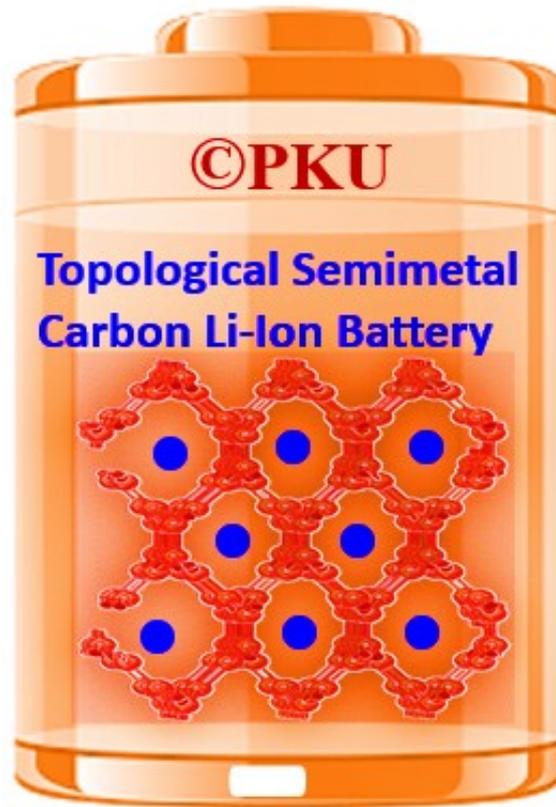


北大工学院在拓扑半金属碳锂离子电池材料研究领域取得新进展



拓扑半金属碳锂离子电池示意图

美国国家科学院院刊PNAS最近刊发了北京大学工学院材料与科学工程系、北京大学应用物理与技术研究中心孙强教授研究组的研究论文“ All Carbon Based Porous Topological Semimetal for Li-ion Battery Anode Material ”，报道了他们在锂离子电池负极材料研究领域的最新成果。

锂离子电池因其较高的功率密度以及成熟的商业化应用在人们日常生活中扮演着重要的角色。但随着科技的发展，特别是电动汽车领域的兴起，现有的锂离子电池越来越难以满足人们对能源存储的要求。锂离子电池主要由正极、负极和电解液三部分构成，负极材料作为电池储锂的主要部分是提高锂离子电池整体性能的关键之一，因此也一直是人们研究的热点。石墨碳材料因有较好的稳定性和低的成本是现有商业锂离子电池广泛采用的负极材料，但其实际容量只有290 ~ 360 mAh/g。虽然这个容量可以基本满足现有电子产品对电池性能的要求，但对于对电池能量密度、倍率性、安全性有更高要求的电动汽车领域，其容量和倍率性能还有很大差距。另一方面，石墨碳材料的容量已经接近理论容量极限372 mAh/g，要进一步提高电池的容量，必须寻找全新的锂离子电池负极材料体系。多孔碳因具有大的比表面积和多的锂离子吸附位点一直是人们寻找高比容量负极材料的热点，但多孔碳储锂也有其固有的缺点：（1）多孔化会在材料中形成大量无序的缺陷，降低材料的导电性，进而影响电池的倍率性能。（2）锂离子在孔洞与电解质的界面处发生大量不可逆反应，造成不可逆的容量损失，导致低的库伦效率，一般的多孔碳材料的库伦效率都低于50%。对于全电池来说，其正极可以携带的锂离子总量是一定的，大的不可逆容量损失是一个致命的缺点。（3）常规的多孔碳中无序的孔洞不利于离子的扩散和电池倍率性能的提高。为了解决上述问题，理想的情况是找到一种三维的碳材料，其既具有有序的纳米通道又具有高的导电性，而拓扑半金属碳材料为此提供了可能性。

拓扑电子学是近年来物理学研究的前沿领域，2016年的诺贝尔物理学奖也授予了在此方向上作出开创性贡献的三位物理学家。拓扑半金属材料在费米面处具有线性的能带色散关系，电子的有效质量为零，具有极高的电子迁移率。而且这种线性的能带色散关系是由材料的整体结构决定的，是受对称性保护的。这就为寻找具有高的导电性的三维多孔碳负极材料提供了可能性。基于此，孙强课题组对最近被理论所预言的三维拓扑半金属碳bco-C16作为锂离子电池负极材料的可能性进行了系统的研究。基于第一性原理的计算表明，锂离子可以在bco-C16中可逆的脱嵌，其理论比容量为558 mAh/g (Li-C4)，远高于商业化的石墨负极材料 (Li-C6)。由于bco-C16具有一维的纳米通道，锂离子的扩散呈现明显的一维特征，随着锂离子的嵌入，其扩散能垒由0.53 eV降低至0.019

eV，而且这种一维的锂离子扩散特征在很大的拉伸和压缩形变下仍会保持。计算的平均开路电压为0.23 V，脱嵌锂的过程中bco-C16体积变化与石墨相当。上述结果表明，拓扑半金属的多孔碳bco-C16负极与石墨碳相比具有更高的比容量、高的倍率性能、低的电极电位和很好的循环稳定性，因而具有很好的应用前景。

拓扑电子态和锂离子电池是当今科学技术研究的两大热点。该研究用拓扑半金属的碳材料做锂电池的负极很自然地在这两个领域之间架起了桥梁，这不仅为设计高性能的锂离子电池指出了新的方向，而且更拓宽了拓扑电子态研究的应用领域。

该论文的第一和第二作者分别是博士研究生刘俊义和汪硕，通讯作者为孙强教授。该研究得到了国家重点研发计划“新能源汽车”专项和国家自然科学基金委项目的资助。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/103802.html>