

# Óxidos de carbono fluorados para protección de Li metálico mediante DFT

G. Molina<sup>1\*</sup>, S. Raviolo<sup>2</sup>, M. Otero<sup>1,2</sup>, L. G. Luque<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Física, Universidad Nacional de Río Cuarto, Córdoba, Argentina.

<sup>2</sup> Instituto de Física Enrique Gaviola, Córdoba, Argentina.

<sup>3</sup> Instituto de Investigaciones en Físico-Química de Córdoba (INFIQC), Córdoba, Argentina.

(\*) Pres. author: [g98molina@gmail.com](mailto:g98molina@gmail.com)



## Introducción

La creciente demanda de energía y la preocupación por la contaminación han resaltado la importancia de las energías renovables y el almacenamiento de energía. El litio metálico es un candidato prometedor, pero su inestabilidad plantea desafíos. En este estudio, exploramos la estabilidad de distintas estructuras carbonosas (como el grafeno y el óxido de grafeno reducido) funcionalizadas con flúor, las cuales son comúnmente utilizadas como "interlayers" para mejorar la formación de interfases sólido-electrolito en baterías de litio.

## Métodos Computacionales

Se realizaron cálculos DFT con el programa Quantum Espresso en el formalismo PBE con energía de corte de 1090 eV y un grillado de puntos-k de 2x2x1 en los cálculos de optimización de geometría y energía. En los cálculos de DOS se usó un grillado de puntos-k de 10x10x10 para el RGO y 15x15x1 para el grafeno.

