

中国研究人员发现AsC5是有前途的钠离子电池阳极材料



中国沈阳东北大学的研究人员已经确定了一种新的砷化碳(AsC5)单层，作为钠离子电池(NIBs)的一种有前途的阳极材料。他们的研究成果发表在《电源杂志》上。

在这项工作中，团队进行了无偏第一性原理结构搜索模拟，以寻找具有多种功能优势特性的新型AsC5单层。通过理论模拟，发现AsC5具有能量、力学、动力学和热稳定性，支持实验的可行性。

计算模拟表明，在吸附能为的情况下，单(双层)AsC5对Na的吸附是稳定的。当插入Na原子时，单层(双层)AsC5的金属行为保持不变，确保了良好的电传输。此外，单层(双层)AsC5的Na扩散势垒仅为0.16(0.09)eV，具有快速充放电能力。

单层(双层)AsC5材料比一些已知的二维材料具有更高的比容量，最大可达794.28mA h/g(596.01mA h/g)。AsC5钠化后的小体积波动(1.2%)显示出很强的循环可逆性。因此，这些重要的特性使AsC5成为极有希望的钠离子电池阳极材料的候选人。

研究人员在他们的论文中指出，目前开发可行的钠离子电池的主要研究重点是具有高能量密度、良好稳定性和低扩散屏障的阳极材料。

最初对无机二维材料的兴趣激增，导致了对含有IV(C,Si,Ge,Sn)和V(N,P,As,Sb)元素的一类新的二维材料的兴趣。

石墨烯和砷这两类重要的二维材料，由于砷和石墨烯分别具有非平面的sp³键和sp²键，因此具有不同的结构和有趣的特性。因此，证明是否有可能制造出稳定的砷化碳单层，以补充砷和石墨烯的特性是有意义的。鉴于碳材料具有优异的导电性和稳定性，研究人员在这项工作中主要关注富含碳(C)的AsC5组合物。

(原文来自：全球能源 全球储能网、新能源网综合)

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/198634.html>