

化学所在新型高比能锂-硫电池研究方面取得突破

在国家自然科学基金委、科技部和中国科学院等支持下，中科院化学所分子纳米结构与纳米技术院重点实验室的研究人员，在解决高比能锂-硫电池中多硫离子的溶出问题，提高锂-硫电池循环寿命方面取得重要突破。研究结果发表在近期J. Am. Chem. Soc.(2012, 134, 18510 – 18513)上，并被美国化学会（ACS）的Chemical & Engineering News以《可持续的高能量电池》（High-Energy Battery Built To Last）为题进行了评述和报道。

锂-硫电池是指采用单质硫（或含硫化物）为正极，金属锂为负极，通过硫与锂之间的化学反应实现化学能和电能间相互转换的一类金属锂二次电池。无论作为正极材料的单质硫还是作为负极材料的金属锂，均具有很高的理论比容量，从而使整个电池的理论比能量高达2600Wh/kg，是现有锂离子电池的五倍以上。然而，受限于硫及其放电产物硫化锂（Li₂S）的绝缘特性，以及充放电过程中形成的一系列多硫化锂中间产物易溶于电解液的缺点，锂-硫电池的硫正极活性差、利用率低、循环性能也很差，严重影响电池的性能发挥和实际应用，是亟待解决的难题。

中科院化学所分子纳米结构与纳米技术院重点实验室的科研人员认识到单质硫主要以环状S₈形式存在，而这些易溶性多硫离子（Li₂S₈、Li₂S₆、Li₂S₄等）主要产生于S₈与S₄²⁻之间的转变过程中。他们联合博世亚太地区科技研究中心的科研人员一起从硫分子结构设计出发，提出通过构筑链状小硫分子（S₂₋₄）从根本上解决这一多硫离子溶出问题的思想，并通过纳米孔道的空间限域效应实现了非常规、亚稳态小硫分子的筛选和稳定化（图1）。

他们首先合成出具有特定孔尺寸（0.5nm）的微孔碳基底，然后再负载硫。由于纳米孔道空间的限制，在引入硫的过程中即可实现从S₈分子到小硫分子的转化，制备出非常规小硫分子/碳复合正极材料。他们与中科院物理所科研人员合作，通过球差校正透射电子显微镜等先进表征手段并结合理论计算，证明硫在这种纳米孔道内的存在形式不是通常的环状S₈分子，而是链状的小硫分子S₂₋₄。

研究发现，这种链状小硫分子S₂₋₄在嵌/脱锂过程中表现出与环状S₈分子截然不同的电化学行为，在充放电过程中不会再形成溶解性多硫离子（Li₂S₈、Li₂S₆、Li₂S₄），从而从根本上彻底解决了传统硫正极材料由于多硫离子溶出导致循环性能差的难题。同时，由于硫颗粒的尺寸已降至分子级，使硫的电化学活性显著提高。这种基于纳米孔道限域效应的非常规硫分子/碳复合正极材料在锂-硫电池中表现出很高的比容量、优异的循环稳定性及高倍率性能。以硫质量计算的首圈放电容量达1670mAh/g，接近硫的理论容量（1675mAh/g），200圈循环后仍有1150mAh/g。空间限域的链状小硫分子及其特殊电化学性质的发现，对于根本解决硫正极的多硫离子溶出问题，开发高性能锂-硫电池具有重要意义。相关结果已申请三项PCT国际专利。

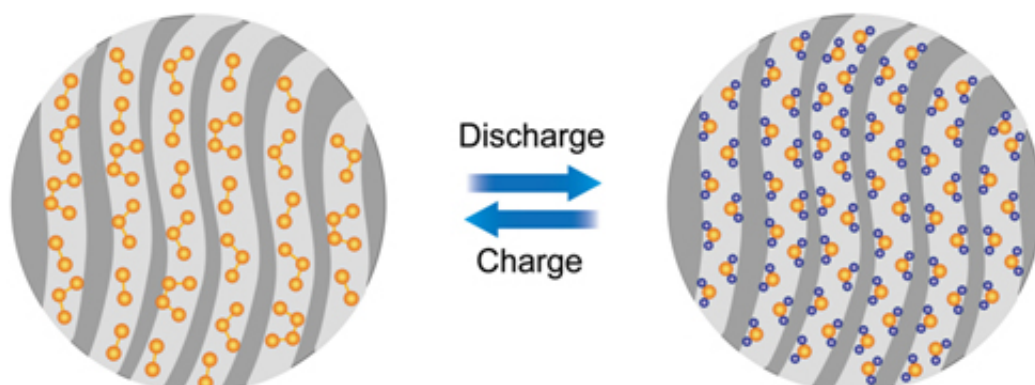


图1 纳米孔道受限的小硫分子/用于高性能锂-硫电池正极材料的示意图。

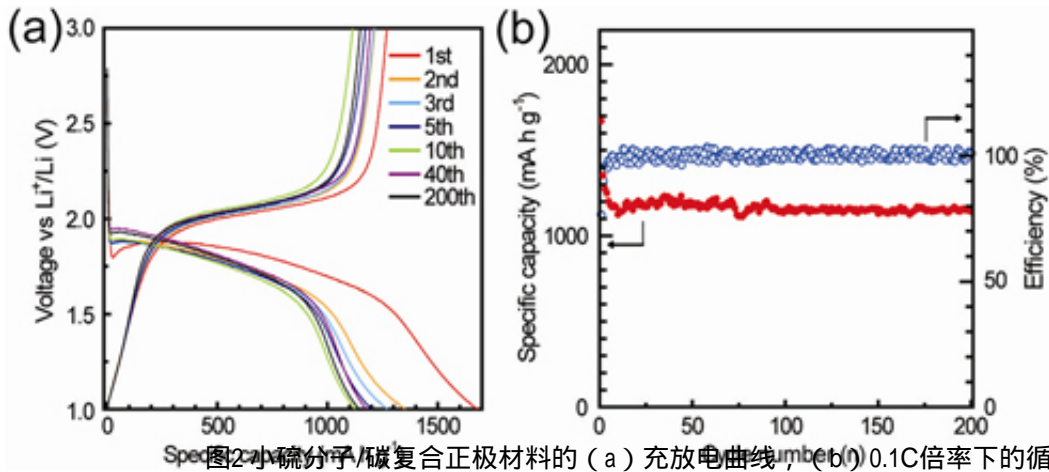


图2. 小硫分子/碳复合正极材料的 (a) 充放电曲线, (b) 0.1C倍率下的循环性能。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/41540.html>