XXIII CAFQI

aaiFQ
ASOCIACIÓN ARGENTINA DE INVESTIGACIONES FISICOQUÍMICAS

XXIII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA

EL CALAFATE 2023

ADSORCIÓN Y DIFUSIÓN DE LITIO SOBRE g-C3N4 DOPADO CON FÓSFORO PARA APLICACIÓN EN ÁNODOS DE LITIO DE BATERÍAS DE LA PRÓXIMA GENERACIÓN

Villagrán López Yesica C[1], Zoloff Michoff Martín E[2] y López, María B[1].

[1] CIFTA, Universidad Nacional de Catamarca FACEN - CONICET, Av. Belgrano 300, K4700BDH, San Fernando del Valle de Catamarca, Argentina.
[2] INFIQC, Departamento de Fisicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, CONICET, Ciudad Universitaria, X5000, Ciudad de Córdoba, Córdoba, Argentina.
cvillagran@exactas.unca.edu.ar

Introducción: Las baterías secundarias de la próxima generación de Li-Azufre (Li-S) y Li-aire, son tecnologías prometedoras para el almacenamiento de energía. Estas tienen como material anódico activo Li metálico, que presenta algunas problemáticas a resolver antes de ser comercializadas: Uno es el crecimiento desmedido de dendritas durante los ciclos de carga / descarga y el otro es la baja eficiencia coulómbica del proceso debido a que la interfase sólida del electrolito (SEI) no es estable[1]. Nuestro trabajo se centra en analizar, mediante un estudio sistemático usando la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), el potencial uso de láminas 2D de nitruros de carbono grafítico (g-C_3N_4) con diferentes grados de dopaje con fósforo, con el objeto de ser utilizados como lámina protectora en ánodos de litio metálico de baterías de la próxima generación.

Tabla 1. Energías de adsorción y cargas de Bader sobre Litio y sitios de adsorción

Sistema	E_{ads}/eV	Q_B en Li	Q_B en sitio
g-C3N4/Li Sitio 1	-4.35	0.92	-0.604
g-C3N4/Li Sitio 2	-4.24	0.92	-0.71
g-C3N4P-N1/Li Sitio 1	-1.55	0.9	-0.414
g-C3N4P-N1/Li Sitio 2	-1.82	0.93	-0.722
g-C3N4P-C1/Li Sitio 1	-3.65	0.92	-0.721
g-C3N4P-C1/Li Sitio 2	-3.47	0.92	-0.735

Resultados: Se calcularon las energías de dopaje en diferentes sitios de la lámina previa optimización de las posiciones atómicas y de vectores de red. Posteriormente se determinaron las energías de adsorción para un átomo de litio sobre las estructuras más estables. Los resultados muestran una mayor afinidad por la estructura en la que se sustituye C por P (Tabla 1), en acuerdo con el análisis de las densidades de estados proyectadas (pDOS) y los mapas de potencial electrostático (MEP)(Figura 1).

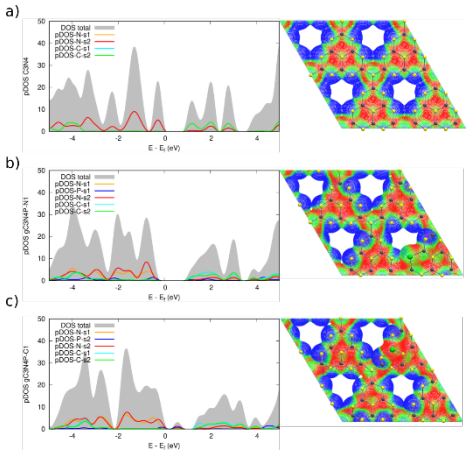

Figura 1. pDOS y MEP en superficie prístina (a) y dopadas (b y c).

Conclusión: Nuestras determinaciones, nos permiten concluir que el dopaje con P se da preferentemente sustituyendo átomos de C en g-C_3N_4 y que la adsorción de Li, se dará preferentemente en el sitio no dopado.

Referencias:

1) Zhang S. S. ACS Appl. Energy Mater. 2018, 1 (3), 910–920. https://doi.org/10.1021/acsaem.8b00055.