sodium phosphate dihydrate* ( $NaH_2PO_4 \cdot 2H_2O$ ) y 0.4 g de *glucose* ( $C_6H_{12}O_6$ ) en la solución con agitación durante 10 min. A continuación, se añaden 100 mL de *n-propanol* con agitación continua durante 0.5 h. La electricidad consumida es de 1 216.7 Wh. El consumo de energía se ha calculado con los siguientes instrumentos de laboratorio:

- Scilogex® agitador, modelo OS40-PRO; capacidad máxima de agitación 40 L; 130 W.

- AccuPlate® placa calefactora, modelo D0400-230V; rango de temperatura 5°C - 550 °C; 600 W.

Se considera la siguiente reacción:



La solución se seca durante la noche. Se supone un tiempo de 12 h y una temperatura de 70°C. Se supone que en este proceso el sólido retiene agua (20 vol.%). La electricidad consumida es de 4 200 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- GenLab® horno, modelo MINO/6 para volúmenes hasta 6 L; temperatura máxima 250°C; 350 W.

El precursor seco se mezcla con  $\text{NH}_4\text{HB}_4\text{O}_7 \cdot \text{H}_2\text{O}$  en una proporción mas de 1:3 para obtener NVP@C-BN. La mezcla se precalienta a 350°C durante 4 h y se calienta a 800°C durante 6 h en una atmósfera de nitrógeno/hidrógeno. En este tipo de procesos, el uso de gas argón suele ser de  $50 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$ , por lo que se ha utilizado esta proporción para el gas nitrógeno. Teniendo en cuenta el trabajo de Jung et al. (2013), se supone una tasa de  $\text{N}_2:\text{H}_2 = 95/5$  (Jung et al., 2013). Se supone que el *n-propanol* añadido no reacciona (la cantidad de salida es la misma que la de entrada). La electricidad consumida es de 28 800 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Carbolite® horno de cámara estándar, modelo CWF 11/5 para volúmenes de hasta 5 L; temperatura máxima 1000°C; 2.4 kW.

De acuerdo con los resultados que figuran en el manuscrito, el contenido de carbono resultó ser de alrededor del 5.33 wt%. Así, la masa total de NVP@C-BN es de 0.48142 g.

El cátodo está compuesto por un 70 wt% de material activo, un 20 wt% de *carbon black* y un 10 wt% de *poly(vinyl difluoride)* (PVDF) en 38.51360 mL de *N-methyl-2-pyrrolidone* (NMP). Se supone una proporción de NMP:material activo = 0.8 mL:10 mg. Se supone que la lechada obtenida se pega sobre una lámina de Al y se seca a 120°C durante 12 h en una estufa de vacío. La electricidad consumida es de 7 200 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- ThermoFisher® horno de vacío, modelo 6256 para volúmenes hasta 19.8 L; temperatura máxima 220°C; 600 W.

Tabla 11. Modelado del cátodo NVP "*N,B-doped carbon/NVP*".

<b>Item</b>	<b>Amount</b>	<b>Source/provider</b>
Ammonium hydrogen borate	37.98069 g	<b>Own source</b>
Vanadium pentoxide	0.72000 g	<b>Own source</b>
1-propanol	80.30000 g	Market for 1-propanol   1-propanol   Cutoff, U - GLO
Carbon black	0.13755 g	Market for carbon black   carbon black   Cutoff, U - GLO
Glucose	0.40000 g	Market for glucose   glucose   Cutoff, U - GLO
Hydrogen, gaseous	0.14211 g	Market for hydrogen, gaseous   hydrogen, gaseous   Cutoff, U - GLO
Nitrogen, liquid	35.55000 g	Market for nitrogen, liquid   nitrogen, liquid   Cutoff, U - RER
N-methyl-2-pyrrolidone	39.66901 g	Market for N-methyl-2-pyrrolidone   N-methyl-2-pyrrolidone   Cutoff, U - GLO
Oxalic acid dihydrate	1.52000 g	Oxalic acid dihydrate   elementary flow   emission to air   low population density
Polyvinylfluoride	0.06877 g	Market for polyvinylfluoride   polyvinylfluoride   Cutoff, U - GLO
Sodium phosphate	1.41051 g	Market for sodium phosphate   sodium phosphate   Cutoff, U - RER
Water, deionised	44.03608 g	Market for water, deionised   water, deionised   Cutoff, U - Europe without Switzerland
Energy usage (stirring, heating, drying, preheating and heating)	41 416.7 Wh	Market group for electricity, high voltage   electricity, high voltage   Cutoff, U - ENTSO-E

Para el cátodo 6, denominado “La<sup>3+</sup>-doped NVP”:

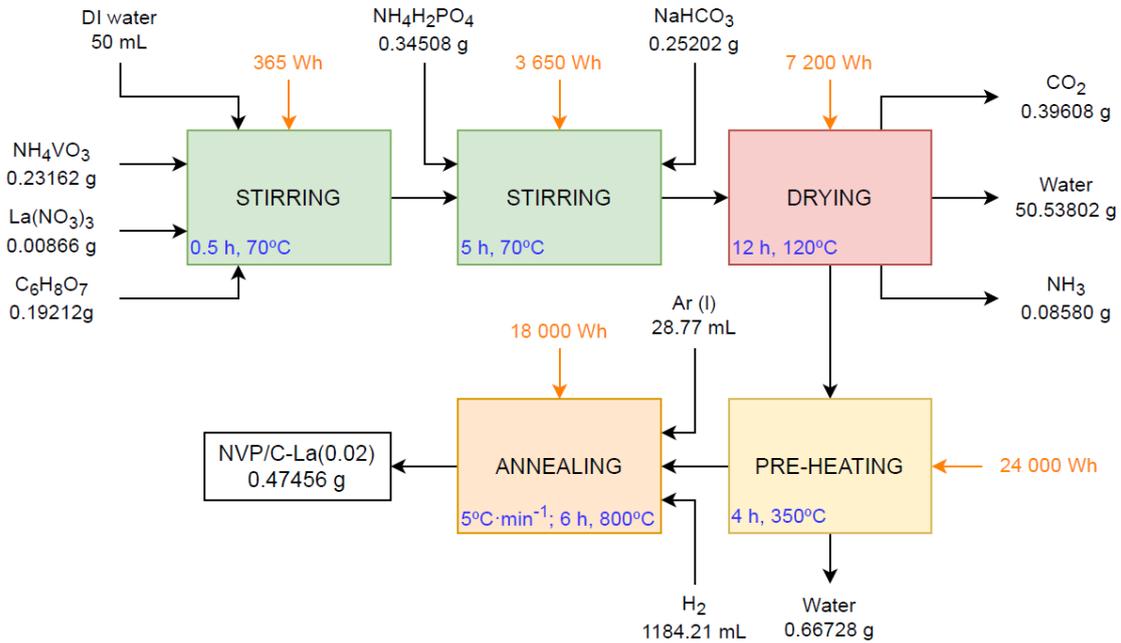


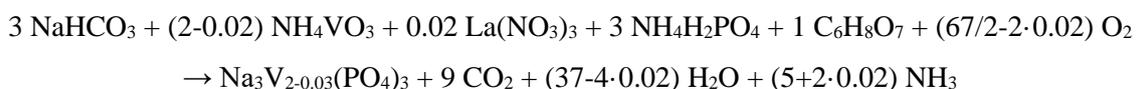
Figura 22. Diagrama de flujo del proceso de producción del cátodo NVP "La<sup>3+</sup>-doped NVP". Fuente: (Rey et al., 2022).

