

---

# 中科院过程所发现锂硫电池催化剂设计新规律

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/18816.html>

**本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！**

中科院过程所发现锂硫电池催化剂设计新规律。北京时间2022年6月16日，中国科学院过程工程研究所的张会刚研究员与美国阿贡国家实验室陆俊教授团队合作在Nature Catalysis上发表了一篇题为Cation-doped ZnS catalysts for polysulfide conversion in lithium – sulfur batteries的研究成果。

该成果报道了如何调节多硫离子吸附来设计高效锂硫电池催化剂的规律，多硫离子吸附与催化活性之间的火山型关系被实验和理论计算加以验证，为理解原子和分子水平的催化过程和设计更高效的锂硫催化剂提供了一个理性方案。论文通讯作者是张会刚、陆俊；第一作者是沈子涵。

锂硫电池具有超高的理论能量密度（ $2600 \text{ Wh kg}^{-1}$ ），且资源丰富、成本低廉和环境友好，被认为是一种极具潜力的下一代储能电池。然而，其实际应用一直受到反应动力学缓慢和中间物种多硫离子穿梭效应的影响，导致活性物质利用率低和容量快速衰减等问题。高效的锂硫催化剂能够增强对多硫离子的吸附和催化转化，有效抑制穿梭效应，是锂硫电池领域的研究重点和难点。为了设计高效的锂硫催化剂，国内外开展了大量的研究工作，提出了很多有效的催化剂设计思路，尽管这些工作在提高催化剂活性，改善电池性能方面取得了非常不错的效果，但催化机制仍缺乏深入的研究，尤其是原子和分子水平上吸附与催化的内在关联，这限制了锂硫催化剂的高效设计和改性。

在这项工作中，张会刚研究员团队基于课题组d带调控锂硫催化剂的设计思路（ACS nano 2020, 14, 6673-6682；Adv. Funct. Mater. 2020, 30, 1906661），通过一系列3d金属掺杂ZnS，调整活性位点的d带中心，从而精确调控催化剂对多硫离子的吸附能力。更重要的是，多硫离子吸附与催化活性之间的火山型关系被实验和理论计算加以验证，产生火山规律的根源在于过强的吸附抑制了产物的脱附，由于锂硫电池初始和终态产物是固体，很容易钝化催化剂位点，该研究设计合理实验发现了强吸附导致的钝化现象，从而为理性设计锂硫电池提供了机理性认识。由此开发的 $\text{Co}_{0.12}\text{Zn}_{0.875}\text{S}$ 表现出比简单二元化合物更高的催化活性。

