

---

# 黄镇东教授和Jang-Kyo Kim教授等：强配位相互作用稳定非晶态Sn-Ti-乙二醇化合物的储锂性能

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/25043.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！*

黄镇东教授和Jang-Kyo

Kim教授等：强配位相互作用稳定非晶态Sn-Ti-乙二醇化合物的储锂性能。

1、导读：

Sn-Ti-EG负极材料展现出优异循环稳定性和较高的储锂容量。在1.0 A g<sup>-1</sup>电流密度下循环700圈之后，其仍然能够保持345 mAh g<sup>-1</sup>的容量。这主要得益于Sn-Ti-EG中独特的双金属有机框架结构和结构中存在的Sn/Ti和O之间强烈的配位相互作用有效抑制了电化学原位形成的金属Sn原子的聚聚，有效排除了通常体相Sn负极存在的体积膨胀导致材料粉化的性能失效行为。

全文已在线发表(Online First)，开放获取(Open Access)，免费。欢迎阅读、分享！

---

Citation: Cai Y, Liu H, Li H, et al. Strong coordination interaction in amorphous Sn-Ti-ethylene glycol compound for stable Li-ion storage. *Energy Mater. Devices*, 2023, 1, 9370013.

DOI: <https://doi.org/10.26599/EMD.2023.9370013>

## 2、背景介绍：

目前，相对于理论容量较低的石墨负极材料，Sn-，Bi-和Sb基金属和合金由于其超高的理论容量和体积密度已成为人们关注的焦点。例如，锡金属阳极的理论容量为994mAh g<sup>-1</sup>。然而，由于在充放电过程中与Li的合金化和脱合金化反应导致260%的体积膨胀，锡基阳极材料通常具有较差的循环稳定性，严重阻碍了其商业应用。

为了解决上述问题，科学家们已经探索了包括最小化颗粒尺寸，引入惰性金属，以及与碳材料复合，合理设计结构等无数的策略。虽然这些策略有助于在一定程度上提高速率能力和循环稳定性，但纳米结构锡基阳极的初始库仑效率和能量密度通常较低。金属有机骨架(MOF)是近年来出现的一种新型材料。它们固有的多孔结构不仅提供了大量的活性中心，而且使电解质快速渗透和离子转移。它们可以用简单的方法制备，具有高的可逆容量和良好的循环稳定性，为新型锡基阳极的设计开辟了新的途径。

本文选择价廉易得的乙二醇作为桥接Ti<sup>4+</sup>和Sn<sup>2+</sup>金属离子的有机组分和反应溶剂设计开发了无定形锡-钛-乙二醇(Sn-Ti-EG)双金属有机化合物材料，并以其为LIBs负极材料，研究了其储锂性能。Sn-Ti-EG阳极综合了Ti基材料的稳定结构和良好的循环稳定性，Sn基合金的高理论容量，以及碳材料的高电导率和应力缓冲能力，实现了优良的储锂性能。尤其要指出的是这种理想的电化学性能是在直接使用MOFs作为阳极实现的，而不需要随后的高温烧结，这使得整个制作方法变得简单环保、低成本和可扩展。

## 3、研究方法：

本研究采用非原位的X射线衍射技术、投射电镜技术、红外和同步辐射软X射线吸收近边谱技术(SSRF, BL07U)对Sn-Ti-EG的储锂机理进行了深入研究，揭示Sn和含氧活性基团为其主要的电荷补偿组元。并利用DFT密度泛函理论计算验证了Sn-Ti-EG中金属有机框架结构存在Sn/Ti和O之间强烈的配位相互作用。

