

Sobre el mecanismo de reacción de TiO₂ nanorutilo como ánodo de baterías de ion Li.

Angélica Duarte-Cárdenas, Pilar Díaz-Carrasco, Alois Kuhn, Flaviano García-Alvarado

Departamento de Química y Bioquímica, Facultad de Farmacia, Universidad San Pablo-CEU, Urbanización Montepríncipe, 28668, Boadilla del Monte, Madrid, España

Desde hace algunos años, la búsqueda de nuevos materiales para ánodos en baterías de litio ha estado enfocada en óxidos de titanio debido a su bajo coste y su baja toxicidad. El TiO₂ rutilo ha sido objeto de amplios estudios porque exhibe un buen comportamiento cuando se encuentra como partículas nanométricas [1]. En esta comunicación se presenta un nanorutilo obtenido a partir del bronce K_{0.2}TiO₂, por extracción del potasio en agua regia durante 48 horas a 80°.

Este nanorutilo sufre un proceso irreversible después de la primera descarga en un rango de voltaje de 3-1V [2]. El proceso es un cambio estructural donde se obtiene el óxido Li_xTiO₂ con estructura tipo cloruro sódico desordenado. Este inserta y desinserta litio en sucesivas cargas-descargas manteniendo la estructura cristalina, según ha podido constatarse mediante difracción de rayos X *ex situ* (Fig.1). La estructura cúbica presenta un alto rendimiento como ánodo (175 mAh g⁻¹ a C/2 durante 300 ciclos). No obstante, este buen comportamiento no se debe a la difusión del litio a través del anfitrión tipo cloruro sódico, ya que, en efecto, el movimiento de litio está fuertemente impedido ($D_{Li^+} \approx 10^{-15}$ cm²s⁻¹). Sin embargo, se ha encontrado que las excelentes prestaciones a altas densidades de corriente se deben a procesos capacitivos siendo la contribución faradaica importante solo a bajas densidades de corriente [3].

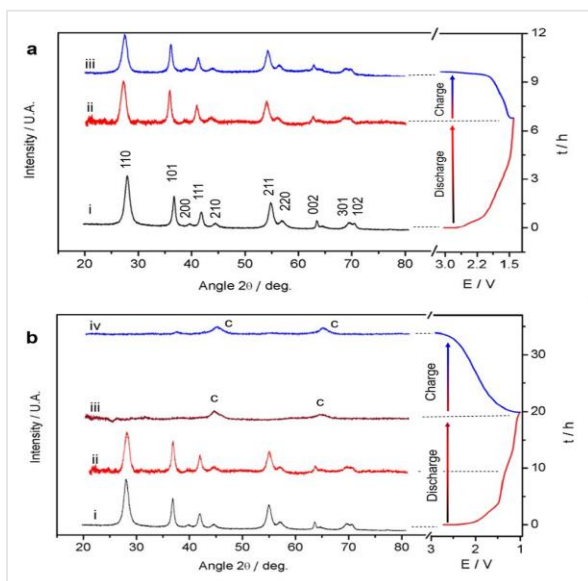


Fig. 1 DRX *ex situ*, a) descarga-carga 3-1.4V, b) descarga-carga 3-1V

Referencias

[1] N. Y.-S. Hu, L. Kienle, Y.-G. Guo, J. Maier, Adv. Mater. 18 (2006) 1421–1426.

[2] E. Baudrin, S. Cassaignon, M. Koelsch, J.P. Jolivet, L. Dupont, J.M. Tarascon, Electrochemistry Communications 9 (2007) 337.

[3] P. Díaz-Carrasco, A. Duarte-Cárdenas, A. Kuhn, F. García-Alvarado, Journal of Power Sources 515 (2021) 230632