



Estudio teórico de saturación de litio en fosforeno

Fernando Torres¹, Andrés Garay²

¹Universidad Autónoma de Sinaloa; México ²Centro de investigación en materiales avanzados
unidad Monterrey; México
e-mail: ferwhat23@gmail.com

Por medio de cálculos *ab initio* se estudio la saturación de Fosforeno con litio. Para ello se trabajo bajo el marco de la aproximación del gradiente generalizado (GGA) utilizando el funcional de Perdew, Burke y Ernzerhof (PBE)¹, implementado en el paquete computacional VASP (Vienna Ab initio Simulation Package)²⁻³. La adsorción de litio se llevo a cabo sobre una súper celda 2x2x1 de fosforeno, donde fueron analizadas diferentes concentraciones de adsorción de litio (Li_nP_{16} , $n=1\sim 16$). Se utilizó un espaciado perpendicular a la monocapa en el eje z de 20 Å para evitar interacción entre monocapas, con un mallado de 13x10x1 puntos k en el espacio recíproco con la metodología desarrollada por Monkhorst Pack. Los resultados de la simulación sugieren que a una concentración del 100% ($\text{Li}_{16}\text{P}_{16}$) se mantiene la estructura inicial del fosforeno, sin embargo la adsorción de litio por ambas caras del fosforeno a concentraciones por debajo del cien por ciento ($n=15\sim 9$) conduce a la deformación estructural produciendo una transformación de fase. Por otro lado llevando a cabo la saturación de solamente una de las caras ($n=8\sim 1$) no promueve la deformación estructural del fosforeno. Además la estructura de bandas indica un comportamiento metálico del sistema fosforeno-litio (Li_8P_{16}) saturado solamente por una de las caras del fosforeno. Finalmente los resultados muestran que el fosforeno podría adsorber altas concentraciones de litio lo cual ubica al fosforeno como un material prometedor para ser usado como ánodo en baterías Li-ion.

(1) Perdew, J. P.; Burke, K.; Ernzerhof, M. Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Phys. Rev. Lett.* **1996**, 77 (18), 3865– 3868.

(2) Kresse, G.; Furthmüller, J. Efficient Iterative Schemes for Ab Initio Total-Energy Calculations Using a Plane-Wave Basis Set. *Phys. Rev. B* **1996**, 54 (16), 11169–11186

(3) Kresse, G.; Furthmüller, J. Efficiency of Ab-Initio Total Energy Calculations for Metals and Semiconductors Using a Plane-Wave Basis Set. *Comput. Mater. Sci.* **1996**, 6 (1), 15–50.