El proceso consiste en la síntesis del cátodo Na<sub>3</sub>V<sub>2-x</sub>La<sub>x</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>3</sub>/C (NVP/C-La(x)), cambiando la cantidad de La(x). De acuerdo con los resultados dados en el manuscrito, los mejores resultados son para un 2% de La, La(0,02), por lo que se ha utilizado esta cantidad.

En primer lugar, se disuelven 1 mmol de *citric acid* (C<sub>6</sub>H<sub>8</sub>O<sub>7</sub>), (2-0.02) mmol de *ammonium metavanadate* (NH<sub>4</sub>VO<sub>3</sub>) y 0.02 mmol de La(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub> en *deionised water* con agitación a 70°C durante 0.5 h. Se supone una cantidad de 50 mL de *deionised water*. Después, se añaden 3 mmol *monoammonium phosphate* (NH<sub>4</sub>H<sub>2</sub>PO<sub>4</sub>) y 3 mmol *desodium bicarbonate* (NaHCO<sub>3</sub>) con agitación continua a 70°C durante varias horas (5 h). La electricidad consumida es de 4 015 Wh. El consumo de energía se ha calculado con los siguientes instrumentos de laboratorio:

- Scilogex® agitador, modelo OS40-PRO; capacidad máxima de agitación 40 L; 130 W.
- AccuPlate® placa calefactora, modelo D0400-230V; rango de temperatura 5°C - 550 °C; 600 W.

Se considera la siguiente reacción:



A continuación, el gel formado se seca a 120°C durante toda la noche (12 h) en un horno de vacío para formar una espuma de color verde claro con un precursor rico en poros. El consumo de

electricidad es de 7 200 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- ThermoFisher® horno de vacío, modelo 6256 para volúmenes hasta 19,8 L; temperatura máxima 220°C; 600 W.

El gel seco se tritura. Se supone un tiempo de 15 min. La electricidad consumida es de 62.5 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Retsch® molinillo de mortero; modelo RM 2000; 250 W.

Finalmente, el precursor molido se precalienta para expulsar H<sub>2</sub>O y NH<sub>3</sub> a 350°C durante 4 h, seguido de un recocido a 800°C durante 6 h en una atmósfera de argón/hidrógeno (Ar:H<sub>2</sub> = 95:5 en vol.) con una velocidad de calentamiento de 5°C·min<sup>-1</sup>. En este tipo de proceso, el uso de gas argón suele ser de 50 mL·min<sup>-1</sup>, por lo que se ha utilizado esta proporción. El consumo de electricidad es de 24 000 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Carbolite® horno de cámara estándar, modelo CWF 11/5 para volúmenes de hasta 5 L; temperatura máxima 1000°C; 2.4 kW.

De acuerdo con las trazas del TGA que figura en el artículo publicado, se encontró que el contenido de carbono era de alrededor de 3.59 wt%. Así, la masa total de NVP/C-La(0.02) es de 0.47456 g.

El cátodo se prepara mezclando el 70 wt% de material activo, el 10 wt% de *acetylene black* y el 10 wt% del aglutinante *poly(vinyl difluoride)* (PVDF) en 36.60160 mL de *N-methyl-2-pyrrolidone* (NMP). Se supone una proporción de NMP:material activo = 0.8 mL:10 mg. La lechada se recubre sobre una lámina de Al. El electrodo se seca a 210°C durante la noche (12 h) en un horno de vacío. La electricidad consumida es de 7 200 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- ThermoFisher® horno de vacío, modelo 6256 para volúmenes hasta 19.8 L; temperatura máxima 220°C; 600 W.

Tabla 12. Modelado del cátodo NVP "*La<sup>3+</sup>-doped NVP*".

<b>Item</b>	<b>Amount</b>	<b>Source/provider</b>
Ammonium metavanadate	0.23162 g	<b>Own source</b>
Lanthanum(III) nitrate	0.00866 g	<b>Own source</b>
Argon, liquid	40.14000 g	Argon production, liquid   argon, liquid   Cutoff, U - RER
Carbon black	0.13559 g	Market for carbon black   carbon black   Cutoff, U - GLO
Citric acid	0.19212 g	Market for citric acid   citric acid   Cutoff, U - GLO
Hydrogen, gaseous	0.10658 g	Market for hydrogen, gaseous   hydrogen, gaseous   Cutoff, U - GLO
Monoammonium phosphate	0.34508 g	Market for monoammonium phosphate   monoammonium phosphate   Cutoff, U - RER
N-methyl-2-pyrrolidone	37.69965 g	Market for N-methyl-2-pyrrolidone   N-methyl-2-pyrrolidone   Cutoff, U - GLO
Polyvinylfluoride	0.06779 g	Market for polyvinylfluoride   polyvinylfluoride   Cutoff, U - GLO
Sodium bicarbonate	0.25202 g	Market for sodium bicarbonate   sodium bicarbonate   Cutoff, U - GLO
Water, deionised	50.00000 g	Market for water, deionised   water, deionised   Cutoff, U - Europe without Switzerland
Energy usage (stirring, drying, grounding, heating and annealing)	50 815.0 Wh	Market group for electricity, high voltage   electricity, high voltage   Cutoff, U - ENTSO-E

Para el cátodo 7, denominado “3D NVP nanofiber”:

