



## Desarrollo de cátodo para batería de ion aluminio acuosa: Estudio *ab initio* y experimental de $\text{Al}_2\text{Mn}_{(1-x)}\text{B}_x\text{O}_4$ (B=Ni,Sr,Co)

Development of cathode for aqueous aluminum ion battery: *ab initio* and experimental study of  $\text{Al}_2\text{Mn}_{(1-x)}\text{B}_x\text{O}_4$  (B = Ni, Sr, Co)

José Alonso Hernández de la Cruz<sup>a\*</sup>, Pierre Giovanni Maní González<sup>a</sup>, Claudia Alejandra Rodríguez González<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Departamento de Física y Matemáticas, Maestría en Ciencia de Materiales, Universidad Autónoma de Ciudad Juárez, México. \*Autor de correspondencia. Correo: al216709@alumnos.uacj.mx

### No. de resumen

2CP21-156

### Formato

Cartel

### Evento

2.º Coloquio de Posgrados del IIT

### Presentador

José Alonso Hernández de la Cruz

### Tema

Ciencia, Ingeniería y Tecnología de los Materiales

### Estatus

Estudio en curso

### Fecha de la presentación

Noviembre 11, 2021

### Resumen

Recientemente la expansión del uso de fuentes de generación de energía renovable ha producido la necesidad de sistemas de almacenamiento, ya que los picos de producción y consumo usualmente no son los mismos. Sin embargo, los actuales sistemas de ion litio y ácido-plomo presentan ciertas desventajas, por lo que se han propuesto nuevos sistemas basados en el ion aluminio y utilizando electrolitos acuosos, mostrando prometedoras capacidades gravimétricas. Por lo tanto, en este trabajo se propone el estudiar de manera teórico-experimental el efecto de dopaje con B=Ni, Co o Sr en la estructura de  $\text{Al}_2\text{Mn}_{(1-x)}\text{B}_x\text{O}_4$ , con el fin de limitar la disolución del manganeso y mantener su estabilidad electroquímica. La síntesis de  $\text{Al}_2\text{Mn}_{(1-x)}\text{B}_x\text{O}_4$  B=Ni, Co o Sr se llevará a cabo mediante dos pasos, en el primero se sintetizará un carbonato con los elementos metálicos por el método hidrotermal, para su posterior calcinación y obtención de la fase deseada. En el aspecto teórico, se trabajará con la teoría del funcional de la densidad, utilizando el código CASTEP para realizar el cálculo del voltaje de circuito abierto y energía de inserción de un ion de aluminio en el cátodo. Este trabajo permitirá identificar si el uso de otros elementos de transición en la red del  $\text{Al}_2\text{Mn}_{(1-x)}\text{B}_x\text{O}_4$  limita la disolución del manganeso, permitiendo tener baterías acuosas de ion aluminio que puedan retener su capacidad gravimétrica durante varios ciclos de carga y descarga, con el objetivo final de lograr un sistema electroquímico de almacenamiento de energía eficiente y económicamente viable.

**Palabras clave:** batería; aluminio; ion; hidrotermal; intercalación.



## Abstract

Recently, the increasing use of renewable energy sources has produced the need for storage systems since the production and consumption peaks are usually not the same. However, the current lithium ion and lead acid systems have certain disadvantages, for which reason new systems based on the aluminum ion and using aqueous electrolytes have been proposed showing promising gravimetric capacities. Therefore, in this work it is proposed to study in a theoretical-experimental way the effect of doping with B = Ni, Co or Sr on the structure of  $\text{Al}_2\text{Mn}_{(1-x)}\text{B}_x\text{O}_4$ , in order to limit the dissolution of manganese and maintain its electrochemical stability. The synthesis of  $\text{Al}_2\text{Mn}_{(1-x)}\text{B}_x\text{O}_4$  B = Ni, Co or Sr will be carried out through two steps, in the first step a carbonate will be synthesized with the metallic elements by the hydrothermal method, for its subsequent calcination and obtaining the phase desired. In the theoretical aspect, we will work with the density functional theory, using the CASTEP code to calculate the open circuit voltage and insertion energy of an aluminum ion in the cathode. This work will allow to identify if the use of other transition elements in the  $\text{Al}_2\text{Mn}_{(1-x)}\text{B}_x\text{O}_4$  limits the dissolution of manganese, allowing to have aqueous aluminum ion batteries that can retain their gravimetric capacity during several charge and discharge cycles, with the ultimate goal of achieving an efficient and economically viable electrochemical energy storage system.

**Keywords:** battery; aluminum; ion; hydrothermal; intercalation.

## Entidad legal responsable del estudio

Universidad Autónoma de Ciudad Juárez.

## Financiamiento

Universidad Autónoma de Ciudad Juárez, Comercializadora de la Industria de la Construcción Cinco Estrellas, S. A. de C. V.

## Conflictos de interés

Los autores declaran que no existe conflicto de intereses.