

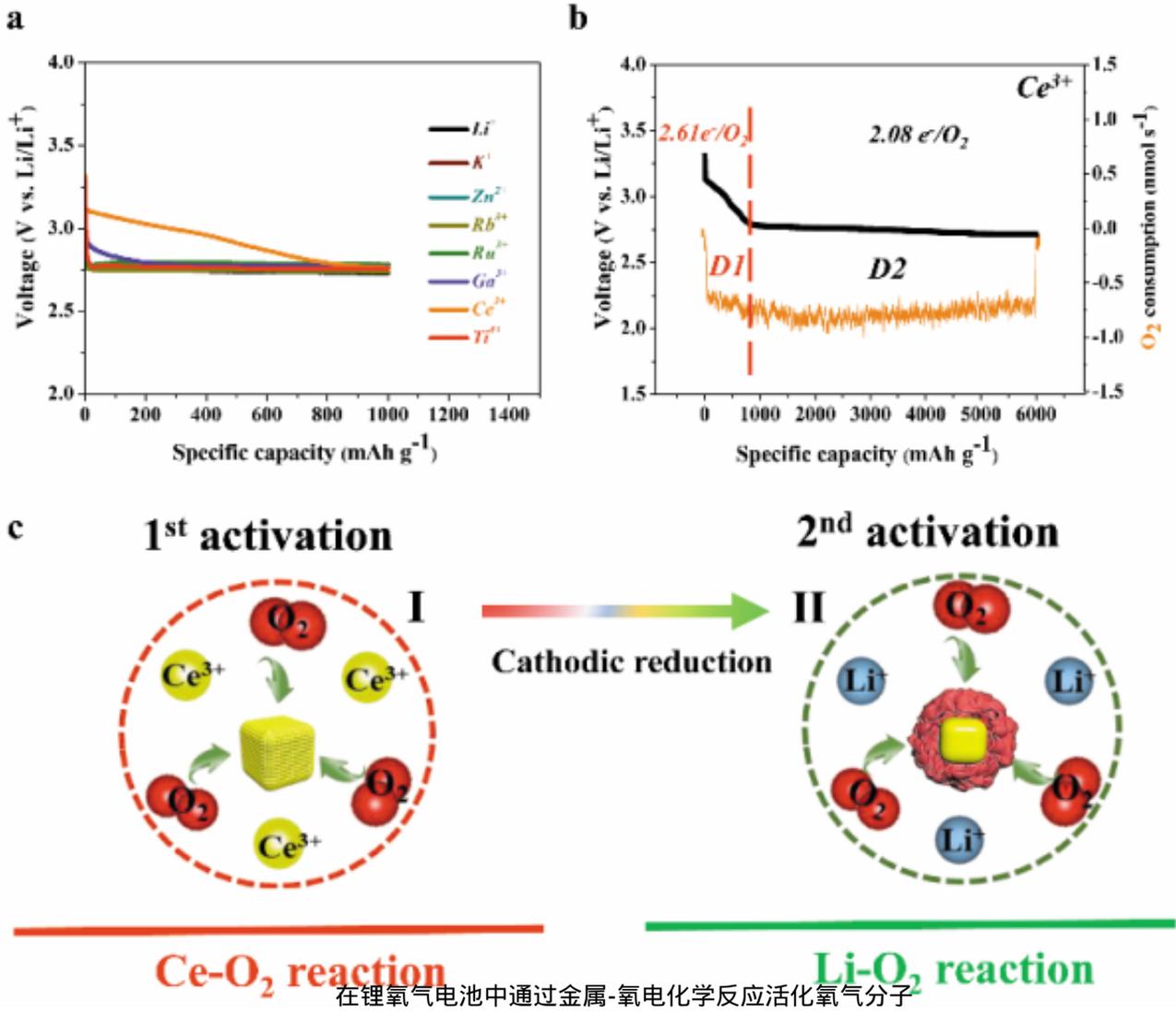
上海硅酸盐所锂氧气电池亚稳态催化剂研究获进展

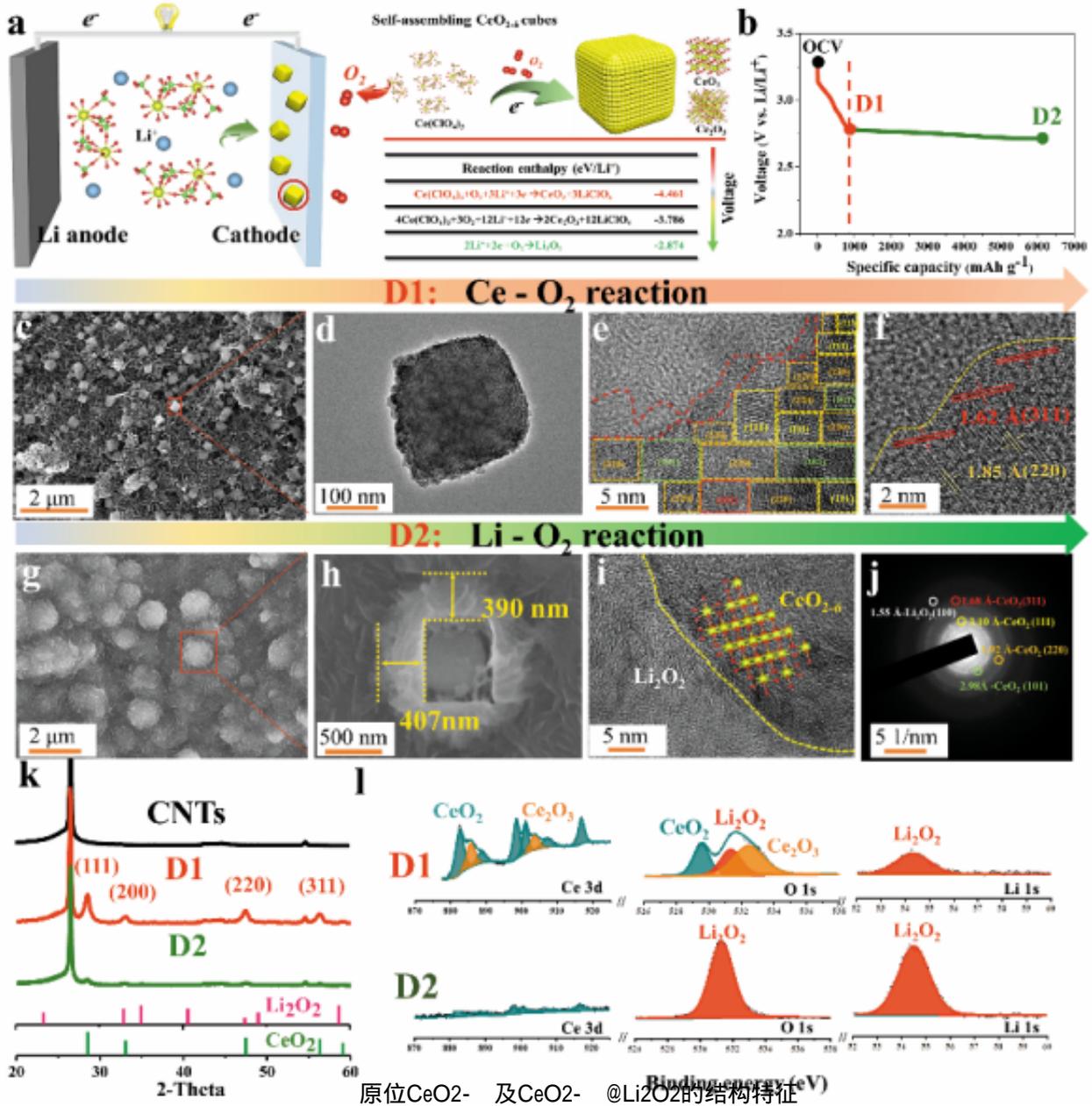
锂氧气电池是利用锂金属和空气中的氧气实现化学能-电能直接转换的清洁储能体系。根据锂金属质量计算的二次锂氧气电池的理论能量密度达 $11400\text{W}\cdot\text{h}/\text{kg}$ ，接近汽油的能量密度（ $13000\text{W}\cdot\text{h}/\text{kg}$ ），这是将其应用于新能源汽车动力电源的研究源动力。如果计入来自空气的反应物氧气的质量，其理论能量密度为 $3505\text{W}\cdot\text{h}/\text{kg}$ （ Li_2O_2 ），能够实现能量密度预计可达 $600\text{W}\cdot\text{h}/\text{kg}$ 以上，应用于新能源汽车可使得一次充电续航里程达到500-800 km，是实现我国提出的新能源汽车动力电池发展目标的重要的电化学储能体系。然而，这种电池体系在较大程度上受到阴极表面电化学反应形成的过氧化锂（ Li_2O_2 ）的限制，导致低实际容量和电池过早失效。

