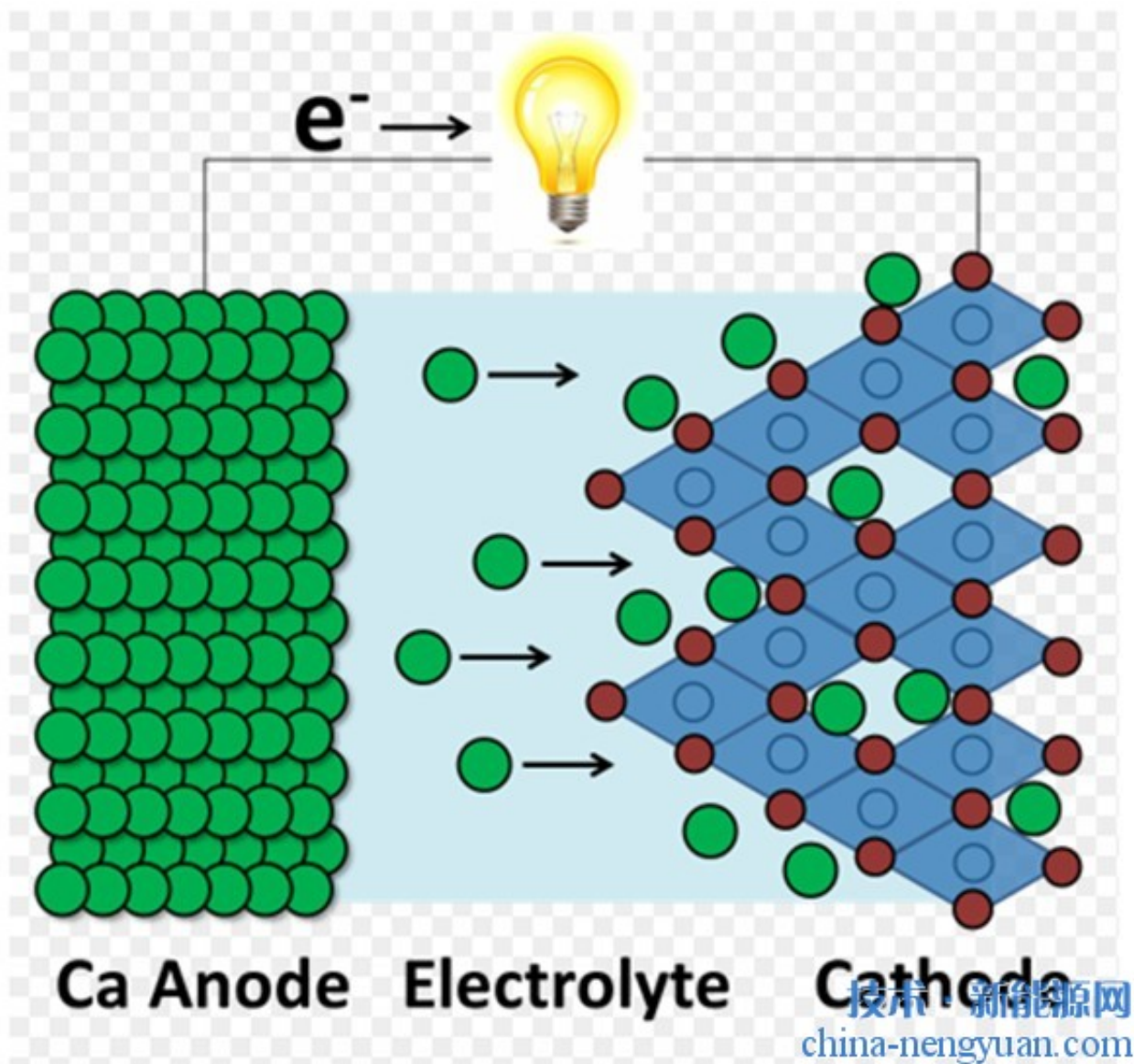


超越锂：寻找钙离子电池



科学家们通过量子力学模拟，试图确定一类有前途的材料，制造用于超越锂的新型可充电电池。

锂的稀缺性促使科学家们寻找其他碱金属来生产可充电电池。在最近的一项研究中，韩国中央大学的助理教授Haesun Park及其同事对各种钙(Ca)基正极材料进行了计算模拟。他们的发现将有助于指导未来的实验工作并加速新电池的开发，为电动汽车的广泛采用铺平道路。

电动汽车是未来；它们将有助于减少空气污染并结束我们对化石燃料的依赖。然而，这种潜在的颠覆性技术存在一个明显的问题：是否有足够的锂(Li)来生产所有这些汽车电池。我们目前拥有的最好的可充电电池是基于锂的化学反应。不幸的是，锂在地球上并不丰富，其储量仅占地壳的0.002%。一旦电动汽车变得更加普及，对锂的需求将开始超过供应。

解决这个难题的

一个可能方法是设计一种新型电池，

这种电池依赖于更丰富的碱金属而不是锂。

在可以替代锂的几种候选材料中，钙(Ca)作为可充电电池的有前途的金属脱颖而出。Ca不仅比Li丰富10000倍，而且理论上也可以产生类似的电池性能。

然而，钙基电池的发展仍然存在一些主要障碍，其中之一是缺乏对以可逆钙正极（负极）材料的了解。

为了帮助确定钙电池的最佳候选正极材料，韩国中央大学的助理教授Haesun Park及其同事采用了系统工程的方法。通过运行基于密度泛函理论(DFT)的高通量量子力学模拟，该团队预测了Ca和过渡金属氧化物的各种层状材料的电池相关特性。

这项工作的大部分是在阿贡国家实验室和美国能源部支持的储能研究联合中心(JCESR)项目中进行的。“钙电池研究是JCESR正在进行的主要工作之一。” Park教授说。“阿贡和JCESR项目的稳定支持使我们能够一心研究钙离子电池。” 相关论文于2021年11月6日在线提供，并于2021年12月23日发表在Advanced Energy Materials第11卷第48期。

科学家们考虑了七种过渡金属离子和四种层状结构，总共有28个候选阴极。通过DFT计算，他们评估了许多重要特性，包括它们的热力学稳定性、能量密度、可合成性、Ca迁移率和电子结构。反过来，这使他们能够确定用于开发钙基电池的有前景的材料。

特别是，科学家们将钴(Co)确定作为一种全面的过渡金属，用于层状Ca基阴极，分子式为CaCo₂O₄。此外，他们还表明，在阴极中结合不同的过渡金属可能是改善某些所需特性的可行策略。“我们设法证明，广泛用于锂、钠和钾电池的层状过渡金属氧化物可以成为一类很有前途的钙阴极材料。” Park教授强调说。

“低成本和高性能钙离子电池的成功开发必将有助于传统汽车向电动汽车的过渡，这将在许多方面更加环保。让我们的实验工作能够服务未来的发展”

（原文来自：清洁技术 全球储能网、新能源网综合）

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/178489.html>