



UNL • FACULTAD  
DE BIOQUÍMICA Y  
CIENCIAS BIOLÓGICAS

# XVI Reunión Anual de la Asociación Argentina de **Cristalografía**

del 16 al 26 de noviembre  
de 2021 - Santa Fe



## ANÁLISIS ESTRUCTURAL Y ELECTROQUÍMICO DE $\text{Li}_2\text{MnO}_3$ INCORPORANDO $\text{LiCl}$ COMO REACTIVO

L. Garro,<sup>1\*</sup> S. Terny,<sup>2</sup> L. I. Barbosa,<sup>1</sup> M. Frechero,<sup>2</sup> C. A. López,<sup>1</sup>

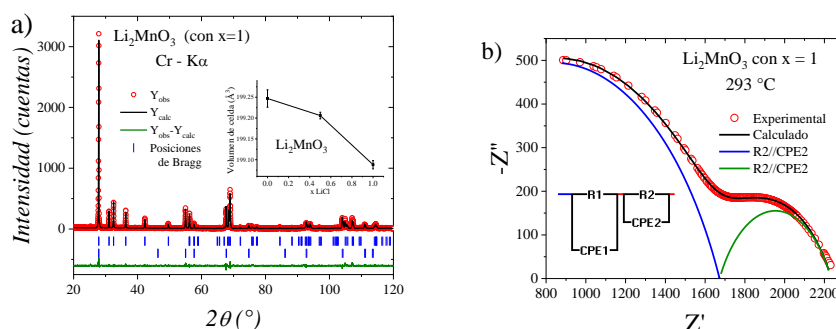
<sup>1</sup> INTEQUI (CONICET-UNSL), Facultad de Química Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional de San Luis, Ejército de los Andes 950, San Luis, Argentina.

<sup>2</sup> INQUISUR – Dpto. de Química – Universidad Nacional del Sur – CONICET – Av. Alem 1253 (8000) Bahía Blanca, Argentina.

\*E-mail: [lucaas\\_2396@hotmail.com](mailto:lucaas_2396@hotmail.com)

Las baterías de ion Li (LIB) son consideradas como los dispositivos de mayor uso para el almacenamiento eficiente de energía. En las LIBs actuales tanto el cátodo como el ánodo están formados por compuestos de intercalación constituidos principalmente de óxidos de metales de transición (material catódico) y grafito (material anódico), respectivamente. A pesar del gran desarrollo que han sufrido estos dispositivos, continúa la necesidad de mejorar las propiedades y/o características de ciertos componentes como son los materiales catódicos. Existe una gran diversidad de ellos utilizados en los dispositivos actuales, de todas maneras, los más empleados son los derivados de óxidos de metales de transición fundamentalmente estructuras laminares basadas en Co,  $\text{LiCoO}_2$ [1]. La necesidad de reducir el uso de Co, principalmente por su creciente costo, motiva la sustitución por metales como Mn promoviendo el uso de materiales como  $\text{Li}_2\text{MnO}_3$ [2]. Paralelamente, la utilización de  $\text{LiCl}$  como fuente de litio es considerado una ventaja en la industrialización frente al uso actual del  $\text{Li}_2\text{CO}_3$ .

Por tal motivo en trabajos previos se ha estudiado la optimización de las condiciones de síntesis de  $\text{Li}_2\text{MnO}_3$  incorporando como reactivo  $\text{LiCl}$  (en 0; 0,5 y 1,0 moles por mol de  $\text{Li}_2\text{MnO}_3$ ). Se utilizó el método cerámico con asistencia de la molienda mecánica con el objeto de encontrar las condiciones óptimas para obtener dichos materiales. En el presente trabajo se completa el análisis de los productos, que resultan en sistemas mixtos  $\text{Li}_2\text{MnO}_3/\text{LiMn}_2\text{O}_4$ , mediante el refinamiento Rietveld (Figura 1.a) de los patrones de difracción. De los mismos, se obtuvo información cristalográfica que evidencia un cambio resultando en la mezcla  $\text{Li}_2\text{MnO}_3/\text{LiMn}_2\text{O}_4$  con un reordenamiento catiónico creciente en  $\text{Li}_2\text{MnO}_3$  con la incorporación de  $\text{LiCl}$ . Además, se realizaron medidas de espectroscopia de impedancia desde temperatura ambiente hasta 300 °C (Figura 1.b) datos que permitieron analizar la respuesta eléctrica de estos sistemas en relación con la estructura cristalina.



**Figura 1:** a) Refinamiento Rietveld de  $\text{Li}_2\text{MnO}_3$  con  $x=1$ , Inserto: Evolución del volumen de celda con la incorporación de  $\text{LiCl}$ . b) Ajuste de los del diagrama de Nyquist para  $\text{Li}_2\text{MnO}_3$  con  $x=1$  a 293 °C.

Palabras clave: LIB, Rietveld, Espectroscopia de Impedancia,  $\text{Li}_2\text{MnO}_3$ .

[1] a) Z.P. Cano *Chem. Nat. Eng.* 3 (2018) 279 b) J.B. Goodenough *Chem. Mater.* 135 (2013) 1167.

[2] a) R. Kataoka *J. Mater. Chem A* 7 (2019) 5381 b) R. Veena *J. Energy Storage* 24 (2019) 100759.

SALETA	ME	PO7, PO50
SÁNCHEZ	RD	PO7
SANTOS-SILVA	T	P3
SARKAR	B	PO38
SARMIENTO	AC	PO26
SIGNORELLA	SR	SP4, PO46
SIGNORELLA	S	PO46
SIRENA	M	PO26
SOLER-ILLIA	JAA	PO25
SUAREZ	G	PO9
SUAREZ	SA	SP1
SUAREZ	LP	SP2
SUAREZ	IP	SP2
SUÁREZ	S	PO8
SUÁREZ	SD	PO41
SUAREZ ANZORENA	R	PO47
TAMAYO-CARREÑO	AP	PO48
TARTALINI	V	PO46
TERNY	S	PO21, PO49
TOBIA	D	PO7, PO30, PO50
TOGNOLI	VE	PO7
TOLMIE	CS	PO43
TOLOSA	MR	OC8, PO51
TORO	RA	PO52, PO55
TORO-HERNÁNDEZ	RA	PO48
TORRES	EA	PO37
TORRES MOLINA	T	PO30
TOSCANI	LM	PO47
TRAVE	G	SP2
TROIANI	HE	PO50
ULLA	MA	PO6
VAILLARD	SE	PO38
VALLEJO	W	PO48
VARELA	KN	OC1, PO53
VÁRQUEZ	P	PO20
VEGA	D	PO10, PO24
VEGA CASTILLO	J	PO2, PO54
VIVAS-ARELLANO	M	PO55
WINKLER	EL	PO50
ZAMARO	JM	PO6, PO44
ZELAYA	E	PO36
ZERI	AC	P4
ZOMERO	PN	PO10
ZYSLER	RD	PO50