催化诱导硫化锂的电子结构转变研究取得新进展

2022-07-27 | 文章来源：先进炭材料研究部 【大 中 小】【打印】【关闭】

锂硫电池具有能量密度高（2600 Wh kg^{-1}）、硫单质成本低廉和环境友好等优势，在替代锂离子电池的新一代电化学储能体系中极具竞争力。硫正极的容量发挥与复杂的“固-液-固”多步反应动力学紧密相关，尤其是硫化锂的沉积/解离过程，贡献了锂硫电池正极充放电容量的四分之三，是影响性能的重要过程。然而，硫化锂的绝缘性导致了电化学过程需要克服较高反应活化能；电化学过程中硫化锂形成是平面生长，造成了电极表面的快速钝化，从而导致硫化锂的沉积/解离过程，动力学缓慢和效率低。近年来，过渡金属基催化剂用于硫正极可有效降低反应能垒，促进电荷转移，提高活性物质的利用率，但放电过程中，产物硫化锂会覆盖催化位点，降低后续反应的电催化活性。电池体系中催化剂诱导的反应物（产物）的导电属性变化对性能的影响，尚未得到充分的认识和研究。

近日，中国科学院金属研究所科研人员在前期高效锂硫电池催化剂研究的基础上（Nat. Commun. 2017, 8, 14627; J. Energy Chem. 2021, 54, 452; Batteries Supercaps 2022, 5, e202100389），提出了筛选锂硫电池催化剂的新策略。通过诱导吸附于催化剂表面的硫化锂的电子结构 “绝缘-金属性”转变，使被硫化锂覆盖的催化位点仍可作为电化学反应的界面，从而实现高的硫化锂沉积/解离效率。通过第一性原理计算（图1），筛选出单原子铜催化剂作为模型催化剂，反应界面快速的电荷转移实现了硫化锂由二维平面生长到三维球状团簇生长的转变（图2）。催化剂诱导的硫化锂电子结构转变使锂硫电池中催化位点的催化效率得到显著提高，在高硫负载下获得了优异的倍率性能和循环性能（图3）。研究成果近期以“Electronic structure adjustment of lithium sulfide by a single-atom copper catalyst toward high-rate lithium-sulfur batteries”为题发表于Energy Storage Materials上。本工作以锂硫电池体系为例，研究了催化剂诱导的电化学反应过程产物电子态变化所带来的影响，为发展复杂反应过程和电池体系的高效电催化剂提供了新的研究思路。

博士研究生肖茹为论文第一作者，于彤博士为共同第一作者，孙振华研究员和李峰研究员为论文的通讯作者。该工作得到了国家重点研发计划、国家自然科学基金、中科院先导专项、兴辽英才计划以及国研中心等相关项目的资助。

