

上海硅酸盐所在金属氟/硫基电池的界面催化和限域研究中取得进展

随着储能需求日益增长，基于嵌入机制的锂离子电池难以满足诸如电动汽车和智能电网等长续航和大规模储能体系的性能要求。转换型氟/硫基正极通过活性中心的多电子转移反应，能够冲破单电子嵌入化学的束缚，具备实现高比容量和高能量密度储能的潜质，例如：Li-FeF₃和Li-FeS₂的理论值可分别达712和894 mAh/g；1950和1671 Wh/kg。然而，氟/硫基正极的持久可逆转换反应受到反应动力学迟缓和空间限域困难的阻碍。

近日，中国科学院上海硅酸盐研究所研究员李驰麟团队联合中国工程物理研究院研究员崔艳华团队，提出界面氟化的策略，分别实现LiF和多硫物质的高效转换。

含内置锂源的LiF与低价态金属氧化物（或金属氟化物或过渡金属单质）复合正极可通过自驱动转换反应实现高比容量的输出，但LiF的充分裂解通常需要匹配高充电电位（4.5 – 5.0

V），从而导致电

池的能量效率严重受损（<80%）。

为此，研究人员首次采用尖晶石型结构的NiFe₂O₄

作为双活性中心宿主，通过脉冲激光沉

积技术制备高氟化界面丰度的LiF/NiFe₂O₄

纳米薄膜正极。广泛分布的三维LiF/NiFe₂O₄

界面网络能够提供充足的氧化还原反应位点，

加速LiF裂解/重构和NiFe₂O₄

氟化/脱氟的反应动力学。因此，该含锂氟基正极在低充电截止电压（4.2V）下即可实现充分的锂氟转换反应（赝电容储能贡献超过90%），在兼顾大比容量（~237mAh/g）和高能量效率（~88%）的同时，其优异的循环稳定性和倍率性能也处于已报道的预锂化氟基正极的最高水平。

高催化活性NiFe₂O₄宿主材料匹配足量的氟化界面是开发商用LiF基预锂化转换正极的重要策略。相关研究成果以Low-Overpotential LiF Splitting in Lithiated Fluoride Conversion Cathode Catalyzed by Spinel Oxide为题，发表在Advanced Functional Materials上。

多硫组分的空间限域和催化激活问题阻碍着高比容量/能量密度硫系正极的深化应用。围绕该问题，科研人员提出Fe-S结构核心和氟化表面的新型组合构型，以实现FeS₂@S双活性相正极的高效限域和转换。S-S组分和亲硫Fe-S结构核心之间的紧致贴合可增强内置吸附催化效应，而疏硫的氟化表面能够进一步抑制多硫活性物质的界面溶出。此外，导电FeS₂

晶粒的紧致堆垛配合氟化碳层的交联包裹强化了电子/离子传输网络的空间渗透性和连续性。亲硫/疏硫紧致构型的调制助力了S-

S组分的空间限域和反应动力学

的升级，促进了双活性相的协同转换反应，赋予了FeS₂@S正极的高可逆比容量（储锂和储钠分别可达1000

mAh/g和600 mAh/g）和稳定长循环（1 C倍率下储锂循环700圈和储钠循环1000圈后的比容量仍可分别保持在800

mAh/g和370 mAh/g，对应的正极能量密度分别可达1200 Wh/kg和480 Wh/kg）。这种用于保证S-

S组分可持续高效利用的新型正极构型为转换型硫系金属电池的发展提供了一种可行策略。该成果以Tight bonding and high-efficiency utilization of S-S moieties to enable ultra-stable and high-capacity alkali-metal conversion