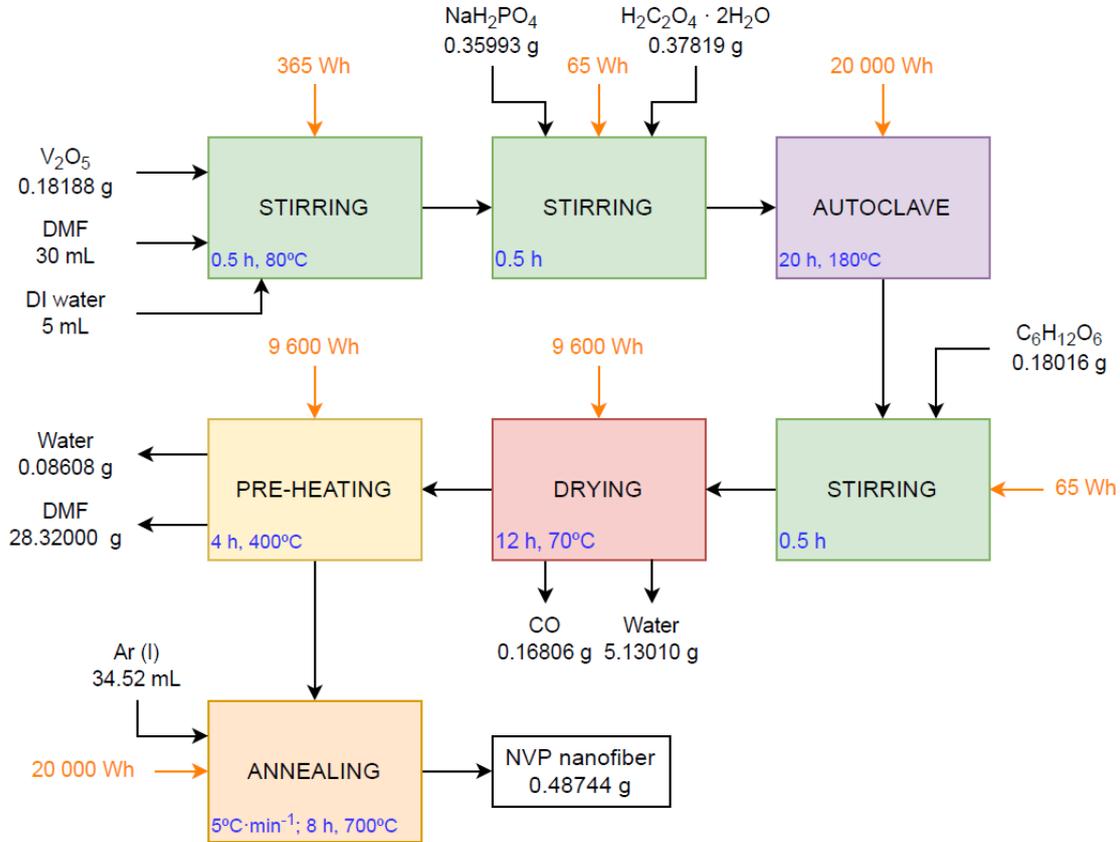


Figura 23. Diagrama de flujo del proceso de producción del cátodo NVP "3D NVP nanofiber". Fuente: (Rey et al., 2022).

En primer lugar, se disuelve 1 mmol de *vanadium pentoxide* ( $V_2O_5$ ) en 30 mL de *N,N*-*dimehtylformamide* (DMF) con agitación a 80°C durante 0.5 h. Se disuelven 3 mmol de *sodium dihydrogen phosphate* ( $NaH_2PO_4$ )<sup>6</sup>, 3 mmol de *oxalate-dehydrate* ( $H_2C_2O_4 \cdot 2H_2O$ ) y 5 mL de agua y se agita durante 0,5 h. La electricidad consumida es de 430 Wh. El consumo de energía se ha calculado con los siguientes instrumentos de laboratorio:

- Scilogex® agitador, modelo OS40-PRO; capacidad máxima de agitación 40 L; 130 W.
- AccuPlate® placa calefactora, modelo D0400-230V; rango de temperatura 5°C - 550 °C; 600 W.

Se considera la siguiente reacción:



<sup>6</sup> *Sodium dihydrogen phosphate* no aparece en la base de datos ecoinvent 3.8, por lo que se ha aproximado a *sodium phosphate*.

La solución se transfiere a un autoclave de acero inoxidable revestido de teflón y se mantiene a 180°C durante 20 h. La electricidad consumida es de 20 000 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Thermoconcept® mufla compacta, modelo KLE 03/11 para volúmenes hasta 3 L; temperatura máxima 1100°C; 1 kW.

A continuación, se añade *glucose* en una proporción molar de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3:\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6 = 1:1$ . La solución se agita de nuevo durante 0.5 h para obtener un precursor homogéneo. La electricidad consumida es de 65 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Scilogex® agitador, modelo OS40-PRO; capacidad máxima de agitación 40 L; 130 W.

El precursor homogéneo se seca en un horno de aire a 70°C. Se supone que en este proceso el sólido retiene agua (20 vol.%). Se supone un tiempo de 12 h. La electricidad consumida es de 9 600 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Faithful® Estufa de secado de aire forzado, modelo WGL-30B para volúmenes hasta 30 L; 0,8 kW.

El precursor seco se precalienta a 400°C durante 4 h.. Se supone que el NMP añadido no reacciona (la cantidad de salida es la misma que la de entrada). La electricidad consumida es de 9 600 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Carbolite® horno de cámara estándar, modelo CWF 11/5 para volúmenes hasta 5 L; temperatura máxima 1000°C; 2.4 kW.

A continuación, el precursor se recuece a 700°C durante 8 h en una atmósfera de argón con una relación de calentamiento de  $5^\circ\text{C}\cdot\text{min}^{-1}$ . Después, se obtiene una red de nanofibras de  $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ . En este tipo de proceso, el uso de gas argón suele ser de  $50\text{ mL}\cdot\text{min}^{-1}$ , por lo que se ha utilizado esta proporción. El consumo de electricidad es de 20 000 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Carbolite® horno de cámara estándar, modelo CWF 11/5 para volúmenes hasta 5 L; temperatura máxima 1000°C; 2.4 kW.

Según los resultados indicados en el manuscrito, el contenido de carbono resultó ser de alrededor del 6.5% en peso. Así, la masa total de NVP-F es de 0.48744 g.

El cátodo se prepara dispersando el 70 wt% de material activo, el 20 wt% *carbon black* y el 10 wt% de *poly(vinyl difluoride)* (PVDF) en 38.99600 mL de *N-methyl-2-pyrrolidone* (NMP) con agitación durante 0.5 h. Se supone una proporción de NMP:material activo = 0.8 mL:10 mg. A

continuación, la pasta se recubre uniformemente sobre una lámina de Al/Cu y se seca durante la noche (12 h) a 170°C. La electricidad consumida es de 4 265 Wh. El consumo de energía se ha calculado con los siguientes instrumentos de laboratorio:

- Scilogex® agitador, modelo OS40-PRO; capacidad máxima de agitación 40 L; 130 W.
- GenLab® horno, modelo MINO/6 para volúmenes hasta 6 L; temperatura máxima 250°C; 350 W.

Tabla 13. Modelado del cátodo NVP "3D NVP nanofiber".

