

## **36RAm. Efecto del sustrato carbonoso en la nucleación de nanopartículas de Sn para ánodos en baterías de ion-litio: Experimentos y modelado computacional.**

Sacha Smrekar <sup>1</sup>, **Martin E. Zoloff Michoff\*** <sup>2</sup>, Jorge E. Thomas <sup>3</sup>, Cecilia A. Calderón <sup>1</sup>, Lucas M. Farigliano <sup>2</sup>, Arnaldo Visintin <sup>3</sup>, Ezequiel P. M. Leiva <sup>2</sup>, Daniel E. Barraco <sup>1</sup>

1. Instituto de Física Enrique Gaviola (IFEG), Universidad Nacional de Córdoba. Córdoba, Argentina. 2. INFIQC, CONICET y Departamento de Química Teórica y Computacional, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina. 3. Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, La Plata, Argentina. E-mail: martin.zoloff@unc.edu.ar

### **Resumen**

En este trabajo hemos estudiado la nucleación de nanopartículas de estaño usando tres diferentes materiales carbonosos como soporte, para obtener los correspondientes compósitos Sn/C. Los materiales carbonosos estudiados fueron: escamas de grafito comercial, nanotubos de carbono (de pared múltiple y 100 nm diámetro) y carbono amorfo (super P ®). La síntesis de las nanopartículas metálicas fue realizada utilizando el método de reducción química a partir de SnCl<sub>2</sub> y NaBH<sub>4</sub>. Los materiales resultantes fueron caracterizados estructuralmente mediante microscopía electrónica de transmisión (TEM) y de barrido (SEM), así como también utilizando la técnica de EDS ("Energy Dispersive Scanning") de la cual se puede obtener la composición de los compósitos de manera semi cuantitativa. El área superficial específica para los materiales compósitos obtenidos fue determinada mediante la adsorción de N<sub>2</sub> y utilizando la teoría BET. Las propiedades electroquímicas de los materiales sintetizados fueron caracterizadas utilizando las técnicas de voltametría cíclica y espectroscopía de impedancia. Se evaluó el desempeño de estos compósitos como ánodos en baterías de ion-litio. Se realizaron estudios de carga y descarga para determinar la capacidad y ciclabilidad de los mismos. De esta manera fue posible determinar que todos los compósitos Sn/C obtenidos presentan un mejor desempeño, en cuanto a capacidad, que el ánodo de grafito que se utiliza comercialmente. Se encontró que el sustrato carbonoso tiene un efecto importante en el desempeño del electrodo, resultando el de mejores propiedades el compósito obtenido a partir de carbono amorfo, lo cual está relacionado con las características estructurales del soporte carbonoso y la correspondiente influencia en el proceso de nucleación y crecimiento de las nanopartículas metálicas. Se modeló computacionalmente el sistema bajo estudio con el objeto de racionalizar las tendencias observadas experimentalmente. Se determinaron los valores para la energía de adsorción de un solo átomo de Sn sobre los distintos soportes carbonosos. Estos valores pueden usarse como referencia en relación con la fuerza impulsora termodinámica para la nucleación de Sn, y resultaron ser el factor clave para comprender las diferencias entre los diferentes materiales carbonosos estudiados.

Palabras clave: Baterías de ion-litio, Estaño, materiales carbonos, DFT.