

# Un Reporte Resumen: Intercalación de AlF<sub>3</sub> en Grafito: Mecanismos de Sorción Estudiados por AES y DFT

Julian L. Avila-Martinez

5 de septiembre de 2025

## Resumen

Este reporte resume una investigación combinada, experimental y computacional, sobre la intercalación de fluoruro de aluminio (AlF<sub>3</sub>) en un sustrato de grafito. Las técnicas principales empleadas fueron la **Espectroscopía de Electrones Auger (AES)** para el análisis de superficie experimental y la **Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)** para el modelado computacional. Un hallazgo principal fue la excelente concordancia entre los datos experimentales y las predicciones teóricas, las cuales indican que la intercalación de AlF<sub>3</sub> en el grafito es un proceso energéticamente favorable.

## Justificación y Motivación

La investigación está motivada por la necesidad apremiante de encontrar alternativas a las baterías de ion-litio. Aunque el litio es el estándar de la tecnología actual de baterías recargables, su limitada abundancia terrestre presenta un desafío a largo plazo. El aluminio es una alternativa muy atractiva debido a su gran abundancia. Además, su catión trivalente, Al<sup>3+</sup>, ofrece una alta capacidad de carga, y el fluoruro de aluminio, AlF<sub>3</sub>, es un compuesto químicamente estable adecuado para aplicaciones electroquímicas. Este estudio, por lo tanto, explora la viabilidad fundamental de un sistema aluminio-grafito, un primer paso crucial hacia el desarrollo de nuevas baterías recargables de ion-aluminio.

## Investigación Experimental

El enfoque experimental se centró en el uso de la Espectroscopía de Electrones Auger (AES), una técnica altamente sensible a la composición elemental de la región cercana a la superficie de un material. Esta sensibilidad es primordial, ya que las propiedades de la superficie (i.e., número de coordinación, energía superficial, reactividad) difieren fundamentalmente de las del material en volumen (bulk). Se hizo una distinción clave entre la **adsorción** (la acumulación de átomos o moléculas en la superficie de un material) y la **absorción** (la difusión de partículas hacia el interior del volumen). La intercalación es un tipo específico de absorción donde moléculas o iones huéspedes se insertan en la estructura laminar de un material anfitrión.

Se utilizó AES para verificar que estaba ocurriendo una intercalación, en lugar de una mera adsorción superficial. El efecto Auger es un proceso mecano-cuántico de tres pasos:

1. **Ionización:** Una partícula de alta energía (e.g. un electrón del cañón de electrones) colisiona con un electrón de un nivel interno (e.g., en la capa K) de un átomo del sustrato, expulsándolo y creando un hueco en dicho nivel.
2. **Relajación:** Un electrón de un nivel de energía superior (e.g. la capa L<sub>1</sub>) decae para llenar el hueco del nivel interno.
3. **Emisión Auger:** La energía liberada durante el proceso de relajación se transfiere de forma no radiativa a otro electrón (e.g. en la capa L<sub>2</sub>), que es entonces emitido del átomo. Esta partícula emitida es el **electrón Auger**.

La energía cinética del electrón Auger emitido es característica de la estructura electrónica del átomo de origen, lo que permite una identificación elemental precisa.

Los experimentos se llevaron a cabo utilizando un espectrómetro PHI SAM 590A. Se sublimaron cristalitos de AlF<sub>3</sub> y se depositaron molécula a molécula sobre un sustrato de Grafito Piroítico Altamente Orientado (HOPG). Se utilizó una placa de cobre como referencia para la calibración del flujo molecular, ya que su estructura cúbica centrada en las caras (FCC) no permite la intercalación. Para confirmar la intercalación, se aplicó la **ley de Beer-Lambert** a los datos de AES. A medida que el AlF<sub>3</sub> se intercala con éxito, forma capas debajo de la superficie del grafito, causando una atenuación exponencial de la señal Auger del carbono que proviene del sustrato. Las observaciones experimentales revelaron una dependencia crítica de la tasa de deposición: un **flujo molecular bajo** resultó en una intercalación exitosa, lo cual se atribuye a que se concede tiempo suficiente para que las moléculas de AlF<sub>3</sub> se difundan por la superficie y encuentren sitios energéticamente favorables para penetrar en la red del grafito. Por el contrario, un **flujo molecular alto** condujo predominantemente a la adsorción, donde las moléculas se agregaron en la superficie del grafito en lugar de entrar en la estructura interna.

## Modelado Computacional

Los resultados experimentales fueron corroborados por simulaciones de primeros principios basadas en DFT. Para modelar la dinámica del proceso de intercalación, se implementó el método de la **Banda Elástica Empujada (NEB, por sus siglas en inglés)**. El método NEB es un potente algoritmo utilizado para determinar el **camino de mínima energía (MEP)** para una transición entre un estado inicial y uno final; en este caso, una molécula de AlF<sub>3</sub> en la superficie del grafito y la misma molécula intercalada entre los planos de grafeno. Las simulaciones identificaron con éxito una ruta viable y de baja energía para la intercalación. De manera crucial, los cálculos de la energética de la reacción revelaron que el proceso global es **exotérmico**. Este resultado teórico proporciona una fuerte evidencia de que la intercalación de AlF<sub>3</sub> en el grafito es un proceso termodinámicamente espontáneo y favorable, respaldando plenamente las conclusiones experimentales.