

同步辐射纳米成像和大数据挖掘助推能源材料研究

2017-11-29 | 文章来源: 多学科中心 | 【大 中 小】

由高能物理所多学科中心X射线成像实验站张凯副研究员和国内外课题组合作,使用同步辐射纳米成像和大数据挖掘技术针对锂电池材料的研究取得了重要的进展,研究成果近期发表在Nano Letters上。

能源的生产和消费对全球经济发展和进步起着举足轻重的作用。各国政府都加大了对新能源技术的投入,期待开发清洁、可再生能源。其中,以锂电池为代表的高效储能器件已成为新能源研究的重要方向之一。在该研究领域,电池是典型的复合多尺度异质系统。虽然基本的离子迁移发生在原子尺度,但是最重要的器件性能指标,例如能量密度、高速充/放电能力和材料寿命等都取决于多个不同尺度的联合效应。因此,在微观、介观到宏观尺度范围内研究复合电极的三维结构、元素分布和价态信息以及晶相等信息,对理解器件内离子和电荷的迁移以及研发高效率、高稳定性的电池材料至关重要。

近年来,随着新一代的高能量、高光度的同步辐射光源的不断涌现,具有纳米量级空间分辨能力的X射线成像技术得到了快速发展。结合近边吸收谱技术,纳米分辨谱学成像技术可以在原位环境下无损重构锂电池中电极材料的三维结构信息、元素分布和价态信息,进而帮助人们了解电池材料的宏观性质和微观物质结构之间的相互联系。这些信息不仅从应用角度有助于材料科学家进一步改进电池材料的性质,而且对电池材料失效机制的基础科学研究也有着重要的价值。

另一方面,与高光度的同步辐射光源等人科学装置上的其它实验技术类似,同步辐射纳米分辨谱学成像技术将产生海量的实验数据。这些科学大数据的产生对数据处理技术带来了新的挑战和机遇。在传统的研究方式中,人们对数据的认知多专注于数据之间简单的因果关系。而科研大数据则要求寻找数据之间的弱关联和逻辑性,最终形成精炼的科研数据信息,并且总结出具有归纳性、自动化性、可视性的结论。随着科研大数据时代的来临,如何做好对大数据的处理、整合和发掘从而得出更有价值的信息,是当前科学技术发展需要解决的关键问题之一。

针对纳米成像方法学和应用研究,我所多学科中心X射线成像实验站近年来开展了大量的工作。其中,张凯副研究员和国内外课题组合作,利用同步辐射纳米分辨谱学成像和大数据挖掘技术在针对能源材料的研究中近期获得了较好的研究成果。研究团队利用同步辐射纳米谱学成像技术,深入研究了锂离子重要正极材料钴酸锂(LiCoO₂)。在原位实验条件下,他们实时观察单个电极颗粒随着充放电速率的变化而发生的化学价态重新分布(图1, ACS Energy Lett. 2, 1240-1245 (2017))。这个工作表明正极材料钴酸锂(LiCoO₂)电极颗粒能够根据化学环境的变化而进行自身的调整。为了使研究结果更具有统计性,该研究团队又对软包电池中上百个LiCoO₂颗粒进行纳米尺度谱学成像。在短时间里他们采集了上千万条X射线近边吸收谱,并进行了深入的大数据挖掘。他们首先对X射线近边吸收谱进行特征值提取,再利用多种数据聚类算法,实现了对海量X射线近边吸收谱的快速分析和识别,进而获得了电池颗粒的结构、形貌、价态分布之间的关联,首次直接在钴酸锂电池中观测到了Co离子溶解和金属Co重新沉积以及局部过渡嵌锂导致材料失效的现象(图2, Nano Letters, DOI: 10.1021/acs.nanolett.7b03985 (2017))。这项工作作为研究人员了解钴酸锂电池的性能衰减机制提供了有效的帮助,并对该材料的性能改善起到了重要指导作用。更重要的是,研究中所采用的大数据分析,对利用人科学装置开展的前沿研究的众多学科领域都具有重要的借鉴意义。