Item	Amount	Source/provider
Vanadium pentoxide	0.18188 g	<b>Own source</b>
Argon, liquid	48.16800 g	Argon production, liquid   argon, liquid   Cutoff, U - RER
Carbon black	0.13927 g	Market for carbon black   carbon black   Cutoff, U - GLO
Glucose	0.18016 g	Market for glucose   glucose   Cutoff, U - GLO
N,N-dimethylformamide	28.32000 g	Market for N,N-dimethylformamide   N,N-dimethylformamide   Cutoff, U - GLO
N-methyl-2-pyrrolidone	40.16588 g	Market for N-methyl-2-pyrrolidone   N-methyl-2-pyrrolidone   Cutoff, U - GLO
Oxalic acid dihydrated	0.37819 g	Oxalic acid dihydrate   elementary flow   emission to air   low population density
Polyvinylfluoride	0.06964 g	Market for polyvinylfluoride   polyvinylfluoride   Cutoff, U - GLO
Sodium phosphate	0.35993 g	Market for sodium phosphate   sodium phosphate   Cutoff, U - RER
Water, deionised	5.00000 g	Market for water, deionised   water, deionised   Cutoff, U - Europe without Switzerland
Energy usage (stirring, heating, drying, preheating and annealing)	65 560.0 Wh	Market group for electricity, high voltage   electricity, high voltage   Cutoff, U - ENTSO-E

**Para el cátodo 8, denominado “Nanoplatelet NVP”:**

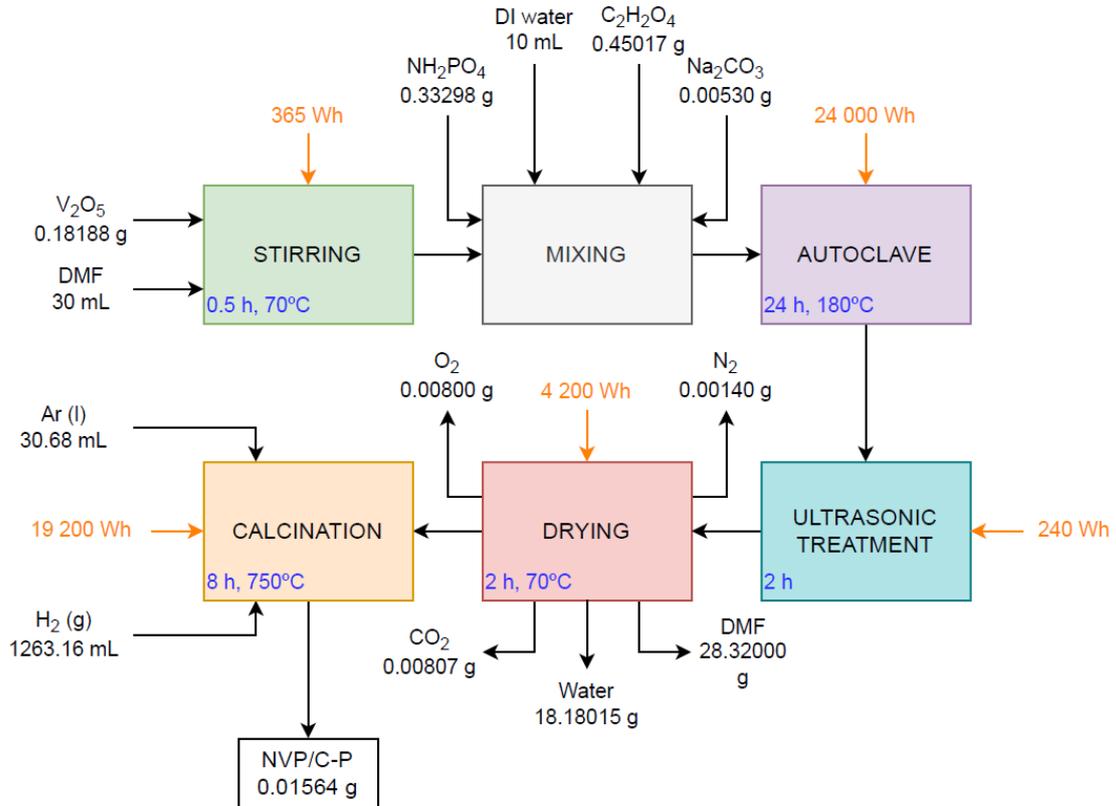


Figura 24. Diagrama de flujo del proceso de producción del cátodo NVP "Nanoplatelet NVP". Fuente: (Rey et al., 2022).

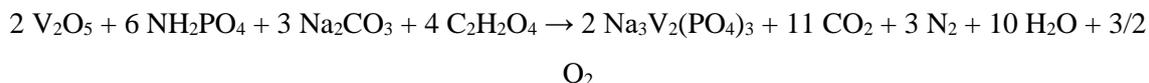
En primer lugar, se dispersa 1 mmol de vanadium pentoxide ( $V_2O_5$ ) en 30 mL de N, N-dimethylformamide ( $C_3H_7NO$ , DMF) y se agita a 70 °C durante 0.5 h. La electricidad consumida es de 365 Wh. El consumo de energía se ha calculado con los siguientes instrumentos de laboratorio:

- Scilogex® agitador, modelo OS40-PRO; capacidad máxima de agitación 40 L; 130 W.
- AccuPlate® placa calefactora, modelo D0400-230V; rango de temperatura 5°C - 550 °C; 600 W.

A continuación, se añaden a la solución anterior 10 mL de *deionised water*, 3 mmol de *monoammonium phosphate* ( $NH_2PO_4$ ), 0.05 mmol de *sodium carbonate* ( $Na_2CO_3$ ) y 5 mmol de *oxalic acid* ( $C_2H_2O_4$ ). La solución obtenida se transfiere a un autoclave de acero inoxidable revestido de teflón y se mantiene a 180°C durante 24 horas de reacción hidrotérmica. El consumo de electricidad es de 24 000 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Thermoconcept® mufla compacta, modelo KLE 03/11 para volúmenes hasta 3 L; temperatura máxima 1100°C; 1 kW.

Se considera la siguiente reacción:



A continuación, se realiza un tratamiento de ultrasonidos durante 1 hora. El consumo de electricidad es de 240 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- VEVOR® limpiador ultrasónico digital, para volúmenes hasta 3 L; 120 W.

El producto se seca a 70°C durante la noche (12 h) para eliminar el agua desionizada y el DMF. Se supone que el DMF añadido no reacciona (la cantidad de salida es la misma que la de entrada). La electricidad consumida es de 4 200 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- GenLab® horno, modelo MINO/6 para volúmenes hasta 6 L; temperatura máxima 250°C; 350 W.

Finalmente, el NVP/C-P se obtiene tras calcinar el precursor seco bajo una atmósfera de argón/hidrógeno (Ar:H<sub>2</sub> = 95:5 en vol.) a 750°C durante 8 h. En este tipo de proceso, el uso de gas argón suele ser de 50 mL·min<sup>-1</sup>, por lo que se ha utilizado esta proporción. La electricidad consumida es de 19 200 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Carbolite® horno de cámara estándar, modelo CWF 11/5 para volúmenes hasta 5 L; temperatura máxima 1000°C; 2.4 kW.

