

Efecto de la Arquitectura Molecular de Copolímeros Catiónicos obtenidos vía polimerización RAFT sobre propiedades mecánicas y electroquímicas de cátodos de Baterías Li-S

Ricardo Miron-Velázquez¹, Hortensia Maldonado-Textle², Judith Nazareth Cabello-Romero², Enrique Jiménez Regalado¹, Claude St. Thomas¹, José Jarib Alcaraz-Espinoza³, Guadalupe Ramos-Sanchez³, Ignacio González⁴

¹Centro de Investigación en Química Aplicada, Procesos de Polimerización, Mexico. ²Centro de Investigación en Química Aplicada, Química Macromolecular y Nanomateriales, Mexico. ³Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Departamento de Química, Mexico. ⁴Univeridad Nacional Autónoma de México, Departamento de Química, Mexico.

Las baterías de litio-azufre (Li-S) presentan una alta densidad energética teórica, 8 veces mayor a las baterías de litio comerciales. El principal reto de estos dispositivos es la solubilización de las especies intermedias de azufre en el electrolito limita su capacidad de almacenamiento y tiempo de vida. En el presente trabajo, se estudió la relación estructura-propiedades de copolímeros cationicos para su aplicación como aglutinantes en baterías de Litio-Azufre. Se sintetizaron copolímeros de sales de cloruro de poli(vinilbenciltimetilamonio) [PVBTMAC] y poli(acrilato de etiltrimetilamonio) [PAETMAC], comonómeros que proveen propiedades de rigidez y flexibilidad al copolímero, respectivamente.

Los polímeros fueron obtenidos mediante la polimerización RAFT en solución acuosa, lo que permitió la síntesis de copolímeros con arquitecturas controladas: en bloque, estadísticos, tipo estrella con núcleo entrecruzado y ramificados estadísticos. Para la caracterización de los copolímeros, se realizó el intercambio iónico del ión cloruro por bis(trifluorometansulfanil)imiduro (TFSI) para mitigar la corrosión del electrodo y mejorar las propiedades electroquímicas. Los copolímeros fueron caracterizados mediante RMN, FT-IR, SEC, reología rotacional, DSC, TGA, DRX, pruebas de adsorción de polisulfuros y nucleación de Li_2S . Los resultados de RMN revelaron una interacción π -catión entre el anillo aromático y el grupo trimetilamonio entre ambos monómeros la cual se evidenció mediante el cambio en la multiplicidad de las señales del anillo aromático del copolímero estadístico, así como disminución del volumen hidrodinámico observado en los resultados de los análisis SEC y reología rotacional.

Las pruebas mecánicas en cátodos exhibieron que la presencia de PAETMA en los copolímeros mejora la deformación plástica y la tenacidad en comparación con el PVBTMA rígido lo cual mejora el desempeño de los aglutinantes sobre los ciclos de expansión-contracción de la batería. El copolímero estadístico mostró una mejor deformación y tenacidad, aunque las interacciones π -catión previnieron un comportamiento excesivamente plástico. Para los copolímeros entrecruzados se encontró que los polímeros estadísticos entrecruzados presentan un comportamiento de alta rigidez y fragilidad, mientras que los polímeros tipo estrella exhibieron una tenacidad y módulo superiores, e mayor deformación que el copolímero estadístico. Las propiedades superiores del copolímero tipo estrella se atribuyen a su capacidad de transferencias de esfuerzos debido a la capacidad de enredo e interacción con superficies de los brazos poliméricos

Keywords: Polimerización RAFT, Baterías de Litio, Polielectrolitos

Acknowledgment:

Agradecemos a la Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación por financiar el proyecto Ciencia de Frontera CF-1717328. A el Centro de Investigación en Química Aplicada y la Universidad Autónoma Metropolitana principalmente en el grupo de almacenamiento de energía y el Laboratorio Nacional de Baterías de Ion Litio y post-Litio por brindar la infraestructura para el desarrollo del proyecto.

Presenting author's email: ricardo1212miron@hotmail.com