

---

# 过程工程所在锂硫催化剂结构调控与设计方面获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/21937.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！*

## 过程工程所在锂硫催化剂结构调控与设计方面获进展

。高效的硫正极催化剂可加速多硫离子转化并抑制穿梭效应，对改善锂硫电池性能具有重要作用。中国科学院过程工程研究所资源化工与能源材料研究部研究员朱庆山团队从理论上总结了六方相砷化镍（NiAs）型到正交相磷化锰（MnP）型结构转变所引起的电子结构变化及其对硫正极催化剂活性的影响规律。在此基础上，通过调整配位结构进一步优化金属d轨道与多硫离子的成键作用，研究实现了对锂硫催化剂的精确设计。相关研究成果发表在ACS Nano上。

锂硫电池因超高的理论比容量（ $1675 \text{ mAh g}^{-1}$ ）和能量密度（ $2600 \text{ Wh kg}^{-1}$ ），被认为是下一代储能体系的有力竞争者之一。然而，中间产物多硫离子的溶解扩散导致锂硫电池容量快速衰减，是制约其发展的主要因素，亟需开发有效的催化剂。然而，对催化活性位点以及催化机理认识的不足却阻碍了硫正极催化剂的设计。

NiAs和MnP均是常用的硫正极催化剂构型。研究发现，相比于NiAs型，MnP型的阳离子在垂直于c轴的平面上发生位移后，使得两个共边八面体的中心间距缩短、金属-金属键增强。同时，电子结构随配位环境发生相应变化，金属d轨道的上移或下移将直接影响催化剂和多硫离子的成键作用。研究基于上述规律，通过掺杂硫原子进一步扭曲[CoP<sub>6</sub>]八面体，使中心阳离子发生偏移，导致d<sub>z<sup>2</sup></sub>轨道下移和d<sub>xz</sub>/d<sub>yz</sub>轨道上移，增强与多硫离子的成键作用。面向实用化的高负载锂硫电池，将高效的硫正极催化剂和单质硫电纺封装在多孔碳纳米纤维内部，形成链状结构的纳米反应器，限域多硫离子的转化反应并进行有效催化，表现出优异的电化学性能。

研究工作得到国家重点研发计划“大科学装置前沿研究”专项、国家自然科学基金面上项目和多相复杂系统国家重点实验室的支持。

[论文链接](#)

研究团队单位：过程工程研究所

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