

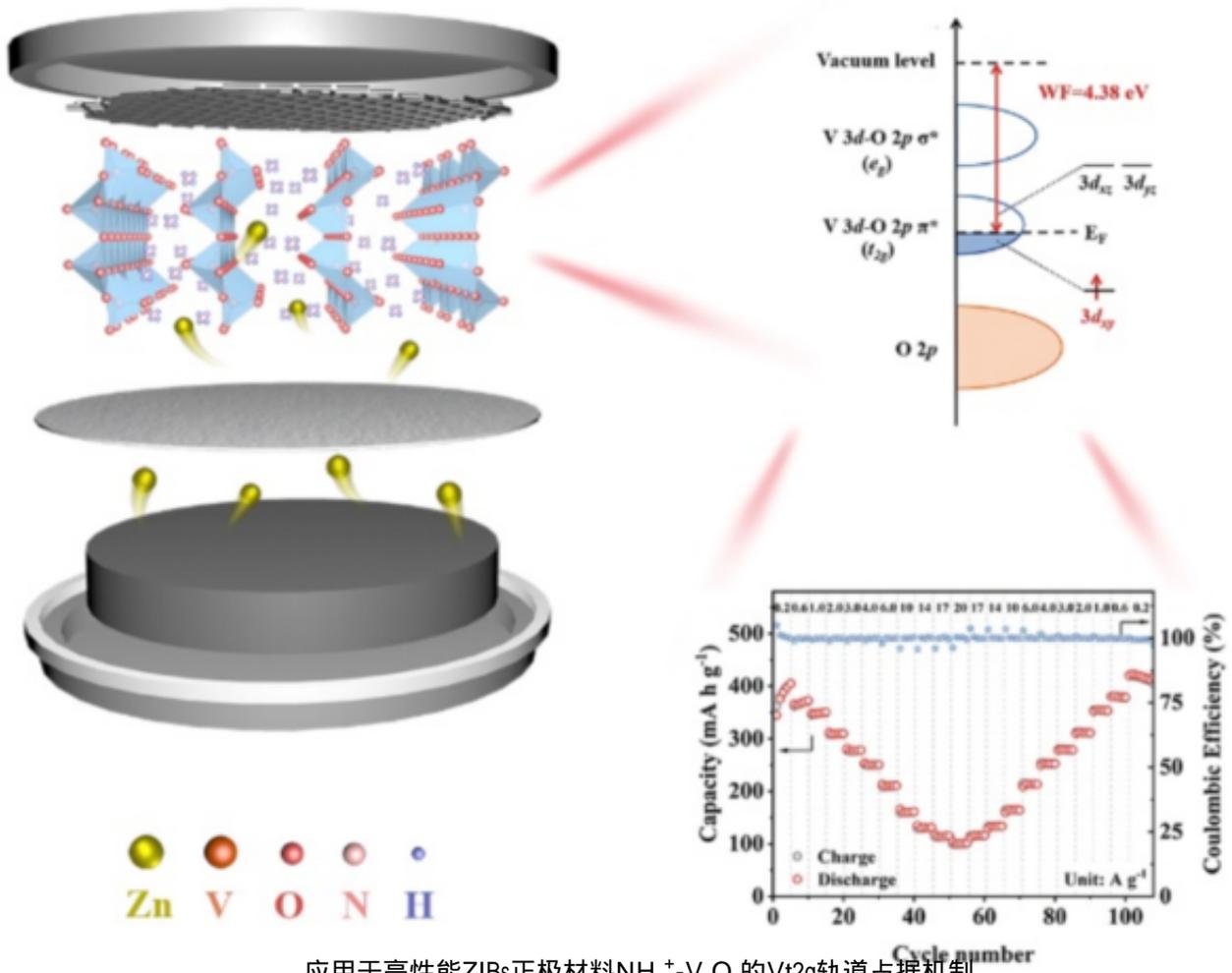
中国科大水系锌离子电池研究取得进展

中国科学技术大学国家同步辐射实验室教授宋礼团队基于插层型锌离子电池正极材料的同步辐射谱学表征，提出了插层剂诱导Vt2g轨道占据的概念，开发了具有快速充电性能的铵根插层五氧化二钒锌离子电池正极材料。相关研究成果以Intercalant-induced Vt2g orbital occupation in vanadium oxide cathode toward fast-charging aqueous zinc-ion batteries为题，发表在《美国国家科学院院刊》(PNAS)上。