De acuerdo con las trazas del TGA que figura en el manuscrito, se encontró que el contenido de carbono era de alrededor del 2.9% en peso. Así, la masa total de NVP/C-P es de 0.01564 g.

El cátodo se prepara a partir de una lechada de 70 wt% de material activo, 20 wt% de *acetylene black* y 10 wt% en peso de aglutinante de *polytetrafluoroethylene* (PTFE)<sup>7</sup> en 19.28880 mL de N-methyl-2-pyrrolidone (NMP). Se supone una proporción de NMP:material activo = 0.8 mL:10 mg. La lechada se muele durante 0.5 h y se recubre sobre una lámina de Al. El electrodo se seca a 80°C durante toda la noche (12 h) h en un horno de vacío. La electricidad consumida es de 7 325 Wh. El consumo de energía se ha calculado con los siguientes instrumentos de laboratorio

<sup>7</sup> *Polytetrafluoroethylene* no aparece en la base de datos de ecoinvent 3.8, por lo que se ha aproximado a *polyvinylfluoride*.

- Retsch® molinillo de mortero, modelo RM 2000; 250 W.
- ThermoFisher® estufa de vacío, modelo 6256 para volúmenes hasta 19,8 L; temperatura máxima 220°C; 600 W.

Tabla 14. Modelado del cátodo NVP "Nanoplatelet NVP".

Item	Amount	Source/provider
Vanadium pentoxide	0.181879 g	<b>Own source</b>
Argon, liquid	42.81600 g	Argon production, liquid   argon, liquid   Cutoff, U - RER
Carbon black	0.00447 g	Market for carbon black   carbon black   Cutoff, U - GLO
Hydrogen, gaseous	0.11368 g	Market for hydrogen, gaseous   hydrogen, gaseous   Cutoff, U - GLO
Monoammonium phosphate	0.332979 g	Market for monoammonium phosphate   monoammonium phosphate   Cutoff, U - RER
N,N-dimethylformamide	28.32000 g	Market for N,N-dimethylformamide   N,N-dimethylformamide   Cutoff, U - GLO
N-methyl-2-pyrrolidone	19.86746 g	Market for N-methyl-2-pyrrolidone   N-methyl-2-pyrrolidone   Cutoff, U - GLO
Oxalic acid	0.45017 g	Oxalic acid   elementary flow   emission to air   unspecified
Polyvinylfluoride	0.00223 g	Market for polyvinylfluoride   polyvinylfluoride   Cutoff, U - GLO
Sodium carbonate	0.00530 g	Sodium carbonate   elementary flow   resource   in ground
Water, deionised	10.00000 g	Market for water, deionised   water, deionised   Cutoff, U - Europe without Switzerland
Energy usage (stirring, heating, ultrasonic treatment, drying, calcinating and grounding)	55 210.0 Wh	Market group for electricity, high voltage   electricity, high voltage   Cutoff, U - ENTSO-E

**Para el cátodo 9, denominado “Agarose carbon NVP”:**

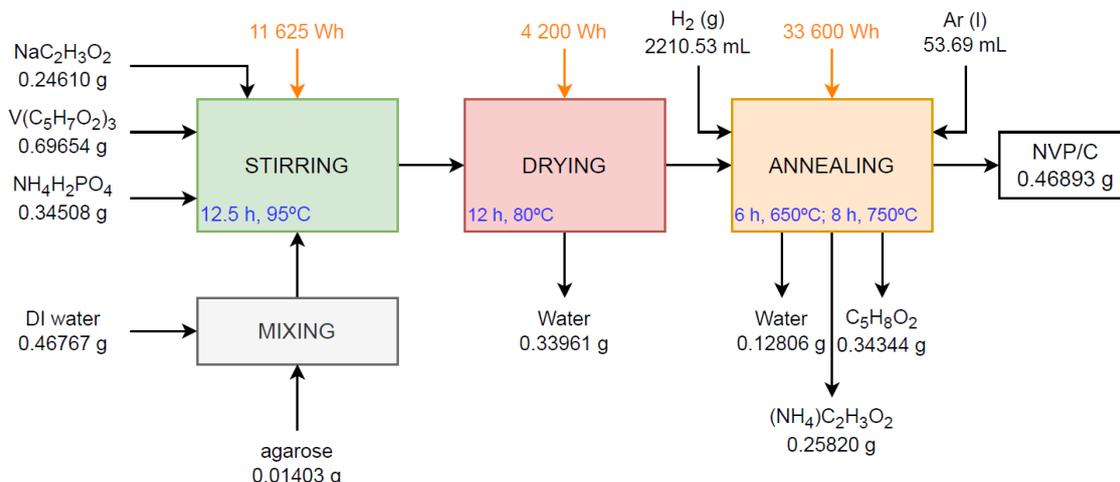


Figura 25. Diagrama de flujo del proceso de producción del cátodo NVP "Agarose carbon NVP". Fuente: (Rey et al., 2022).

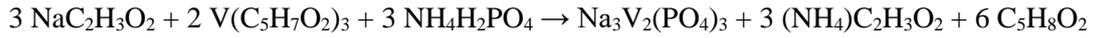
En primer lugar, se disuelve *agarose* en *deionised water* hervida. Según la curva TG de la muestra de NVP/C bajo atmósfera de aire que figura en el manuscrito, el contenido de carbono de la muestra era del 2.8%. Por lo tanto, la cantidad de *agarose* que hay que añadir es de 0.01403 g. Como afirman Gustavsson y Larsson (1996, p. 123), "*beads with a 6% agarose content are frequently used and have an average pore size of approximately 30 nm, whereas 4 and 2 % agarose beads have a pore*". En el manuscrito, se apunta a un tamaño de partícula controlado de 20-200 nm, por lo que se supone *agarose* al 3%. Así, es necesario añadir 0.46767 g de *deionised water*.

A continuación, se añade una mezcla estequiométrica (3 mmol : 2 mmol : 3 mmol) de *sodium acetate* ( $\text{NaC}_2\text{H}_3\text{O}_2$ )<sup>8</sup>, *vanadium (III) acetylacetonate* ( $\text{V}(\text{C}_5\text{H}_7\text{O}_2)_3$ ) y *ammonium dihydrogen phosphate* ( $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ ) a la solución anterior con agitación a 95°C. Se supone un tiempo de 15 min. La mezcla se agita continuamente durante 12 h a 95°C con calentamiento por baño de agua termostático. El consumo de electricidad es de 11 625 Wh. El consumo de energía se ha calculado con los siguientes instrumentos de laboratorio

- Scilogex® agitador, modelo OS40-PRO; capacidad máxima de agitación 40 L; 130 W.
- Labtron® baño termoestático, modelo LOTB-A20 para volúmenes hasta 12 L; rango de temperatura 5°C - 100°C; 800 W.