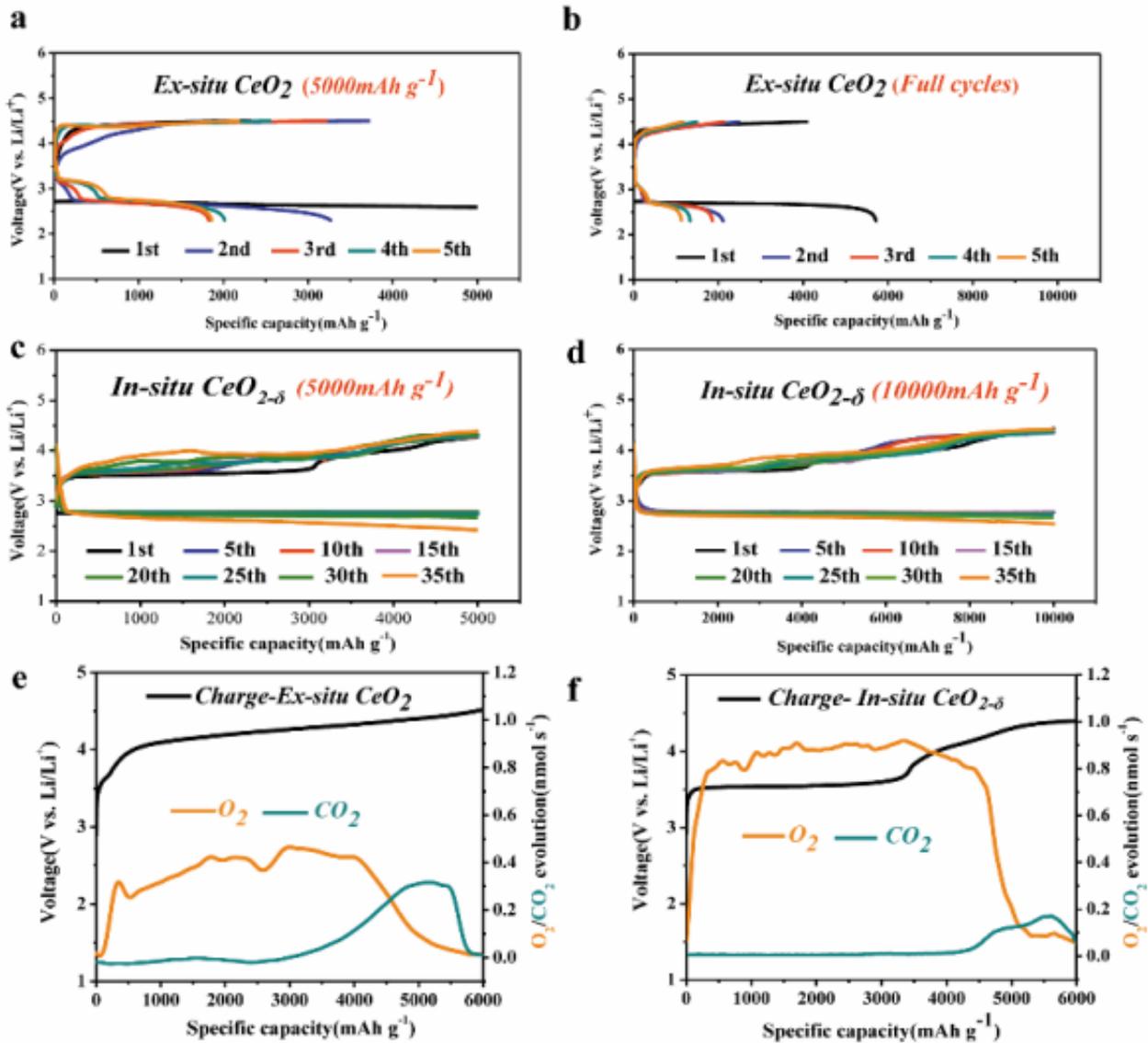
近日，中国科学院上海硅酸盐研究所研究员张涛团队与刘建军团队合作，发表了基于“原位电化学策略”制备具有亚稳态表面层的氧化物催化剂的系列工作。研究经第一性原理计算和电化学实验验证发现，氧气可以通过铈-氧反应与电解质中溶解的铈阳离子结合，形成具有高能亚稳态表面的氧化铈催化剂。这种催化剂表面具有大量不饱和活性位点，且在晶格O和相邻的Ce原子之间架起电子传输桥。这种Ce-O轨道杂化还形成了从 CeO_2 的Ce-4f到 Li_2O_2 的 O^{2-} 的直接电荷转移通道，最终通过随后发生的锂氧反应在亚稳态催化剂表面生长出厚度达亚微米级的 Li_2O_2 壳层。该工作将锂氧气电池的可逆容量从普遍报道的 $1000\text{mAh}/\text{g}$ 提升到 $10000\text{mAh}/\text{g}$ ，且具备良好的循环性能。相关成果以Unlock restricted capacity via O-Ce hybridization for Li-oxygen batteries为题，发表在Advanced Materials上。

