



## ESTUDIO MEDIANTE CÁLCULOS DE PRIMEROS PRINCIPIOS DE MATERIALES CARBONOSOS MODIFICADOS CON FLÚOR PARA SU UTILIZACIÓN COMO PROTECCIÓN DE LITIO METÁLICO

Raviolo Sofía<sup>1</sup>, Molina Gonzalo<sup>2</sup>, Otero Manuel<sup>1,2</sup>, Luque Guillermina Leticia<sup>3</sup>

1. Instituto de Física Enrique Gaviola, Córdoba, Argentina.
2. Departamento de Física, Universidad Nacional de Río Cuarto, Córdoba, Argentina.
3. Instituto de Investigaciones en Físico-Química de Córdoba (INFIQC), Córdoba, Argentina.

\*sofiraviolo@gmail.com

La creciente demanda energética junto con el aumento preocupante de los niveles de contaminación ha puesto en foco de estudio las energías renovables y sus correspondientes vectores energéticos. Es por esto que la demanda de más y mejores tecnologías de almacenamiento de energía, como ser las baterías, ha aumentado notoriamente en las últimas décadas. Entre los materiales anódicos más prometedores se encuentra el litio metálico debido a que supera 10 veces la capacidad teórica de los ánodos actuales (3860 mAh/g contra 372 mAh/g), posee un bajo potencial de reducción ( $-3,040$  V frente a SHE) y baja densidad ( $0,534$  g/cm<sup>3</sup>) [1-2]. Sin embargo, estos materiales presentan una gran inestabilidad en la interfase sólido-electrolito (SEI), lo que resulta en un consumo constante de litio para la formación de nueva SEI, junto con un crecimiento dendrítico de litio durante el ciclado electroquímico. Estos fenómenos traen aparejada una caída en la capacidad a lo largo de los ciclos y serios problemas de seguridad debido a posibles cortocircuitos internos en las celdas [3]. Es por esto que a lo largo de los años se han elaborado diferentes estrategias para disminuir y controlar estos efectos, una de ellas es la protección del litio metálico mediante la formación ex situ de una SEI artificial resistente [4].

El grafeno y sus derivados, como el óxido de grafeno reducido (rGO), son materiales prometedores que podrían cumplir con las condiciones necesarias para la formación de una SEI artificial. Esto se debe a su naturaleza de láminas delgadas, livianas y con alto módulo de Young [5]. Además, las propiedades de estos materiales pueden modificarse fácilmente mediante la funcionalización o la introducción de defectos estructurales [6]. En particular, distintos trabajos han presentado propuestas respecto a la utilización de materiales grafiticos funcionalizados con flúor como “*interlayers*” para aplicaciones en baterías [7-8]. Sin embargo, el estudio de los mecanismos de interacción entre Li y F con rGO/grafeno no han sido reportados en bibliografía aún. Por lo tanto, los avances teóricos en la comprensión de los mecanismos de absorción/desorción de los iones Li<sup>+</sup> para estos materiales carbonosos funcionalizados son cruciales para entender los procesos que tienen lugar durante la implementación de la SEI ex situ y dar un mayor aprovechamiento a este instrumento. En este trabajo presentamos un estudio mediante cálculos de primeros principios de la litiación de estructuras grafiticas como ser el grafeno y el rGO modificadas con flúor, utilizando la teoría funcional de densidad (DFT). Así mismo analizamos la variabilidad en la estabilidad de estas estructuras, considerando la adición de defectos de distintos tipos.

### Referencias

- 1) GUO, Yanpeng; LI, Huiqiao; ZHAI, Tianyou. *Advanced materials*, **2017**, 29, 1700007.
- 2) LIU, Bin; ZHANG, Ji-Guang; XU, Wu. *Joule*, **2018**, 2, 833-845.
- 3) WANG, Peng, et al. *Advanced Functional Materials*, **2019**, 29, 1900950.
- 4) YANG, Huijun, et al. *Energy Storage Materials*, **2018**, 14, 199-221.
- 5) Young, R. J., Kinloch, I. A., Gong, L. & Novoselov, K. S. *Compos. Sci. Technol.*, **2012**, 72, 1459–1476.
- 6) Tang, Q., Zhou, Z. & Chen, Z. *Nanoscale*, **2013**, 5, 4541–4583.
- 7) BOBNAR, Jernej, et al. *Scientific reports*, **2018**, 8, 1-10.
- 8) VIZINTIN, Alen, et al. *Chemistry of Materials*, **2015**, 27, 7070-7081.