
Título em Português: Estudo Ab initio das Propriedades Estruturais, Eletrônicas, e Energéticas de Compostos de Sódio NaMx (M = N, P, As, Sb, Bi) com aplicação para o desenvolvimento de baterias.

Título em Inglês: ab initio investigation of energetic, structural and electronic properties of sodium crystals elements from group 15 of periodic table applied for the development of batteries.

Área de Pesquisa: Físico-Química

Palavras Chave: sodium-ion baterries - lithium - DFT

Ag. Financiadora do Projeto: FAPESP - Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo

Projeto: Iniciação Científica

Unidade de Apresentação: Instituto de Química de São Carlos

Departamento:

Validado em: 30/09/2020

Autor:

Nome: Giovanna Fardini Lima Unidade:

Instituição: Universidade de São Paulo

Orientador:

Nome: Juarez Lopes Ferreira da Silva Instituição: Universidade de São Paulo

Unidade: Instituto de Química de São Carlos

Colaborador:

Nome: Tuanan da Costa Lourenço Instituição: Instituto de Química de São Carlos

Resumo do Trabalho em português:



Estudo *Ab initio* das Propriedades Estruturais, Eletrônicas, e Energéticas de Compostos de Sódio NaM_x (M = N, P, As, Sb, Bi) com aplicação para o desenvolvimento de baterias.

Giovanna Fardini Lima, Tuanan da Costa Lourenço, Juarez L. F. Da Silva

Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, SP, Brasil.

giovannafar@usp.br

Objetivos

Baterias portáteis ou estacionárias tornaram-se essenciais no cotidiano, e atualmente, as baterias mais utilizadas são fabricadas com lítio-íon. Entretanto, lítio é um metal escasso na natureza, e.g., em menos de um século a demanda mundial não poderá ser totalmente atendida. Uma das alternativas mais promissoras são baterias de sódio-íon, pois o sódio é mais abundante que o lítio e possui mecanismos de funcionamento análogos aos dele.^[1] Contudo, um dos principais desafios no desenvolvimento de baterias de sódio-íon é em relação ao material do ânodo. Dessa maneira, o objetivo deste projeto é realizar um estudo teórico das propriedades estruturais, energéticas, e eletrônicas dos diferentes cristais de sódio que podem ser formados nos ânodos durante o ciclo eletroquímico para fornecer um entendimento atomístico e auxiliar na seleção de novos materiais.

Métodos e Procedimentos

Os cálculos para descrever os fenômenos que ocorrem em nível molecular foram realizados utilizando a teoria do funcional de densidade (da sigla em inglês – DFT) implementada a partir do Vienna *Ab initio* Simulation Package (VASP). Na DFT todas as variáveis observáveis são calculadas a partir da densidade eletrônica utilizando os teoremas de Hohenberg–Kohn.^[2] Isto é, pelo uso de um função de densidade eletrônica é possível descrever as propriedades de um sistema que esteja em seu estado fundamental.

Resultados

Inicialmente foi realizada a otimização de todas as estruturas experimentais encontradas na literatura para cristais formados com ânions do grupo 15 da tabela periódica a partir do cálculo de tensor de stress. Os resultados de parâmetros de rede calculados foram comparados com os valores experimentais e os erros foram todos menores que 3% exceto para as estruturas NaN₃ e NaAs_{0.33} cúbica. Contudo, para ambas tal divergência pode ser justificada pelas condições experimentais em que os cristais são estáveis, que difere da condição padrão utilizada nos cálculos. Em seguida, fez-se uma troca entre os ânions de cada estrutura dentro do grupo e sua respectiva otimização, também pelo cálculo de tensor de stress. A partir disso, foi calculada a variação de energia total do cristal de modo que se pudesse encontrar o composto com melhor estabilidade, e o número de coordenação efetivo (da sigla em inglês – ECN) para o cátion e o ânion do cristal.

Conclusões

Até o presente momento, foi possível otimizar diferentes estruturas para cristais de sódio formados a partir de ânions do grupo 15 da tabela periódica, bem como o cálculo de energia e ECN para todas as estruturas estudadas. A partir dessa otimização e comparação com os valores experimentais obteve-se em quase todos os casos um erro menor que 3%;

Referências Bibliográficas

- [1] Hwang, J.-Y.; et al. 2017, 46, 3529–3614.
- [2] Ramachandran, K.; et al. Springer Science Business Media, 2008.