Se considera que tiene lugar la siguiente reacción

<sup>8</sup> *Sodium acetate* no aparece en la base de datos ecoinvent 3.8, por lo que se realiza un proceso de síntesis.



La mezcla se seca a 80°C. Se supone un tiempo de 12 h. Se supone que en este proceso el sólido retiene agua (20 vol.%). La electricidad consumida es de 4 200 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- GenLab® horno, modelo MINO/6 para volúmenes hasta 6 L; temperatura máxima 250°C; 350 W.

Después, el recocido se realiza en una atmósfera de argón/hidrógeno (Ar:H<sub>2</sub> = 95:5 en vol.) a 650°C durante 6 h y 750 °C durante 8 h. La electricidad consumida es de 33 600 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Carbolite® horno de cámara estándar, modelo CWF 11/5 para volúmenes hasta 5 L; temperatura máxima 1000°C; 2.4 kW.

De acuerdo con las trazas del TGA que figura en el manuscrito, se encontró que el contenido de carbono era de alrededor de 2.808 % en peso. Así, la masa total de NVP/C es de 0.46893 g.

El cátodo se prepara dispersando un 70 wt% de material activo, un 20 wt% de acetylene black y un 10 wt% de poly(vinyl difluoride) (PVDF) en 37.51440 mL de N-methyl-2-pyrrolidone (NMP). Se supone una proporción de NMP:material activo = 0.8 mL:10 mg. A continuación, la pasta se recubre uniformemente sobre una lámina de Al y se seca en un horno de vacío a 120°C durante 12h. La electricidad consumida es de 4 7440 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- ThermoFisher® horno de vacío, modelo 6256 para volúmenes hasta 19.8 L; temperatura máxima 220°C; 600 W.

Tabla 15. Modelado del cátodo NVP "Agarose carbon NVP".

<b>Item</b>	<b>Amount</b>	<b>Source/provider</b>
Sodium acetate	0.24610 g	<b>Own source</b>
Vanadium (III) acetylacetonate	0.69654 g	<b>Own source</b>
Argon, liquid	74.92800 g	Argon production, liquid   argon, liquid   Cutoff, U - RER
Carbon black	0.05862 g	Market for carbon black   carbon black   Cutoff, U - GLO
Hydrogen, gaseous	0.19895 g	Market for hydrogen, gaseous   hydrogen, gaseous   Cutoff, U - GLO
Monoammonium phosphate	0.34508 g	Market for monoammonium phosphate   monoammonium phosphate   Cutoff, U - RER
N-methyl-2-pyrrolidone	38.63983 g	Market for N-methyl-2-pyrrolidone   N-methyl-2-pyrrolidone   Cutoff, U - GLO
Polyacrylamide	0.01403 g	Market for polyacrylamide   polyacrylamide   Cutoff, U - GLO
Polyvinylfluoride	0.05862	Market for polyvinylfluoride   polyvinylfluoride   Cutoff, U - GLO
Water, deionised	0.46767 g	Market for water, deionised   water, deionised   Cutoff, U - Europe without Switzerland
Energy usage (stirring, heating, drying and annealing)	56 865.0 Wh	Market group for electricity, high voltage   electricity, high voltage   Cutoff, U - ENTSO-E

Para el cátodo 10, denominado “*Glucomannan NVP*”:

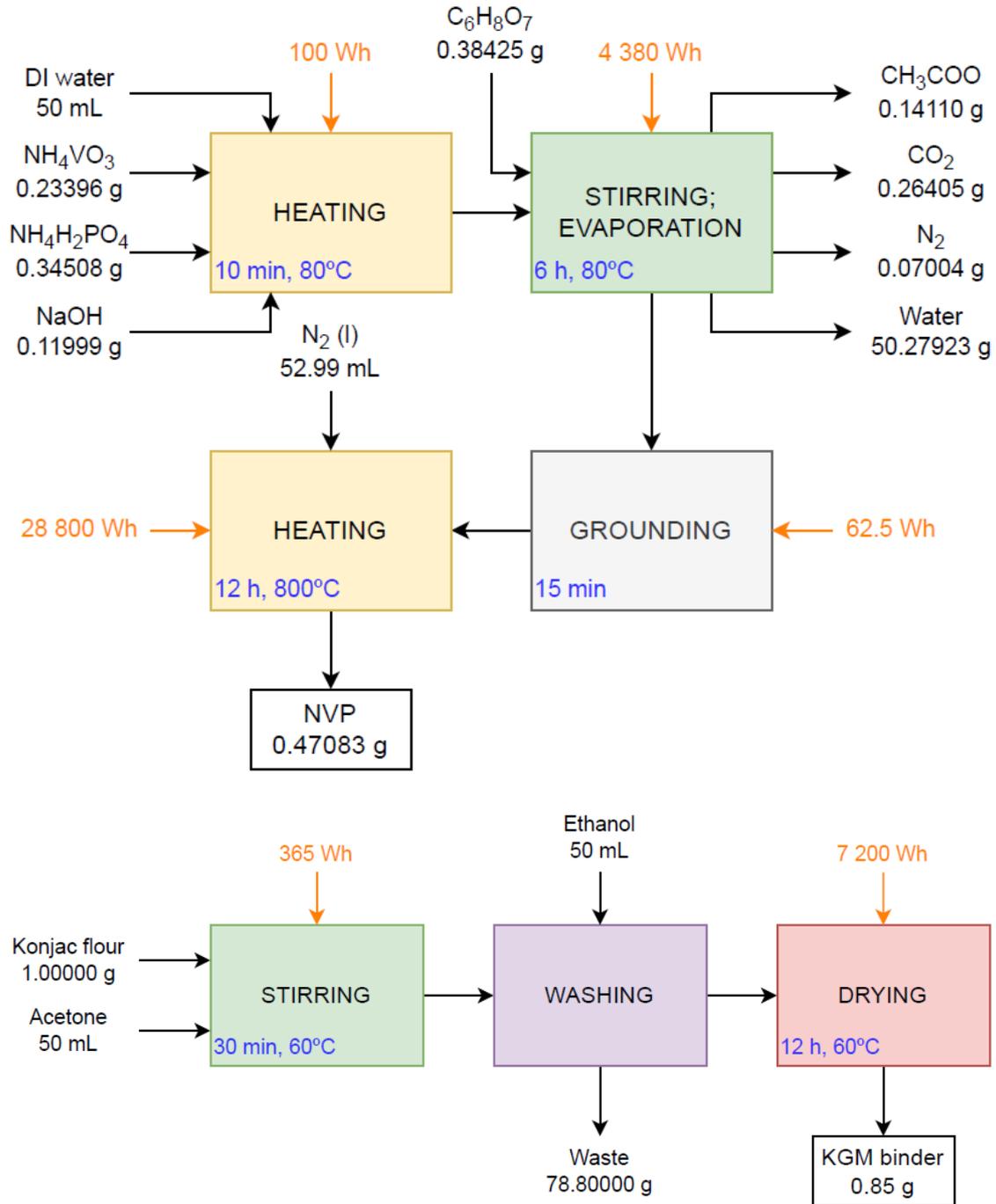


Figura 26. Diagrama de flujo del proceso de producción del cátodo NVP "Glucomannan NVP". Fuente: (Rey et al., 2022).