全文链接

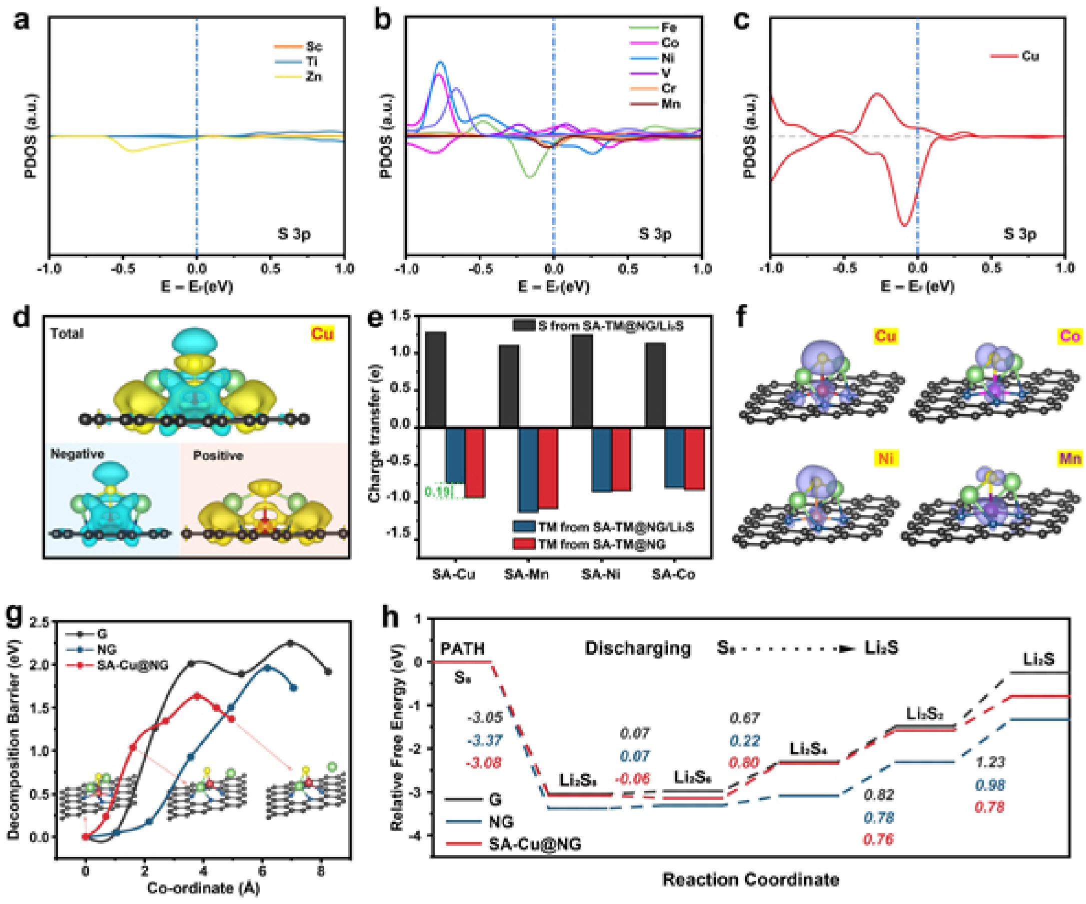

图1. 第一性原理计算吸附于金属单原子催化剂位点的硫化锂的电子结构和反应能垒。

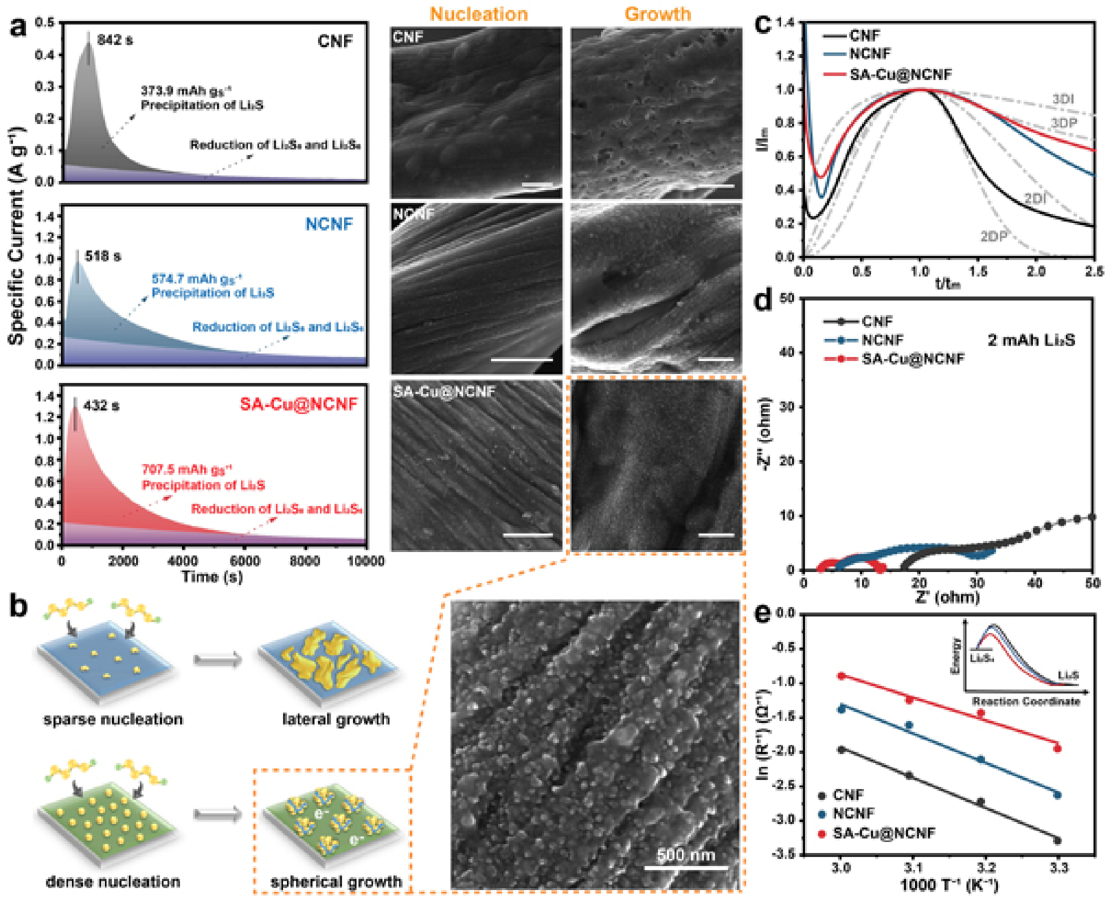

图2. 硫化锂沉积过程分析。

