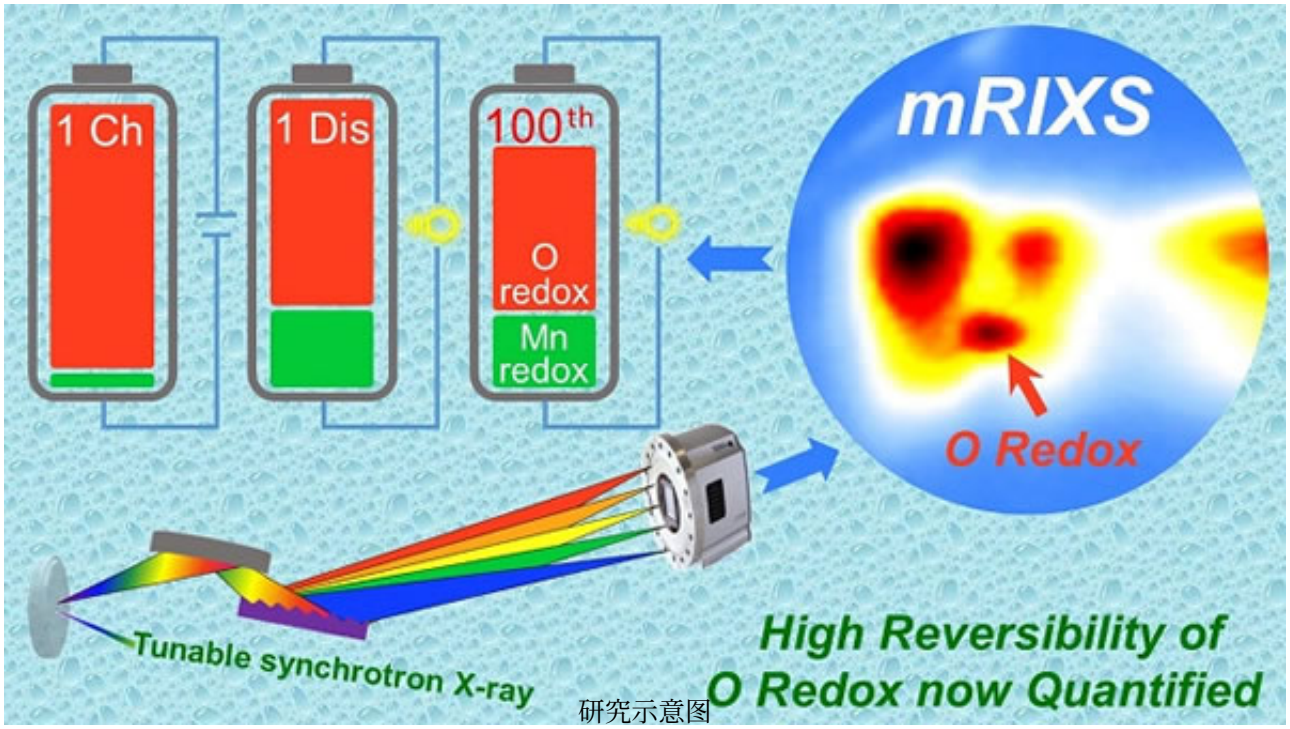
东北大学在影响高容量锂/钠离子电池正极材料循环寿命的关键问题上取得重要理论突破

东北大学冶金学院代克化副教授与美国劳伦斯伯克利国家实验室的杨万里研究员、刘杲研究员等来自十几个单位的研究人员合作，在影响高容量锂/钠离子电池正极材料循环寿命的关键问题上取得重要理论突破。12月12日，该项成果在线发表在国际顶级期刊Cell的姊妹刊Joule上，题为High Reversibility of Lattice Oxygen Redox Quantified by Direct BulkProbes of both Anionic and Cationic Redox Reactions (DOI:10.1016/j.joule.2018.11.014)，东北大学为论文第一单位。这一研究将为人们进一步开发高容量、长寿命的新型二次电池正极材料提供方向性理论依据。



研究示意图

据悉，当前，人们迫切希望可充电电池具有更高容量、更长寿命和更低成本。在锂离子电池和新兴的钠离子电池的主要组成部分中，以过渡金属氧化物为主的正极材料是提高能量密度的主要制约因素。因此，如何提高正极材料的容量是当今科学界、产业界和全社会共同关注的焦点。

在电池充放电过程中，随着电流的发生，电池内部也在发生得失电子的氧化还原反应，这些反应是影响电池容量的关键，传统的正极材料，只有金属离子发生这样的反应。近些年的研究则发现，设计新的材料，激活其中的氧元素发生化学反应可以额外获得一倍以上的容量，从而有望大幅提高电池的能量密度。

但是这种新的化学反应上空还漂浮着一朵致命的“乌云”，这就是反应的可逆性。反应必须高度可逆，电池才能在大幅提高容量的同时拥有长寿命。此前一些研究学者认为只有昂贵的钌、铱等元素氧化物才可以实现氧的可逆反应，这就必然大幅度提高电池成本；还有一些学者认为氧反应从根本上难以实现可逆，所以应该抑制它来提高正极材料循环寿命。因此，对低造价（不含四五周期金属元素）过渡金属氧化物中晶格氧的氧化还原反应可逆性的确切、可靠、定量的分析成为当下至关重要的焦点问题。

针对上述迫切的问题，本研究采用世界首个超高效率共振非弹性X射线散射全谱图(mRIXS)实现了晶格氧反应可逆性和循环保持率的可靠定量，以及对于体相金属阳离子反应的直接定量分析。研究通过可靠的定量表征，澄清了之前对第三周期过渡金属氧化物（3d TM-O）中晶格氧反应可逆性的模糊认识，表明在廉价的3d TM-O中实现高度可逆且稳定循环的晶格氧反应是可行的。这样，在关键的“十字路口”上，本研究为继续发展和改进高容量电池正极材料指出了正确可行的方向，具有极为重要的理论和现实意义。

原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/132916.html