



ESTUDIO TEÓRICO DE LA SUPERFICIE DE LiFePO_4

Jhoana Lizeth González Cansino, Joel Ireta Moreno
Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa
jhoana.liz@hotmail.com

La biomineralización es la formación de minerales ocurrida naturalmente en organismos vivos. En este proceso, los péptidos juegan un papel importante debido a la gran diversidad química de grupos funcionales, al carácter hidrofóbico e hidrofílico y las diferentes estructuras secundarias (cadena aleatoria, alfa hélice y hojas beta). Por otro lado, el LiFePO_4 es un material ampliamente usado como cátodo en las baterías recargables ion-litio. Con la finalidad de sintetizar cátodos de LiFePO_4 más eficientes, se están buscando péptidos que induzcan la biomineralización de éste (1). Es por tanto importante estudiar la interacción péptido-superficie de LiFePO_4 para coadyubar en dicha búsqueda. Como punto de partida se pretende estudiar la interacción de un aminoácido con una superficie de LiFePO_4 .

En este trabajo se presenta el estudio de reconstrucción de la superficie (100) de LiFePO_4 , para lo cual se usó la teoría de los funcionales de la densidad (DFT) en el formalismo de Kohn-Sham, el método del proyector de ondas aumentadas (PAW), la aproximación propuesta por Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) al funcional de intercambio y correlación y una base de ondas planas con un corte en la energía de 750 eV. Primero se muestra que la corrección de Hubbard, conocida como DFT+U, y las interacciones tipo van der Waals, incluidas siguiendo la formulación empírica de Tkatchenko-Scheffler, mejoran la descripción de PBE de los parámetros de la celda unitaria del LiFePO_4 antiferromagnético, reduciendo el error relativo en la descripción de los parámetros de red menor a 0.7%. La superficie (100) del LiFePO_4 se investigó en su estado de alto espín, se determinó el vacío adecuado para evitar la interacción entre superficies vecinas y encontró que el Fe en la superficie se encuentra pentacoordinado, con una geometría de bipirámide trigonal, en contraste con la hexacoordinación y la geometría octaédrica que presenta en el bulto. Con respecto al Li, éste pasa de estar rodeado por seis ligantes en el bulto, a dos en la superficie. A pesar de estos cambios, se encontró que la reconstrucción de la superficie es mínima.

- (1) Lee, Y. J.; Yi, H.; Kim, W.-J.; Kang, K.; Yun, D. S.; Strano, M. S.; Ceder, G.; Belcher, A. M. Fabricating Genetically Engineered High-Power Lithium-Ion Batteries Using Multiple Virus Genes. *Science* 2009, 324, 1051-1055.