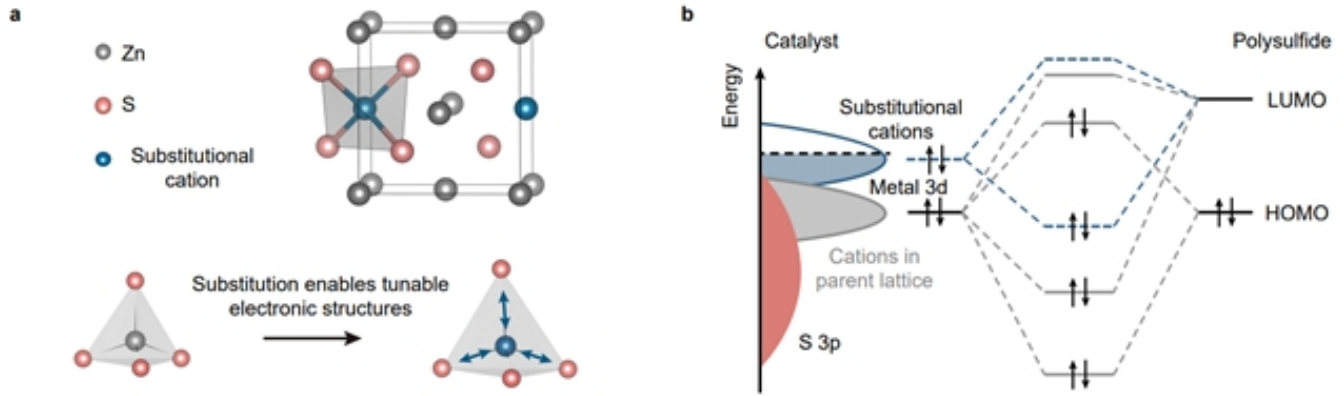


图1：阳离子掺杂及d带调控示意图。

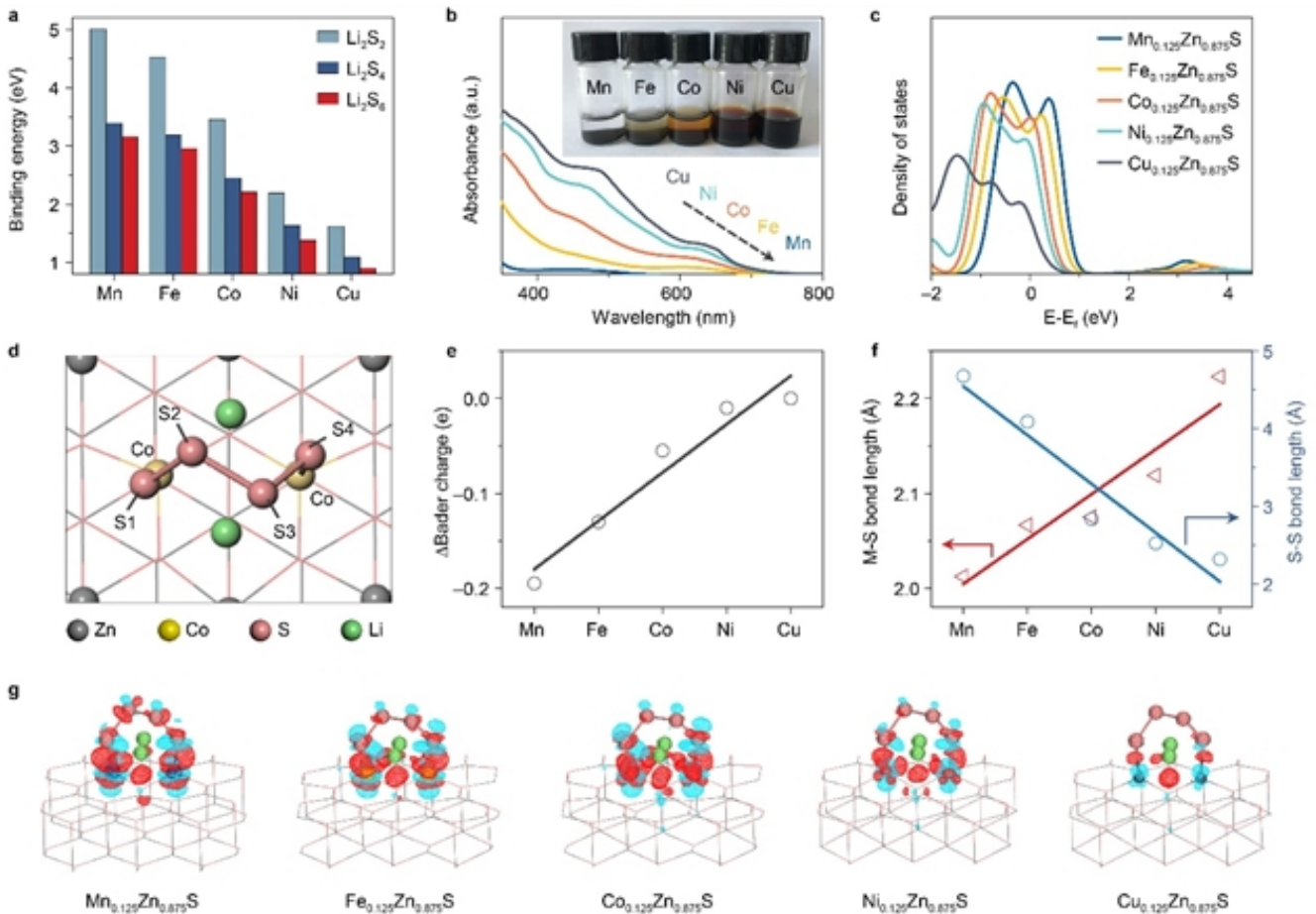


图2：催化过程的机理研究。

通过一系列3d金属掺杂ZnS，能够实现对活性位点d轨道的连续调控，从Cu掺杂到Mn掺杂，d带中心上移，吸附能不断增强。晶体结构分析表明，吸附增强使得金属-硫键变短，硫-硫键被拉长弱化，对应的差分电荷密度图中金属-硫键上产生了更多的电子转移。

对称电池和不同温度下的CV表征催化性能，从Cu掺杂到Mn掺杂，催化性能并没有呈现随吸附增强不断提升的趋势，而是呈现出先升高后下降的火山型规律。当Co掺杂ZnS时，具有最优的催化性能。

