

MOBILIDADE DO ÍON LÍTIO NO PLANO DE CONDUÇÃO DA β -ALUMINA

Paulo Antonio MARINHO*
Elson LONGO**
José Arana VARELA***
Victor Carlos PANDOLFELLI****

RESUMO: Foram estudados teoricamente com o método CNDO/2, a mobilidade do íon lítio e a influência da água no plano de condução da β -alumina de lítio. Os resultados de hidratação são concordantes com os dados experimentais.

UNITERMOS: β -alumina de lítio; CNDO/2; condutividade elétrica.

INTRODUÇÃO

As β -aluminas dos metais alcalinos são utilizadas em baterias devido a sua alta condutividade elétrica. Esta condutividade está ligada à mobilidade dos íons dos metais alcalinos na rede cristalina (1, 2).

Com composição $\text{Li}_2\text{O} \cdot 11 \text{Al}_2\text{O}_3$, a β -alumina de lítio possui uma estrutura cristalina lamelar, em que o alumínio e o oxigênio (Al_2O_3) formam camadas compactas de 11 Å de espessura. Entre essas camadas existem planos que contêm os íons lítio e oxigênio (3). Esta estrutura está representada na Figura 1, em que são identificados três sítios particulares no plano de condução:

- o sítio de Beavers-Ross, onde de preferência, se localizam os íons lítio;
- o sítio do oxigênio 05, que interage com os grupos Al_2O_3 e os íons lítio,
- o sítio anti-Beavers-Ross, onde se localiza o oxigênio da molécula de água. (3, 4, 5, 6, 7).

Neste estudo, propõe-se analisar a mobilidade do átomo de lítio no "cristal", e o papel da água, quando esta se intercala na estrutura da β -alumina, a nível molecular. O mecanismo de interação da água com o átomo de lítio da β -alumina e os efeitos adjacentes decorrentes desta interação serão analisados, utilizando-se do método mecânico-quântico CNDO/2.

MATERIAL E MÉTODOS

Com os dados experimentais foram elaborados os modelos para o estudo mecânico-quântico de interação da molécula de água com o lítio da β -alumina e a mobilidade do mesmo.

Deste modo, a fórmula $x \text{H}_2\text{O} \cdot \text{Li}_2\text{O} \cdot 11 \text{Al}_2\text{O}_3$ foi simplificada para $x \text{H}_2\text{O} \cdot \text{Li}_2\text{O} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$, com $x = 0,1$ e 2. A espécie Li_2O forneceu o oxigênio 05 descrito na Fig. 1, sendo que os dois átomos de lítio localizaram-se no plano de condução defasados de 180° . Também, as moléculas

* Bolsista da FAPESP.

** Departamento de Química — UFSCAR — 13.560 — São Carlos, SP.

*** Departamento de Físico-Química — UNESP — 14.800 — Araraquara, SP.

**** Departamento de Engenharia de Materiais — UFSCAR — 13.560 — São Carlos, SP.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. WILL, F. G. & MITOFF, S.P. — *J. Electrochem. Soc.*, 1976, 123, 310C.
2. SCHANABLE, G. L. & SCHMIDT, P.F. — *J. Electrochem. Soc.*, 1975, 122, 457.
3. PETERS, C. R.; BELTMAN, M.; MOORE, J. W. & GLICK, M. D. — *Acta Crystallogr.*, Sec. B27, 1971, 1826.
4. KANEDA, T.; BATES, J. B. & WANG, J. C. — *Solid State Commun.*, 1978, 28, 469.
5. DUNEY, N. J.; BATES, J. B.; WANG, J. C.; BROWN, G. M.; LARSON, B.C.; & ENGSTRON, H. — *Solids State Ionics*, 1981, 5, 225.
6. BATES, J. B.; DUDNEY, N. J. BROWN, G. M. & FRECH, R. — *J. Chem. Phys.*, 1982, 77, 4838.
7. DUDNEY, N. J.; BATES, J. B. & WANG, J. C. — *J. Chem. Phys.*, 1982, 77, 4857.
8. POPLI, J. A.; SANTRY, D.P. & SEGAL, G.A. — *J. Chem Phys.*, 1965, 43, 5136.
9. ROOHTAAN, C. C. J. — *Rev. Mod. Phys.*, 1951, 23, 69.
10. LONGO, E.; VARELA, J.A.; SANTILLI, C.V. & WHITTEMORE, O.J. *In: Kinetics of MgO and Al₂O₃ ceramics*. Ad. Ceram., Am. Ceram. Soc., Inc., MIT Cambridge, Massachusetts, 1984, p. 592-600.
11. DUDNEY, N.J.; BATES, J.B.; WANG, J.C.; BROWN, G.M.; LARSON, B.C. & ENGSTRON, H. — *Solid State Ionics*, 1981, 5, 225.
12. KUHN, P.L.; RICHTER, L.J. & CONRADI, M.S. — *J. Chem. Phys.*, 1982, 76, 6.
13. KLINE, D. & STORY, H.S. — *J. Chem Phys.*, 1972, 57, 5180.
14. DUDNEY, N.J.; BATES, J.B. & WANG, J.C. — *Phys. Rev. B.*, 1981, 24, 6831.
15. HIGHE, A. & VAUGHAM, R.W. — *J. Chem. Phys.*, 1978, 69, 4206.
16. DUBIN, R.R. & CASABELLA, I.A. — *Electrochimica Acta*, 1979, 24, 775.
17. AILION, D.C. & HAYES, C.E. *In: VASHISTA, P.; MUNDY, J.N. & SHENOY, ed. — Fast ion transport in solids: electrodes and electrolytes*. Amsterdam, 1979. p. 301-310.

Recebido em 21.08.85