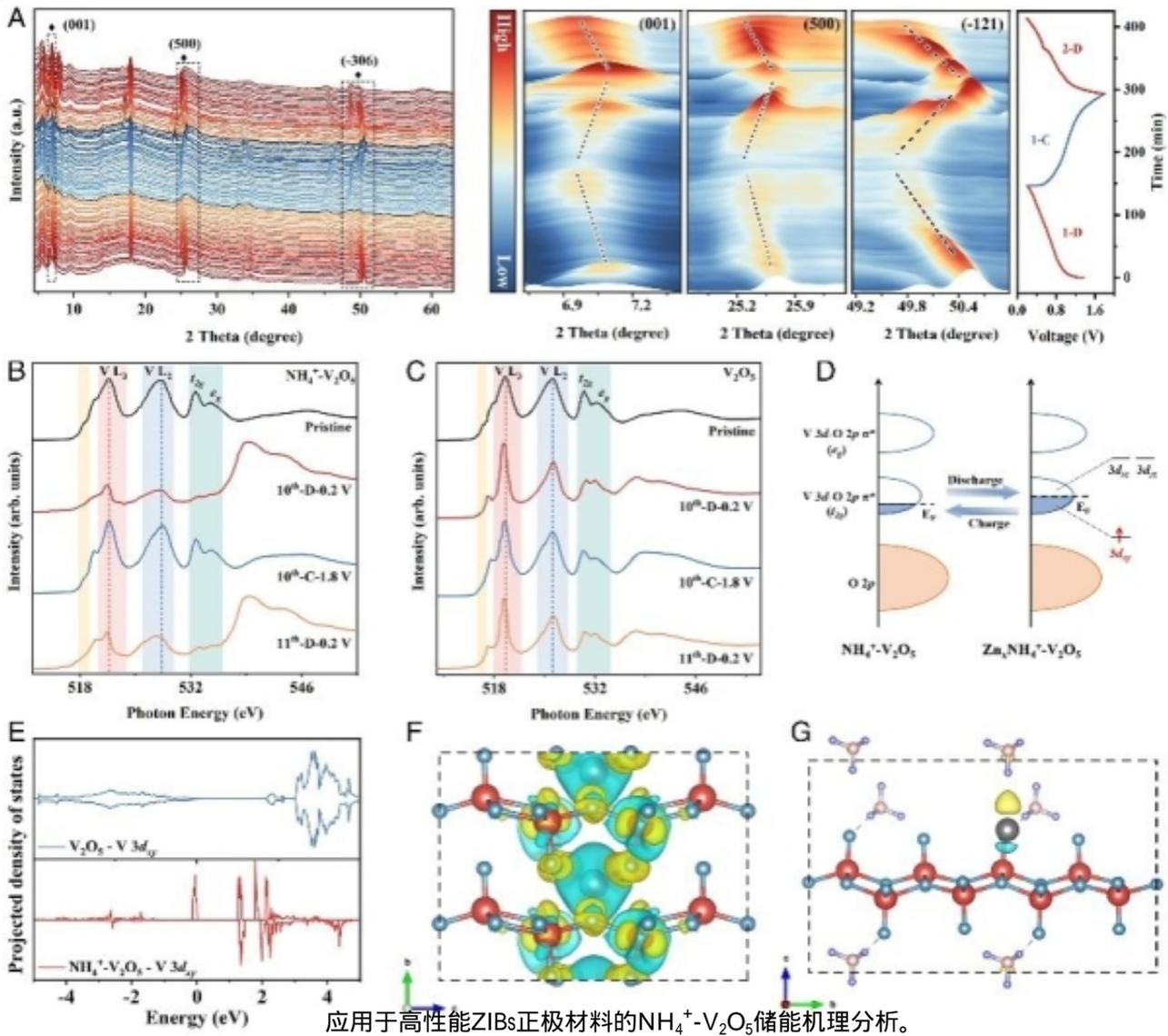
水系锌离子电池(ZIBs)凭借安全、无毒以及较高的理论容量而成为最具潜力的可持续储能技术之一。在众多ZIBs电极材料中，层状钒氧化物具有晶体结构可调、容量高等特点，是现阶段广泛研究的正极材料。基于离子或分子预插层策略可以有效解决正极材料的晶格空间不足和电子导电性低等问题，从而进一步提升电池性能。然而，目前对插层型正极材料的研究聚焦于层间空间膨胀对容量的贡献。因此，发展先进的原位表征技术，从原子轨道方面深入理解由插层剂引起的电极材料内在结构变化是未来高性能正极材料设计和开发的关键。

本工作发挥同步辐射光源的综合性实验平台的优势，结合多种原位与非原位同步辐射谱学实验技术，揭示了铵根离子(NH_4^+)插层后， V_2O_5 中V 3dt2g轨道占据的变化以及充放电过程中的可逆演变规律。研究发现， NH_4^+ 插层在较大程度上诱发了V-O键的结构畸变，进一步导致电子结构的重排，促使Vt2g轨道中3dxy空态的占据。这种Vt2g轨道占据提高了材料的电导率，联合 NH_4^+ 插层后拓宽的层间距，从而显著加速了锌离子(Zn^{2+})的转移，实现了锌离子电池的超高倍率性能。测试结果表明，在电流密度为200 C时，铵根插层五氧化二钒($\text{NH}_4^+-\text{V}_2\text{O}_5$)正极材料的比容量仍维持在 $101.0 \text{ mA h g}^{-1}$ ，且充电时间仅需18 s。该工作从原子轨道方面对插层型 V_2O_5 材料中 Zn^{2+} 储能机制的理解提供了依据，并为高性能锌离子电池在快充储能器件中的应用奠定了基础。

研究工作得到国家自然科学基金、国家重点研发计划、中科院青年创新促进会、中科院国际伙伴计划与合肥综合性国家科学中心能源研究院等的支持。



应用于高性能ZIBs正极材料NH₄⁺-V₂O₅的Vt2g轨道占据机制。



应用于高性能ZIBs正极材料的 $\text{NH}_4^+\text{-V}_2\text{O}_5$ 储能机理分析。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/194529.html>