batteries为题，发表在Journal of Materials Chemistry A上。

相关研究工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金、上海市科技创新行动计划等的支持。

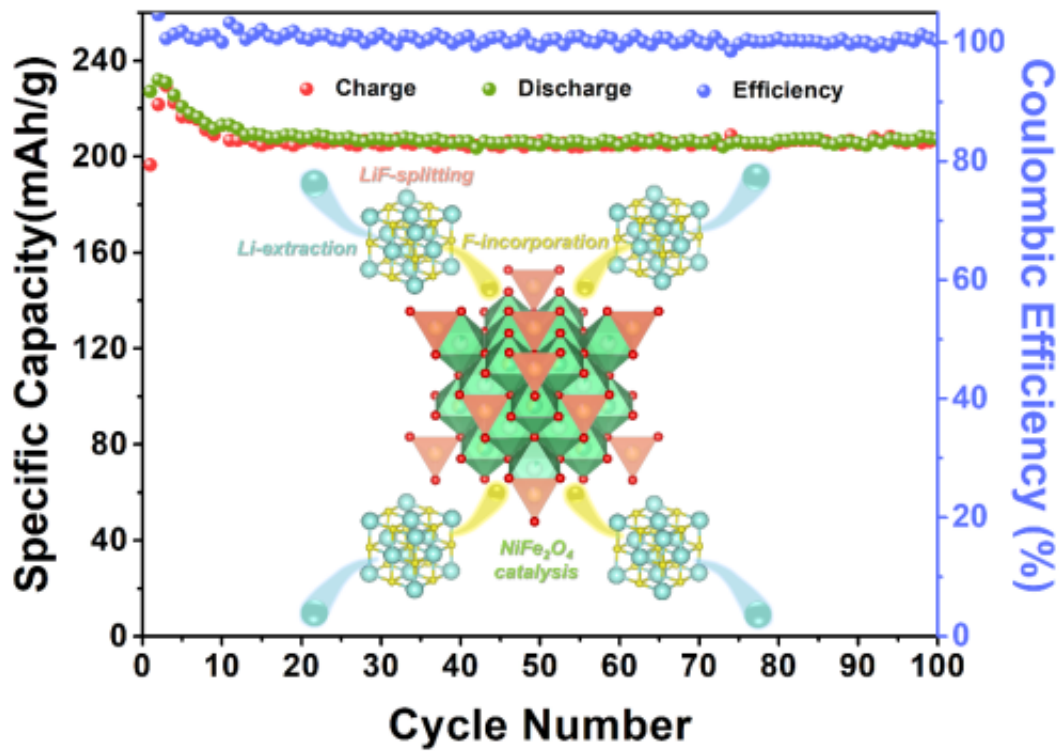


图1.尖晶石结构NiFe₂O₄催化LiF高效裂解以助力持久高效转换的氟基正极

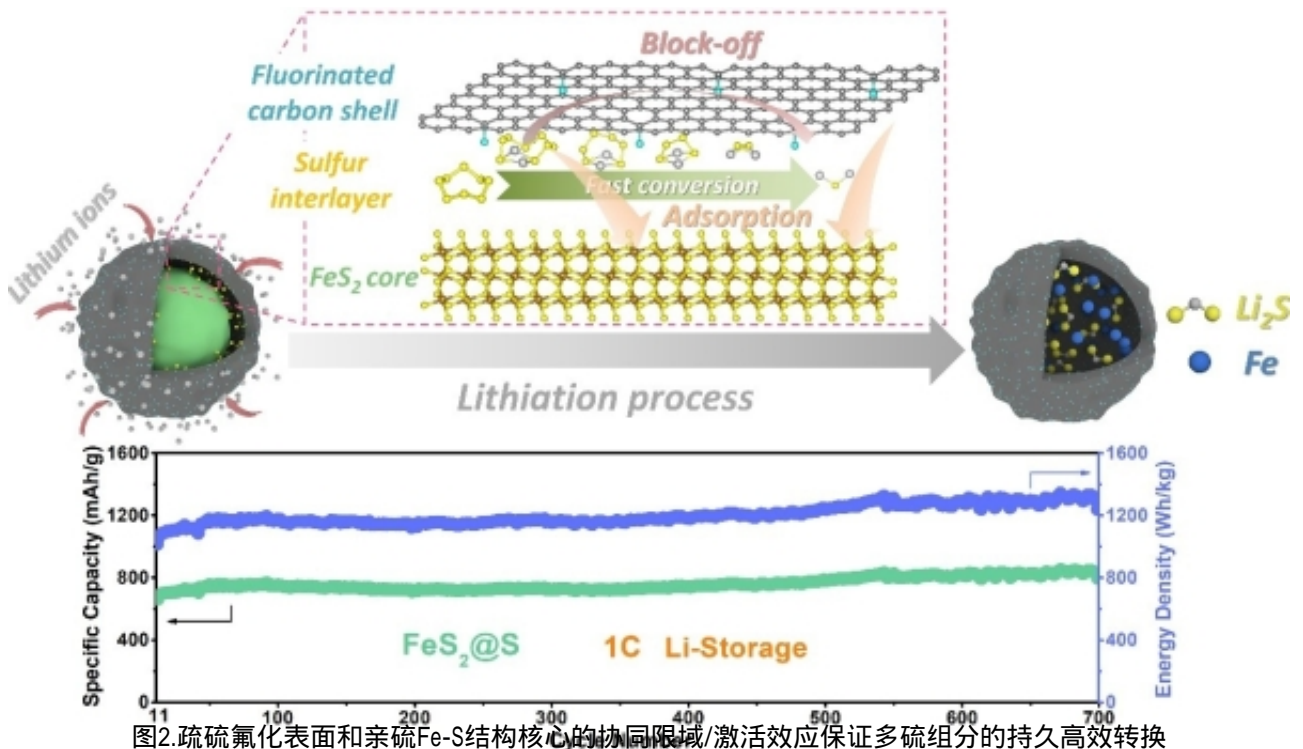


图2.疏氟化表面和亲硫Fe-S结构核心的协同限域/激活效应保证多硫组分的持久高效转换

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/171189.html>