

## Eletrorreposição de magnésio em diferentes líquidos iônicos e simulação por Dinâmica Molecular para esses eletrólitos.

Vitor L. Martins<sup>1\*</sup> (PG), Sérgio M. Urahata<sup>1</sup> (PQ), Mauro C. C. Ribeiro<sup>1</sup> (PQ), Roberto M. Torresi<sup>1</sup> (PQ).  
martinsv@iq.usp.br

1- Departamento de Química Fundamental, Instituto de Química – USP, São Paulo, SP, Brasil.

Palavras Chave: eletrorreposição, magnésio, líquidos iônicos, dinâmica molecular.

### Introdução

Atualmente as baterias secundárias são largamente utilizadas em eletrônicos portáteis. E são construídas por cátodo de óxido de cobalto, ânodo de carbono e solução eletrolítica de sal de lítio em solvente orgânico. O interesse na aplicação dessas baterias recarregáveis em sistemas maiores, como carros elétricos, faz-se necessário o estudo para substituições desses materiais que a formam para um desempenho melhor e maior segurança.

Como alternativa ao solvente orgânico, que apresenta limitação a altas temperaturas esta sendo estudada a utilização de líquidos iônicos<sup>1</sup>, é considerado a utilização de diferentes óxidos no cátodo e o aumento da área de superfície para minimizar a toxicidade e aumentar o desempenho<sup>2</sup>, já para o ânodo a utilização de Li metálico no lugar de carbono aumenta a carga específica do eletrodo, mas a periódica deposição/dissolução acarreta em mudanças profundas no material, o Mg metálico aparece como alternativa natural ao Li, já que também apresenta alta afinidade eletrônica e baixa massa molecular.

### Resultados e Discussão

Estão sendo utilizados os líquidos iônicos BMMITFSI e BMMIBF<sub>4</sub> para a deposição de magnésio, com diferentes sais do metal, como Mg(CF<sub>3</sub>SO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, Mg(TFSI)<sub>2</sub> e Mg(BF<sub>4</sub>)<sub>2</sub>.

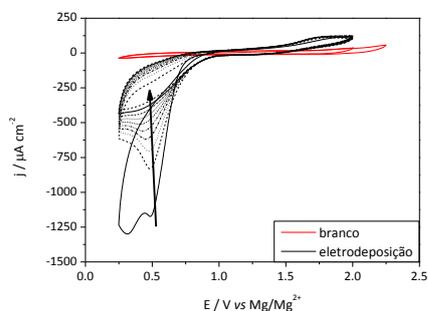


Figura 1. Eletrorreposição de magnésio realizada com Mg(CF<sub>3</sub>SO<sub>3</sub>)<sub>2</sub> em BMMITFSI com velocidade de varredura de 50 mV s<sup>-1</sup> em eletrodo de Pt.

É possível observar na figura 1 a corrente catódica em 0,50 V referente à deposição do metal, sendo que o potencial de circuito aberto foi de 0,97 V. Não é observado corrente anódica referente

à dissolução do magnésio, que pode ser devido uma oxidação química ocorrendo antes de chegar ao potencial para a oxidação, porém a voltametria cíclica em velocidades mais altas não elucidada este ponto.

A mudança no perfil do pico de redução na figura 1 indica que a superfície do eletrodo de trabalho esta mudando conforme aumenta o número de ciclos, demonstrando que há deposição de Mg.

Além disto, o intercruzamento de correntes na figura 1 e 2 também esta relacionado com o comportamento de crescimento e nucleação do magnésio metálico na superfície do eletrodo.

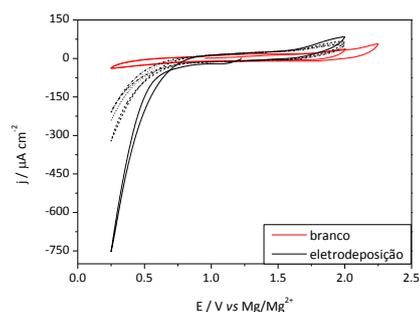


Figura 2. Eletrorreposição de magnésio realizada com Mg(TFSI)<sub>2</sub> em BMMITFSI com velocidade de varredura de 50 mV s<sup>-1</sup> em eletrodo de Pt.

Esta sendo feita a simulação por dinâmica molecular para esses eletrólitos para o entendimento da solvatação do íon metálico e do processo de difusão<sup>3</sup>.

### Conclusões

Foi possível constatar que o processo de deposição do metal ocorre utilizando diferentes sais no LI BMMITFSI, mas o processo de dissolução não é observado. Esta em estudo o uso de outros sais em outros LIs com diferentes eletrodos de trabalho.

### Agradecimentos

Os autores agradecem pelo apoio financeiro ao CNPq e FAPESP processo 2009/09209-4.

<sup>1</sup> Camilo, F. C.; Kawano, Y. e Torresi, R. M. *Electroch. Acta.* **2007**, 52, 6427.

<sup>2</sup> Menezes, W. G.; Reis, D. M.; Benedetti, T. M.; Oliveira, M. M.; Soares, J. F. e Torresi, R. M. *J. Coll. and Int. Scienc.* **2009**, 337, 586.

<sup>3</sup> Monteiro, M. J.; Camilo, F. F.; Siqueira, L. J. A.; Ribeiro, M. C. C. e Torresi, R. M. *J. Phys. Chem. B.* **2008**, 112, 2102.