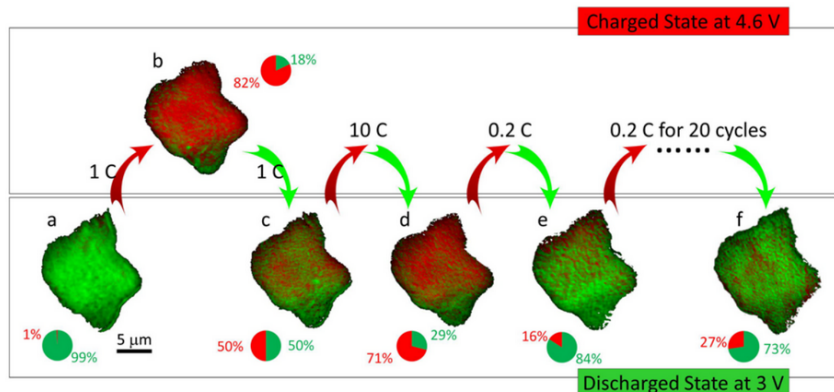


图1. 原位观测单颗粒钴酸锂(LiCoO₂)电池材料在23次充放电过程中随着充放电速率的不同而产生的化学价态分布信息。图中红色代表钴酸锂(LiCoO₂)电池颗粒在充电状态(Co⁴⁺)下的化学价态分布信息,绿色代表钴酸锂(LiCoO₂)电池颗粒在放电状态(Co³⁺)下的化学价态分布信息。

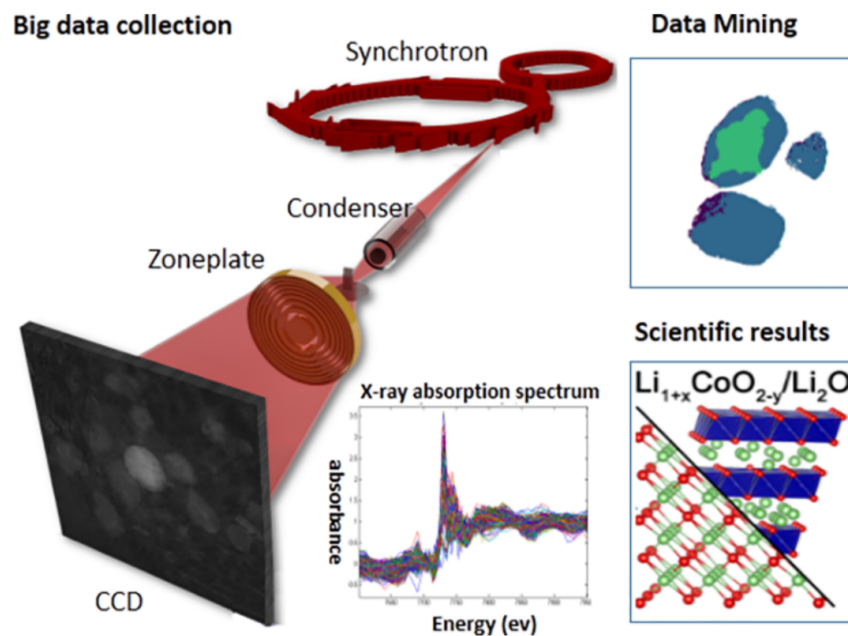


图2. 大数据采集：利用纳米分辨X射线谱学成像技术可以原位、快速的获得海量的样品的结构信息和谱学信息。大数据分析：通过对X射线近边吸收谱进行特征提取，再利用多种数据聚类算法，实现了对海量X射线近边吸收谱的快速分析和识别。研究结果：观测到了Co离子溶解和金属Co重新沉积以及局部过渡嵌锂导致材料失效的现象



中国科学院高能物理研究所 备案序号：京ICP备05002790-1号 文保网备案号：110402500050
地址：北京市918信箱 邮编：100049 电话：86-10-88235008 Email: ihp@ihp.ac.cn