“原位电化学策略”是该团队提出的利用锂氧气电池的氧化环境，在电池放电过程中通过高平衡电位的金属-氧气电化学反应制备亚稳态金属氧化物催化剂的方法。通过这一策略制得的氧化物催化剂，一方面可在催化剂表面产生低配位活性位点，提高催化剂的表面催化活性；另一方面可调控催化剂的表面电子结构，增强氧化物催化剂与锂氧产物间的界面电荷转移能力。前期工作提出了可在室温下合成亚稳态氧化镓催化剂的方法，为同时提高锂氧气电池的放电容量和能量效率提供了新思路。相关成果以Partial disproportionation gallium-oxygen reaction boosts lithium-oxygen batteries为题，发表在Energy Storage Materials上，并已申请国家发明专利。

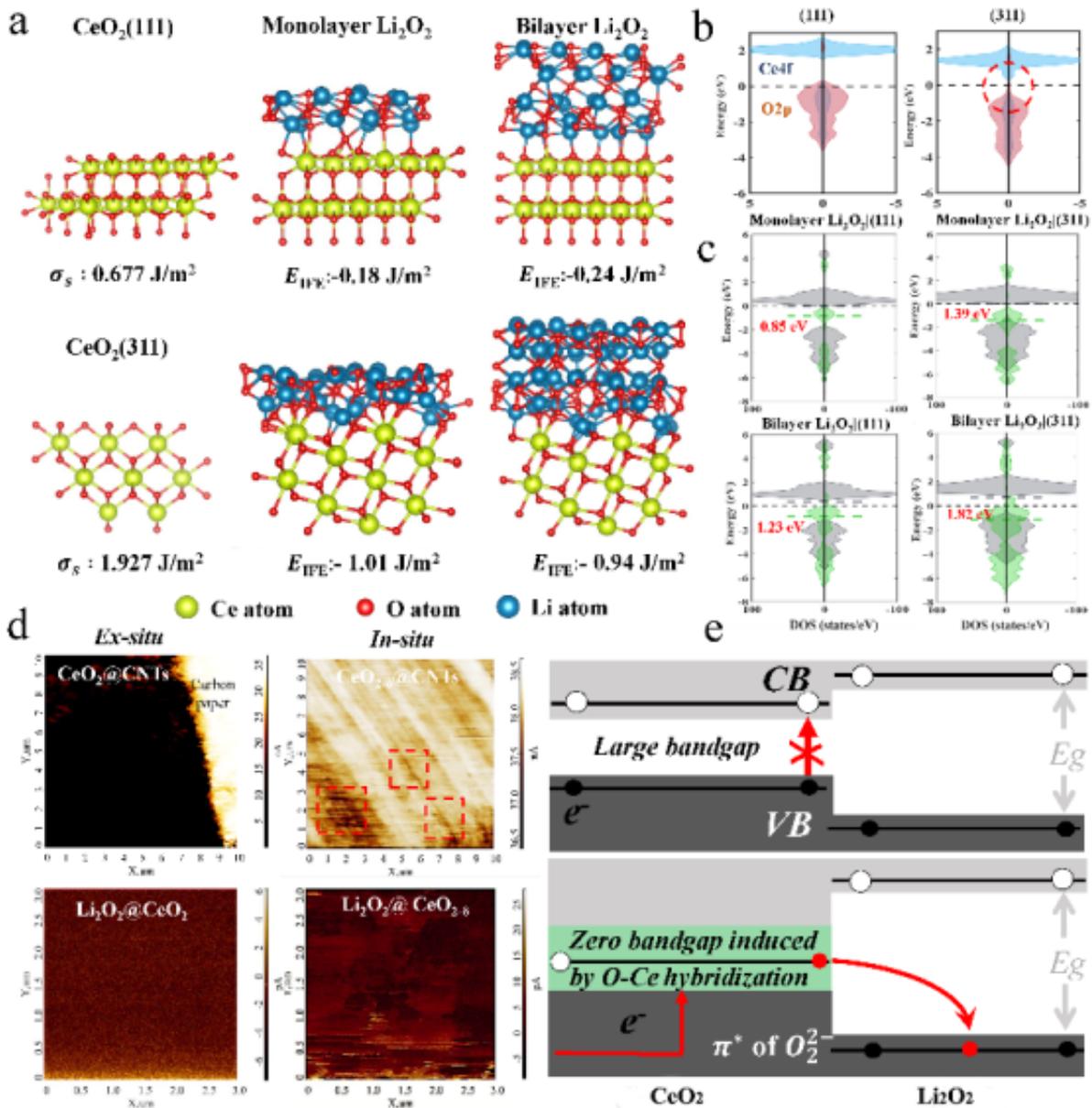
研究工作得到国家自然科学基金、国家高层次人才专项特殊支持计划、上海市科学技术委员会“科技创新行动计划”、高性能陶瓷和超微结构国家重点实验室、山东泰安产业技术创新研究院等的支持。







具有高容量的锂氧气电池的电化学循环性能



第一性原理计算和导电探针原子力显微镜测试

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/193206.html>