En primer lugar, se añaden *ammonium metavanadate* ( $\text{NH}_4\text{VO}_3$ ), *monoammonium phosphate* ( $\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$ ) y *sodium hydroxide* (NaOH) en *deionised water* en una proporción molar de 2:3:3, y luego se calienta a  $80^\circ\text{C}$  para formar una solución transparente. Se suponen cantidades de 2 mmol, 3 mmol y 3 mmol, respectivamente, y 50 mL de *deionised water*. Se supone un tiempo de

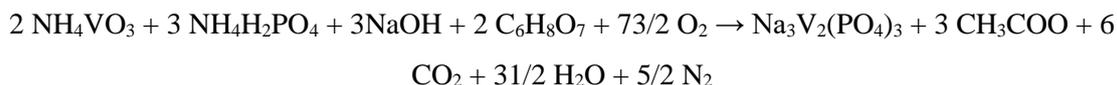
10 min. La electricidad consumida es de 100 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio

- AccuPlate® placa calefactora, modelo D0400-230V; rango de temperatura 5°C - 550 °C; 600 W.

A continuación, se añade *citric acid* (C<sub>6</sub>H<sub>8</sub>O<sub>7</sub>) en una proporción molar NH<sub>4</sub>VO<sub>3</sub>:C<sub>6</sub>H<sub>8</sub>O<sub>7</sub> = 1:1. La solución mezclada se agita y se evapora a 80°C. Se supone un tiempo de 6 h. La electricidad consumida es de 4 380 Wh. El consumo de energía se ha calculado con los siguientes instrumentos de laboratorio

- Scilogex® agitador, modelo OS40-PRO; capacidad máxima de agitación 40 L; 130 W.
- AccuPlate® placa calefactora, modelo D0400-230V; rango de temperatura 5°C - 550 °C; 600 W.

Se considera la siguiente reacción



El precursor seco se muele hasta convertirlo en polvo. Se supone un tiempo de 15 min. La electricidad consumida es de 62.5 Wh. El consumo de energía se se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Retsch® molinillo de mortero, modelo RM 2000; 250 W.

Finalmente, el polvo se calienta a 800°C durante 12 h bajo una atmósfera de N<sub>2</sub> para sintetizar el NVP. En este tipo de proceso, el uso de gas argón suele ser de 50 mL·min<sup>-1</sup>, por lo que se ha utilizado esta proporción de N<sub>2</sub>. La electricidad consumida es de 28 800 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- Carbolite® horno de cámara estándar, modelo CWF 11/5 para volúmenes hasta 5 L; temperatura máxima 1000°C; 2.4 kW.

Para la síntesis del polímero KGM, se añade 1.0 g de harina de konjac en 50 mL de *acetone* al 99,5% para eliminar las impurezas solubles en *acetone* (cantidad supuesta de 5 wt%). La harina precipitada se calienta y se agita a 60°C durante 30 minutos. La electricidad consumida es de 365 Wh. El consumo de energía se ha calculado con los siguientes instrumentos de laboratorio

- Scilogex® agitador, modelo OS40-PRO; capacidad máxima de agitación 40 L; 130 W.
- AccuPlate® placa calefactora, modelo D0400-230V; rango de temperatura 5°C - 550 °C; 600 W.

A continuación, la harina precipitada se lava con una cantidad supuesta de 50 mL de *ethanol* al 99%, seguida de un secado en una estufa de vacío a 60°C. Se supone un tiempo de 12 h. Se considera que el 10 % de harina de konjac está disuelto en *ethanol*. La electricidad consumida es de 7 200 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- ThermoFisher® horno de vacío, modelo 6256 para volúmenes de hasta 19.8 L; temperatura máxima 220°C; 600 W.

De acuerdo con las trazas del TGA que figura en el manuscrito, se encontró que el contenido de carbono era de alrededor de 3.2 wt%. Así, la masa total de NVP-KGM es de 0.47083 g.

El cátodo se prepara a partir de una lechada con un 70 wt% de material activo, un 20 wt% de *carbon black* (Super P) y un 10 % de aglutinante (1.25 % de KGM en agua). La lechada se recubre sobre una lámina de Al. El electrodo se seca a 110°C en un horno de vacío. Se supone un tiempo de 12 h. La electricidad consumida es de 7 200 Wh. El consumo de energía se ha calculado con el siguiente instrumento de laboratorio:

- ThermoFisher® horno de vacío, modelo 6256 para volúmenes de hasta 19.8 L; temperatura máxima 220°C; 600 W.

Tabla 16. Modelado del cátodo NVP "*Glucomannan NVP*".

Item	Amount	Source/provider
KGM binder	0.00084 g	Own source
NH <sub>4</sub> VO <sub>3</sub>	0.23396 g	Own source
Carbon black	0.13452 g	Market for carbon black   carbon black   Cutoff, U - GLO
Citric acid	0.38425 g	Market for citric acid   citric acid   Cutoff, U - GLO
Monoammonium phosphate	0.34508 g	Market for monoammonium phosphate   monoammonium phosphate   Cutoff, U - RER
Nitrogen, liquid	42.66000 g	Market for nitrogen, liquid   nitrogen, liquid   Cutoff, U - RER
N-methyl-2-pyrrolidone	38.79639 g	Market for N-methyl-2-pyrrolidone   N-methyl-2-pyrrolidone   Cutoff, U - GLO
Sodium hydroxide, without water, in 50% solution state	0.11999 g	Market for sodium hydroxide, without water, in 50% solution state   sodium hydroxide, without water, in 50% solution state   Cutoff, U - GLO
Water, deionised	50.06642 g	Market for water, deionised   water, deionised   Cutoff, U - Europe without Switzerland
Energy usage (ultrasonic treatment, rotary evaporating, drying, grounding, heating and annealing)	40 542.5 Wh	Market group for electricity, high voltage   electricity, high voltage   Cutoff, U - ENTSO-E

## Datos de inventario sobre la producción de los materiales de *own source*

Tabla 17. La producción de 1 kg de *Acetylacetonate* se ha obtenido de (sólo se muestran los *inputs*):

Item	Amount (kg)	Source/provider
Acetic anhydride	2.547	Market for acetic anhydride   acetic anhydride   Cutoff, U - GLO
Acetone, liquid	0.579	Market for acetone, liquid   acetone, liquid   Cutoff, U - RER
Boron trifluoride	2.497	Market for boron trifluoride   boron trifluoride   Cutoff, U - GLO
Energy usage	0.7 kWh	Electricity, high voltage, production mix   electricity, high voltage   Cutoff, U - ES