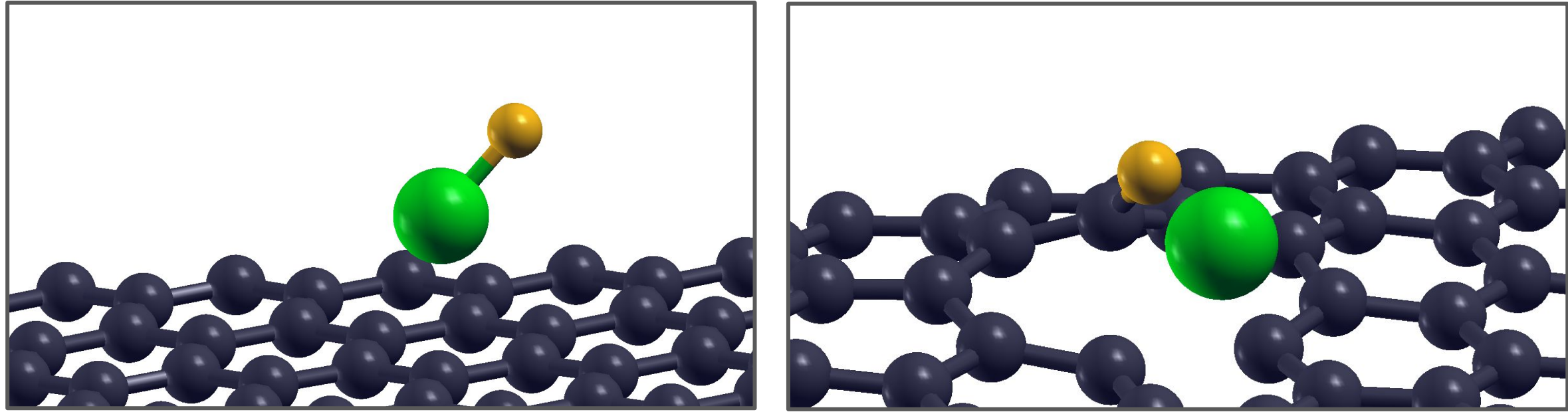


## Resultados y Discusión

### Estructuras estudiadas

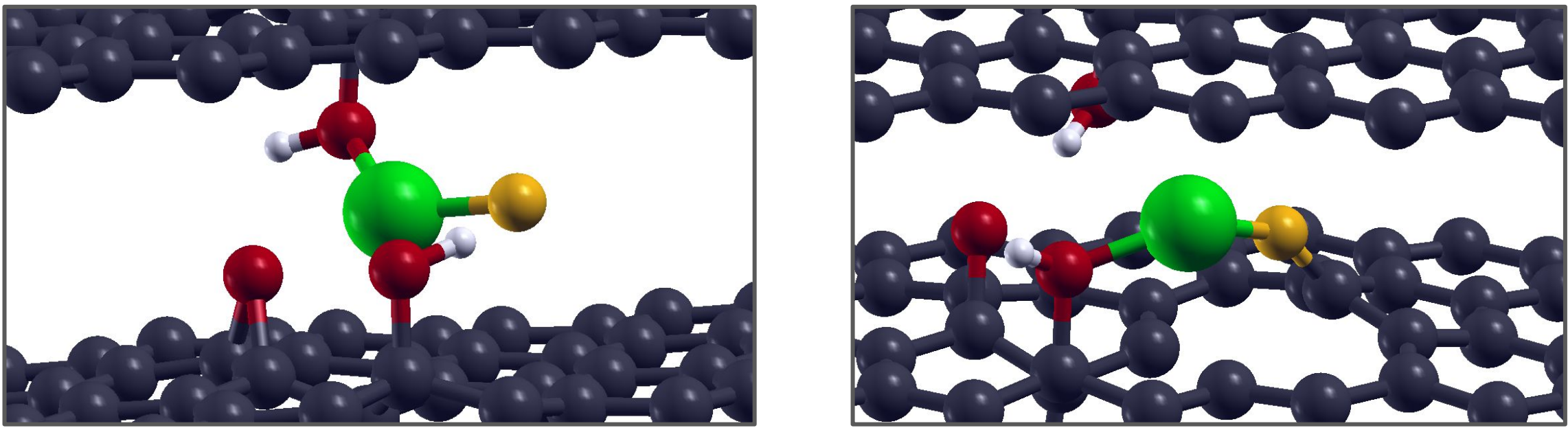
#### Grafeno fluorado (Gr-F)

Energías sin vacancia [eV]			Energías con vacancia [eV]		
Litiación	Adsorción LiF		Litiación	Adsorción LiF	
	Mole.	Bulk		Mole.	Bulk
-3,20	-0,78	2,40	-1,33	-1,70	1,49

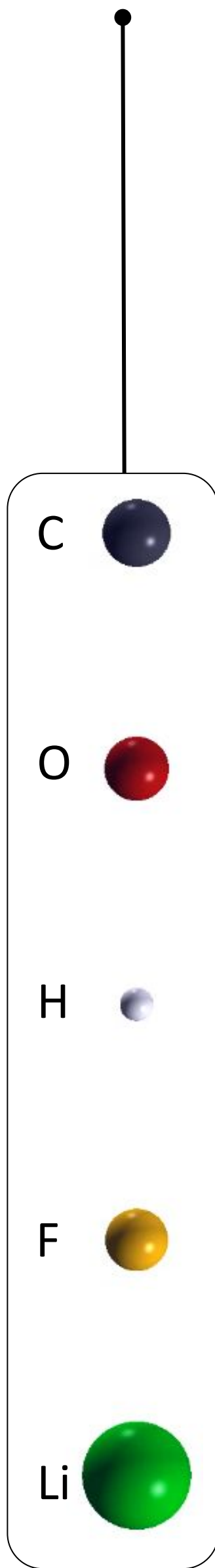


#### Óxido de grafito reducido fluorado (RGO-F)

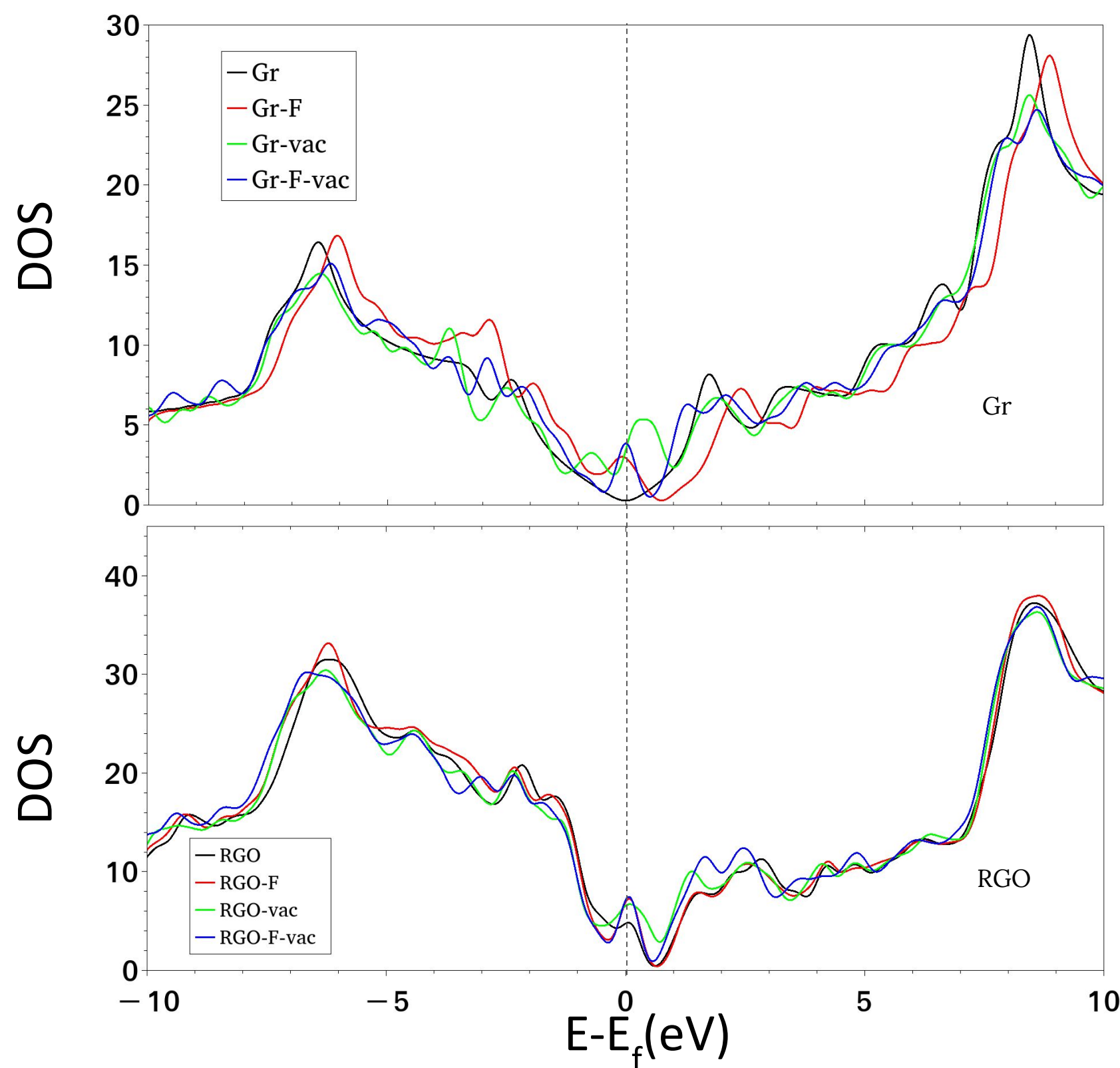
Energías sin vacancia [eV]			Energías con vacancia [eV]		
Litiación	Absorción LiF		Litiación	Absorción LiF	
	Mole.	Bulk		Mole.	Bulk
-4,38	-1,92	1,26	-2,36	-2,58	0,60



