研究定量揭示锂氧气电池质-电耦合机理

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/24860.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！

研究定量揭示锂氧气电池质-电耦合机理。近日，中国科学技术大学工程科学学院特任教授谈鹏团队在《先进能源材料》期刊上发表论文，相关研究工作将提升对于锂氧气电池多孔电极中伴随微观结构变化的电化学与传质耦合机理的科学认识，为新一代电极设计提供指导。

锂氧气电池因极高的理论能量密度而具有极大的发展潜力。过氧化锂作为固体放电产物，一方面堵塞电极孔隙，阻碍低浓度氧气在多孔电极中扩散；另一方面，钝化电极表面，造成电子转移受阻。然而，明确电池失效的根本原因仍具有挑战性。受限于表征技术和均质模型，目前对于多孔电极内部电化学和传质耦合机理还缺乏定量认识。

为排除孔连通和分布不均匀性造成的干扰，研究团队设计并构建一种传输通道阵列排布且定向可控的多孔电极，允许活性物定向传输。因此，通道单元的活性物质传输路径、通量，电化学反应界面和产物储存空间都可以定量。针对通道单元，构建了非均质的三维瞬态模型，以反映整个电极中电势场和浓度场的时空分布细节。

联合实验和仿真结果表明，多孔电极的传输通道尺寸达到临界值（r1和r2，r2> r1）时，将影响锂氧气电池的工作机制：当通道单元内径低于r1时，氧气传输作为电化学性能的主要控制因素，其耗尽导致了低放电容量。当内径处于r1和r2之间时，电子传输的影响逐渐显著，粒径分布发生逆转；氧气侧的局部响应电流受电子传输限制，隔膜侧的局部响应电流受氧气传输限制。当内径超过r2，放电结束时，全电极范围的膜状过氧化锂沉积至极限厚度，电池失效归因于电子转移能力丧失。

此外，该项工作首次定量分析了超氧根的分布和扩散特性。在过氧化锂膜未沉积到极限厚度时，超氧根遵循氧气分布特点，从氧气侧扩散到隔膜侧。当氧气侧的过氧化锂率先达到极限厚度时，超氧根的浓度分布和扩散方向发生逆转，由低氧区向高氧区扩散。

研究人员表示，经过实验验证，相关结论对于无序孔电极具有普适性和启发性意义。对于微孔电极，提升氧气在电解液中的溶解度和扩散速率是强化电化学性能的有效方式；而对于大孔电极，应通过电极修饰、催化剂设计等途径提升过氧化锂膜电导率并降低其沉积率，以缓解固-液界面钝化。（来源：中国科学报 王敏）

相关论文信息：https://doi.org/10.1002/aenm.202302816

作者：谈鹏等 来源：《先进能源材料》

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转发