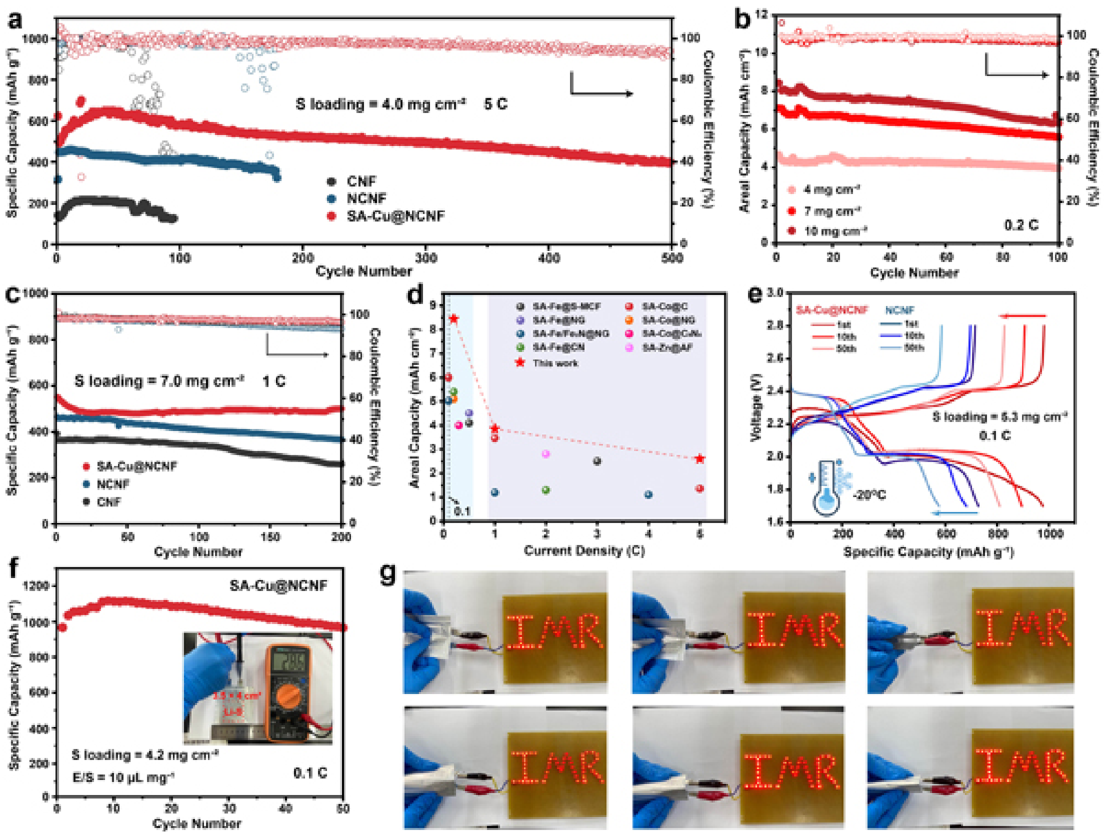

图3. 高硫载量下锂硫电池的循环性能和软包电池展示。

文档附件

相关信息

地址：沈阳市沈河区文化路72号 邮编：110016
运维邮箱：office@imr.ac.cn
中国科学院金属研究所 版权所有 辽ICP备05005387号-1

官方微博 官方微信