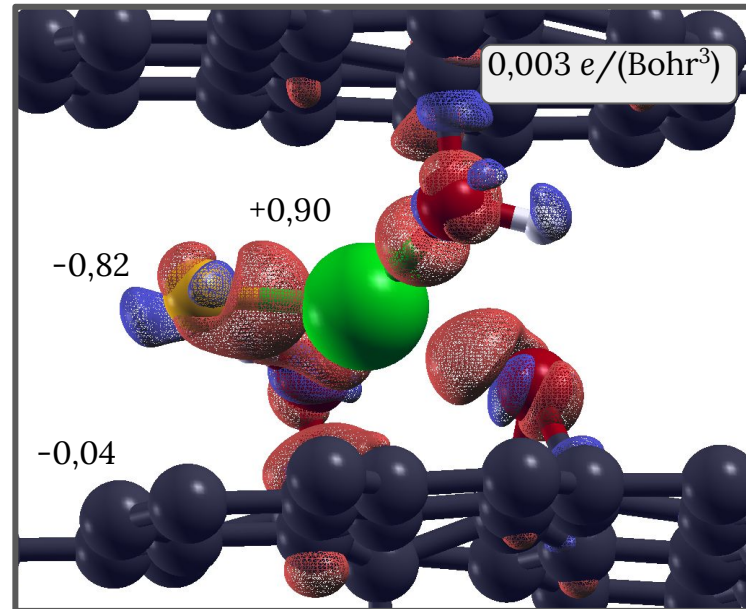
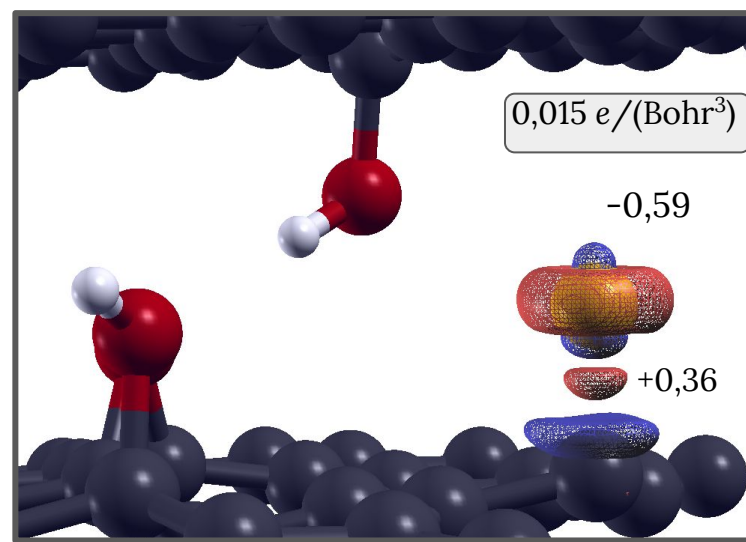
$$E(\text{Litiación}) = E(\text{Total}) - E(\text{Sin Li}) - E(\text{Li}_{\text{Bulk}})$$
$$E(\text{Absorción LiF}_{\text{Mole./Bulk}}) = E(\text{Total}) - E(\text{Sin LiF}) - E(\text{LiF}_{\text{Mole./Bulk}})$$