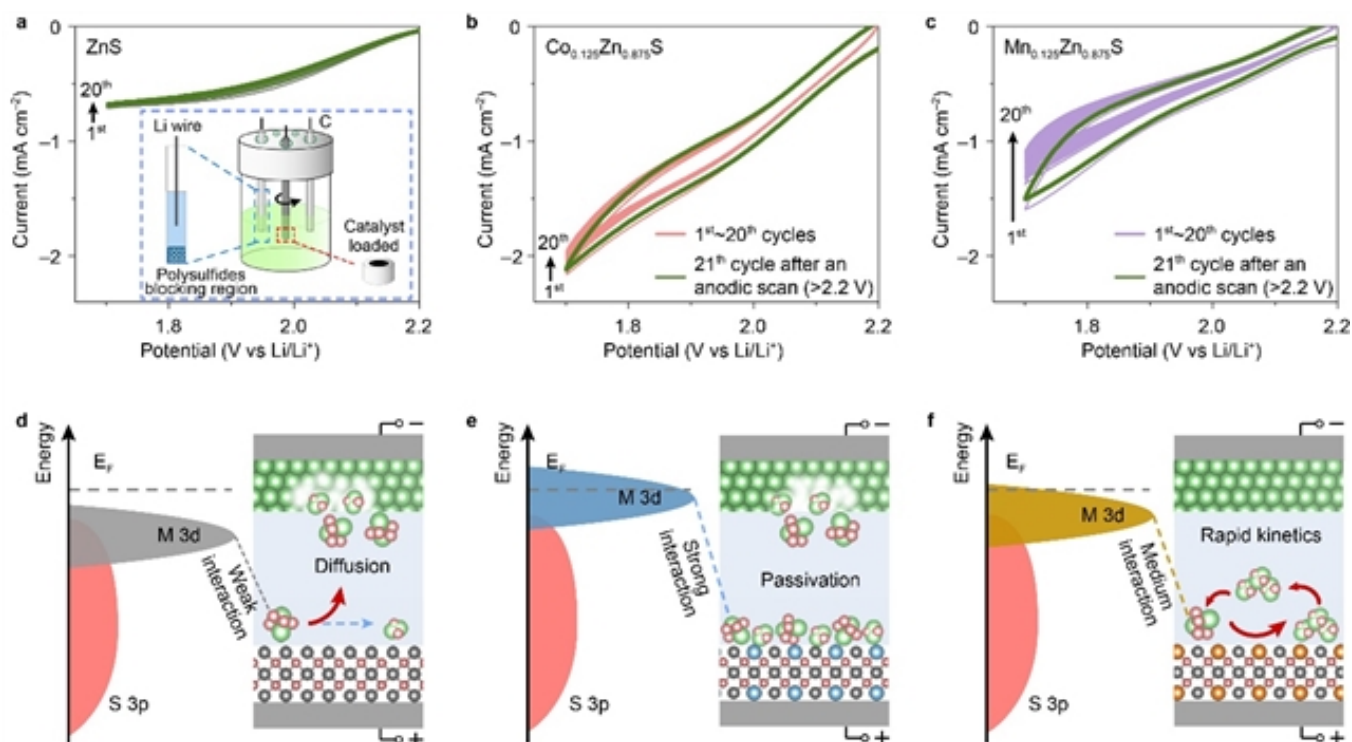


图3：旋转圆盘电极表征催化剂钝化。

为了表征钝化现象，将催化剂负载到高速旋转的圆盘电极上，此时，圆盘电极上的反应产物会被快速地甩到溶液中，而不会影响后续的催化反应。从b图可以看出，当以Co掺杂ZnS作为催化剂时，在第一圈到第二十圈不断地还原过程中，其电流值的衰减很小，而对于Mn掺杂的ZnS而言，从第一圈到第二十圈，电流值不断降低。该钝化实验可以得出结论，对于Mn掺杂ZnS而言，过强的吸附使得催化剂表面的转化产物难以脱附，影响了后续的催化反应，因而，其催化活性随吸附增强而降低。

该研究提供了设计锂硫电池催化剂的理性认识基础，揭示了钝化现象以及强吸附对催化过程的影响，从而解释了计算结果和实验不一致的原因。该工作得到了科技部重点研发大科学装置前沿研究专项（2020YFA0406104）和自然科学基金（22075131）的支持。（来源：科学网）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41929-022-00804-4>

作者：张会刚等 来源：《自然-催化》

---

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发