

106° Reunión de la Asociación Física Argentina

Segunda Webinar



12 al 15 de octubre de 2021

Efectos de la intercalación de litio en el espectro de excitación de valencia del grafito

• Santiago Mayorga Quarín,^{1,2} Guillermo Eduardo Stutz,^{1,2} Sergio Andrés Ceppi,^{1,2} Manuel Otero,^{3,4} Carla Belén Robledo,^{3,4} Guillermina Leticia Luque,^{3,4} Ezequiel Pedro Marcos Leiva,^{3,4} Daniel Eugenio Barraco Díaz^{1,2}

¹Instituto de Física Enrique Gaviola de Córdoba, CONICET-UNC

²Facultad de Matemática Astronomía y Física - Universidad Nacional de Córdoba

³Instituto de Investigaciones Físico-Químicas de Córdoba, CONICET-UNC

⁴Departamento de Química Teórica y Computacional, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina.

Este trabajo tiene como objetivo estudiar el espectro de excitación de electrones de valencia en muestras de grafito policristalino y grafito intercalado con litio en etapas 1 (LiC_6) y 2 (LiC_{12}), con el objeto de aportar información concerniente a cambios en la estructura electrónica del grafito cuando es utilizado como ánodo en baterías de ion-Li. Para llevar a cabo el objetivo se utiliza la técnica de dispersión inelástica de rayos X (IXS), la cual nos permite obtener información de las excitaciones de electrones de valencia en función de la energía transferida (ω) y del momento transferido (\mathbf{q}), y además por trabajar con rayos X duros nos permite obtener información de volumen, evitando problemas de contaminación o irregularidades en la superficie de las muestras. A bajo q los espectros IXS muestran dos picos característicos del espectro de excitaciones de valencia del grafito para \mathbf{q} perpendicular al eje c . Dichos picos se asocian a excitaciones tipo plasmónicas que involucran electrones π (pico de baja energía) y $\pi + \sigma$ (pico de alta energía). Para q altos el pico de energía más baja deja de apreciarse, posiblemente debido a efectos de amortiguamiento asociados a transiciones interbandas $\pi \rightarrow \pi^*$ de baja energía. Ambos picos plasmónicos presentan una dispersión positiva en función de q , en acuerdo con cálculos ab initio de la función dieléctrica de grafito en el marco de la aproximación RPA (Phys. Rev. B 69, 245419, 2004). También se observó un corrimiento sistemático de los mismos hacia energías más bajas en función de la concentración de litio en el grafito. El desplazamiento debido a la intercalación de litio se vuelve más débil a medida que se aumenta q . Este desplazamiento en energía de los picos podría correlacionarse con la intercalación del litio entre distintos planos de grafeno en el grafito originando un aumento de la separación entre planos grafénicos dando como resultado una reducción de la interacción interplanar (efecto apantallamiento) y, como consecuencia, un desplazamiento de los picos plasmónicos hacia energías menores. Estos cambios observados en las estructuras espectrales, distinguibles en un experimento de IXS con una resolución usual del orden de 1eV, podrían ser candidatos adecuados de rasgos espectrales característicos para determinar el estado de litación de un ánodo de grafito durante el ciclado de una batería de ion-Li.