

Struttura, composizione e proprietà elettrochimiche di ossidi stratificati di metalli di transizione ricchi in litio.

Arcangelo Celeste

arcangelo.celeste@uniroma1.it

Gli ossidi stratificati di metalli di transizione ricchi in litio (LRLO) sono un'ampia classe di materiali usati come elettrodi positivi ad elevata capacità nelle batterie litio ione. Le loro alte prestazioni elettrochimiche (capacità: $>200 \text{ mAhg}^{-1}$; energia: 900 WhKg^{-1}) permettono di rispondere alle sfide di un trasporto più sicuro ed ecologico e, contemporaneamente, a uno stoccaggio di energia più economico e sostenibile. Gli LRLO sono ossidi sovra-stechiometrici in litio e con formula generale $\text{Li}_{1.2}\text{TM}_{0.8}\text{O}_2$, dove TM rappresenta una miscela di metalli di transizione costituita principalmente da manganese, nichel e cobalto. L'eccezionale comportamento elettrochimico ha origine nella loro composizione, struttura e disordine a livello atomico.

In questo seminario, saranno riportati alcuni recenti risultati che mostrano l'importanza della composizione dei metalli sulle prestazioni, comportamento elettrochimico e resilienza strutturale di questi materiali. Verrà mostrata la sostituzione del cobalto, considerato una materia prima critica, con diverse quantità di litio e alluminio e il suo effetto sulle caratteristiche chimico-fisico ed elettrochimiche. Inoltre, un secondo esempio dell'influenza della composizione sulle proprietà di questi ossidi sarà discusso mostrando l'introduzione di diverse quantità di ferro in un materiale privo di cobalto.

Infine, verranno illustrati differenti modelli strutturali per la descrizione del reticolo cristallino, sviluppati utilizzando l'approccio delle supercelle e dell'introduzione di difetti in una cella unitaria convenzionale. Entrambi questi approcci permettono di rappresentare la complessa struttura degli ossidi di metalli di transizione ricchi in litio meglio dei tradizionali prototipi strutturali.