Tabla 18. La producción de 1 kg de *Ammonium hydrogen borate* se ha obtenido de (sólo se muestran los *inputs*):

Item	Amount (kg)	Source/provider
Ammonia, anhydrous, liquid	1.419	Electricity, high voltage, production mix   electricity, high voltage   Cutoff, U - ES
Boric acid, anhydrous, powder	0.977	Market for graphite   graphite   Cutoff, U - GLO
Energy usage	0.1 kWh	Electricity, high voltage, production mix   electricity, high voltage   Cutoff, U - ES

Tabla 19. La producción de 1 kg de GO se ha obtenido de (sólo se muestran los *inputs*):

Item	Amount (kg)	Source/provider
Graphite	1.421	Market for graphite   graphite   Cutoff, U - GLO
Potassium nitrate	0.711	Market for potassium nitrate   potassium nitrate   Cutoff, U - GLO
Potassium permanganate	8.528	Market for potassium permanganate   potassium permanganate   Cutoff, U - GLO
Sulfuric acid	46	Market for sulfuric acid   sulfuric acid   Cutoff, U - RER
Tap water	0.1	Market group for tap water   tap water   Cutoff, U - RER
Energy usage	3.1 kWh	Electricity, high voltage, production mix   electricity, high voltage   Cutoff, U - ES

Tabla 20. La producción de 1 kg de *Lanthanum(III) nitrate* se ha obtenido de (sólo se muestran los *inputs*):

Item	Amount (kg)	Source/provider
Lanthanum oxide	0.501	Market for lanthanum oxide   lanthanum oxide   Cutoff, U - GLO
Nitric acid, without water, in 50% solution state	0.582	Market for nitric acid, without water, in 50% solution state   nitric acid, without water, in 50% solution state   Cutoff, U - RER w/o RU
Water, deionised	2.582	Market for water, deionised   water, deionised   Cutoff, U - Europe without Switzerland
Energy usage	1.1 kWh	Electricity, high voltage, production mix   electricity, high voltage   Cutoff, U - ES

Tabla 21. La producción de 1 kg de *Sodium acetate* se ha obtenido de (sólo se muestran los *inputs*):

Item	Amount (kg)	Source/provider
Acetic acid	1.371	Market for acetic acid, without water, in 98% solution state   acetic acid, without water, in 98% solution state   Cutoff, U - GLO
Sodium carbonate	1.514	Sodium carbonate   elementary flows   emission to air   unspecified
Tap water	2.573	Market group for tap water   tap water   Cutoff, U - RER
Energy usage	0.3 kWh	Electricity, high voltage, production mix   electricity, high voltage   Cutoff, U - ES

Tabla 22. La producción de 1 kg de *Vanadium pentoxide* se ha obtenido de (sólo se muestran los *inputs*):

Item	Amount (kg)	Source/provider
Ammonium	0.500	Ammonium bicarbonate production   ammonium bicarbonate   Cutoff, U
Sodium carbonate	2.000	Sodium carbonate   elementary flows
Sulfuric acid	2.000	Sulfuric acid production   steam, in chemical industry   Cutoff, U
Tap water	0.160	Market group for tap water   tap water   Cutoff, U - RER
Vanadium	1.000	Vanadium   elementary flows
Energy usage	6.0 kWh	Electricity, high voltage, production mix   electricity, high voltage   Cutoff, U - ES

Tabla 23. La producción de 1 kg de *Ammonium metavanadate* se ha obtenido de (sólo se muestran los *inputs*):

Item	Amount (kg)	Source/provider
Ammonium chloride	2.928	Market for ammonium chloride   ammonium chloride   Cutoff, U - GLO
Sodium carbonate	0.683	Sodium carbonate   elementary flows   source   in ground
Tap water	35.131	Market group for tap water   tap water   Cutoff, U - RER
Vanadium pentoxide	0.976	<b>Own source</b>
Energy usage	0.4 kWh	Electricity, high voltage, production mix   electricity, high voltage   Cutoff, U - ES

Tabla 24. La producción de 1 kg de *Vanadium (III) acetylacetonate* se ha obtenido de (sólo se muestran los *inputs*):

Item	Amount (kg)	Source/provider
Acetylacetonate	0.855	<b>Own source</b>
Ammonium metavanadate	0.333	<b>Own source</b>
Energy usage	0.5 kWh	Electricity, high voltage, production mix   electricity, high voltage   Cutoff, U - ES

Tabla 25. La producción de 1 kg de *Potassium fluoride* se ha obtenido de (sólo se muestran los *inputs*):

<b>Item</b>	<b>Amount (kg)</b>	<b>Source/provider</b>
Potassium carbonate	1.190	Market for potassium carbonate   potassium carbonate   cutoff, u - glo
Hydrogen fluoride	0.689	Market for hydrogen fluoride   hydrogen fluoride   cutoff, u - rer

Tabla 26. La producción de 1 kg de *Chloroethylene carbonate* (CEC) se ha obtenido de (sólo se muestran los *inputs*):

<b>Item</b>	<b>Amount (kg)</b>	<b>Source/provider</b>
Ethylene carbonate	0.838	Market for ethylene carbonate   ethylene carbonate   cutoff, u - glo
Hydrogen fluoride	1.669	Market for sulfuryl chloride   sulfuryl chloride   cutoff, u - glo
Energy usage	1.6 kwh	Electricity, high voltage, production mix   electricity, high voltage   Cutoff, U - ES

Tabla 27. La producción de 1 kg de *Fluoroethylene carbonate* (FEC) se ha obtenido de (sólo se muestran los *inputs*):

<b>Item</b>	<b>Amount (kg)</b>	<b>Source/provider</b>
Chloroethylene carbonate	1.608	<b>Own source</b>
Potassium fluoride	0.855	<b>Own source</b>
Acetonitrile	0.539	Market for acetonitrile   acetonitrile   Cutoff, U - GLO
Energy usage	1.6 kwh	Electricity, high voltage, production mix   electricity, high voltage   Cutoff, U - ES

Tabla 28. La producción de 1 kg de *Propylene carbonate* (PEC) se ha obtenido de (sólo se muestran los *inputs*):

<b>Item</b>	<b>Amount (kg)</b>	<b>Source/provider</b>
Propylene oxide, liquid	0.587	Market for propylene oxide, liquid   propylene oxide, liquid   Cutoff, U - RER
Carbon dioxide, liquid	0.431	Market for carbon dioxide, liquid   carbon dioxide, liquid   Cutoff, U - RER
Energy usage	0.5 kwh	Electricity, high voltage, production mix   electricity, high voltage   Cutoff, U - ES