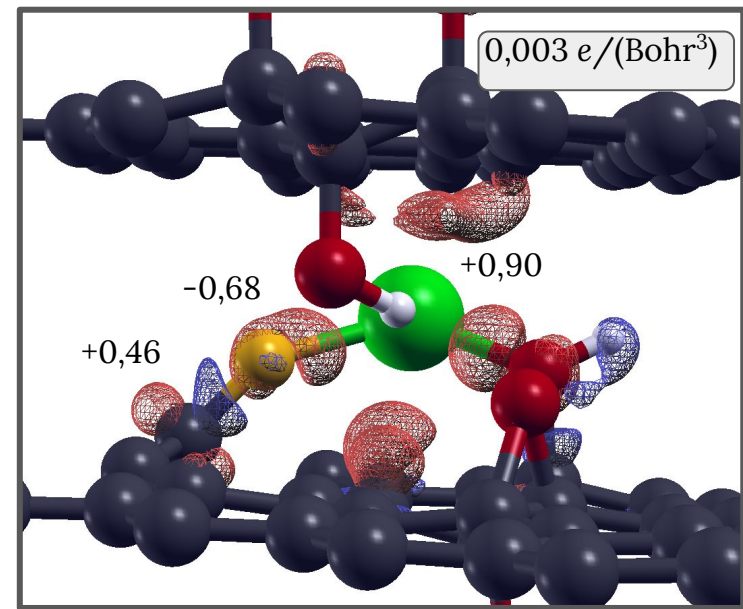
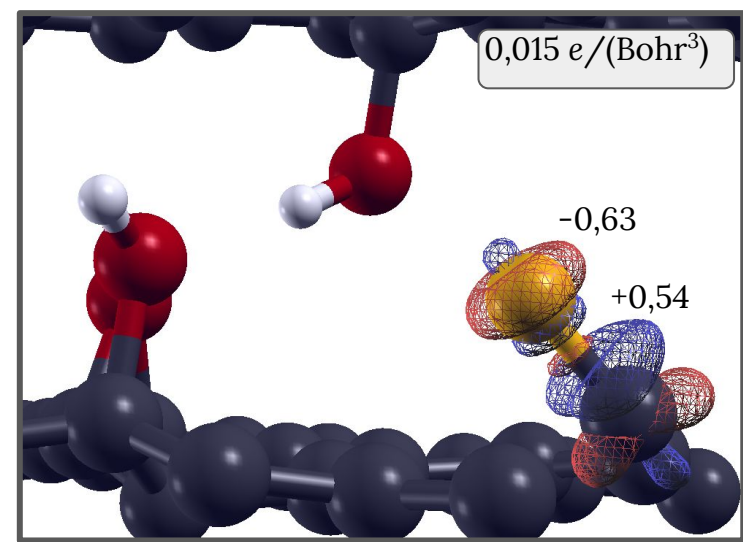
### Análisis electrónico



#### RGO-F sin vacancia



#### RGO-F con vacancia



## Conclusiones

### Estructuras sin defectos:

- Se observó que en los casos sin Li, el F permanece unido a la red carbonosa mediante enlaces iónicos fuertes. Mientras que en las estructuras con Li, el F se desprende de la red carbonosa debido al fuerte enlace del LiF. Esto indica que la estructura de CF no es estable ante la presencia de litio.
- En las estructuras tipo RGO la interacción entre el Li y los grupos OH es muy fuerte y en la mayoría de los casos esto tiende a hacer que el LiF quede retenido formando enlaces con dichos grupos.

### Estructuras con defectos:

- Se verificó que los defectos tipo vacancia ayudan a retener el F evitando la disociación del LiF. Por lo tanto, estos F cercanos a defectos que permanecen unidos a la estructura carbonosa en presencia de Li, podrían ser los responsables de mejorar el rendimiento del film protector.

## Referencias

- [1] WOOD, Kevin N., et al. Dendrites and pits: Untangling the complex behavior of lithium metal anodes through operando video microscopy. ACS central science, 2016, vol. 2, no 11, p. 790-801.
- [2] BOBNAR, Jernej, et al. Fluorinated reduced graphene oxide as a protective layer on the metallic lithium for application in the high energy batteries. Scientific reports, 2018, vol. 8, no 1, p. 1-10.

## Agradecimientos

- Este trabajo utilizó recursos computacionales del CCAD-UNC, que forma parte del SNCAD-MinCyT, Argentina.