## 4、图文解析：

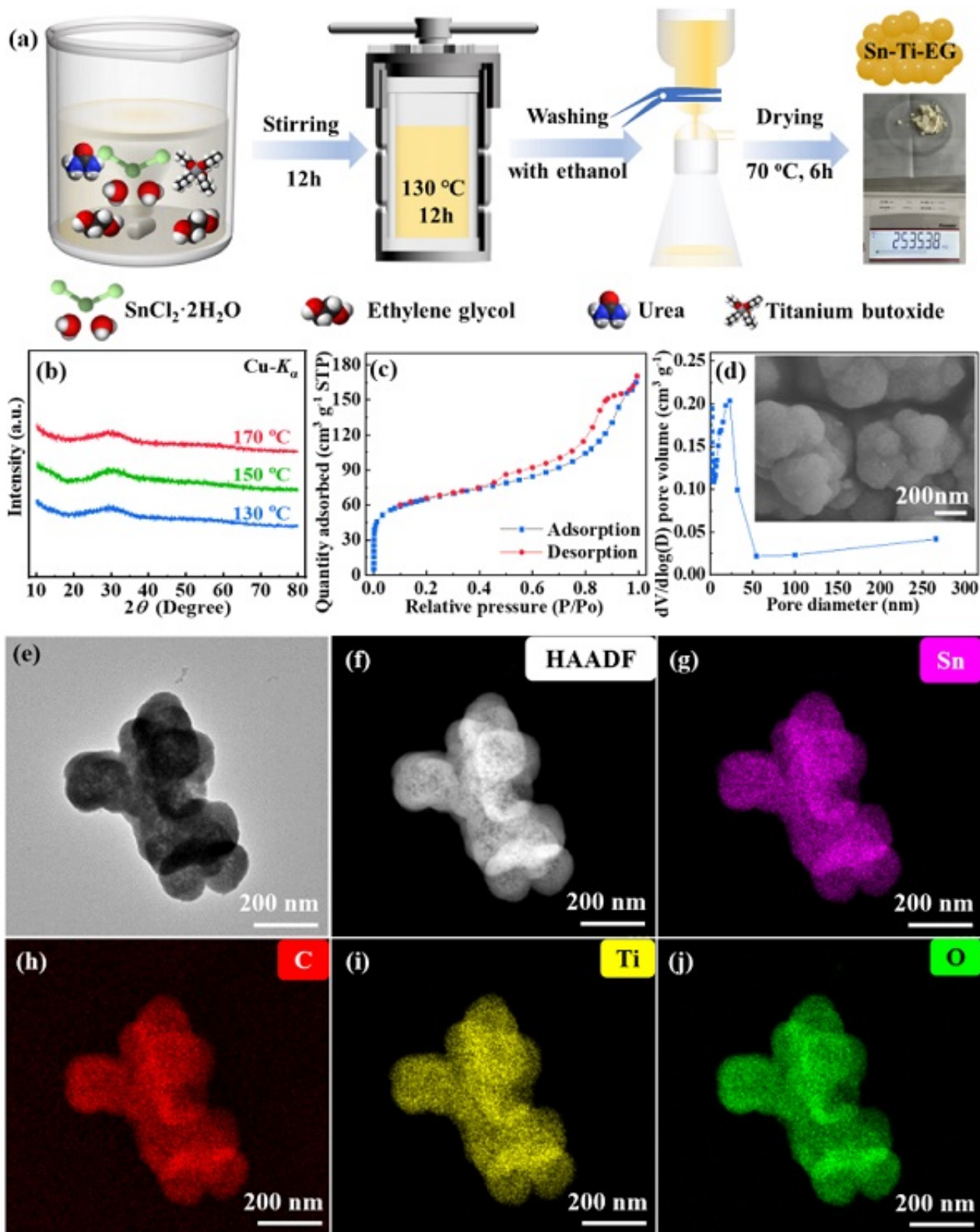


图1 (a) Sn-Ti-EG 合成工艺示意图; (b) Sn-Ti-EG-130, -150, -170的 XRD 图谱; (c) Sn-Ti-EG-150的 N<sub>2</sub>吸附/解吸等温线; (d) Sn-Ti-EG-150的 BJH 孔径分布和 SEM 图像 (插图); (e)明场和(f) Sn-Ti-EG-150的高角环形暗场(HAADF) HR-TEM 图像;从 Sn-Ti-EG-150纳米粒子中获取的 Sn (g), C (h), Ti (i)和 O (j)的元素分布图谱。

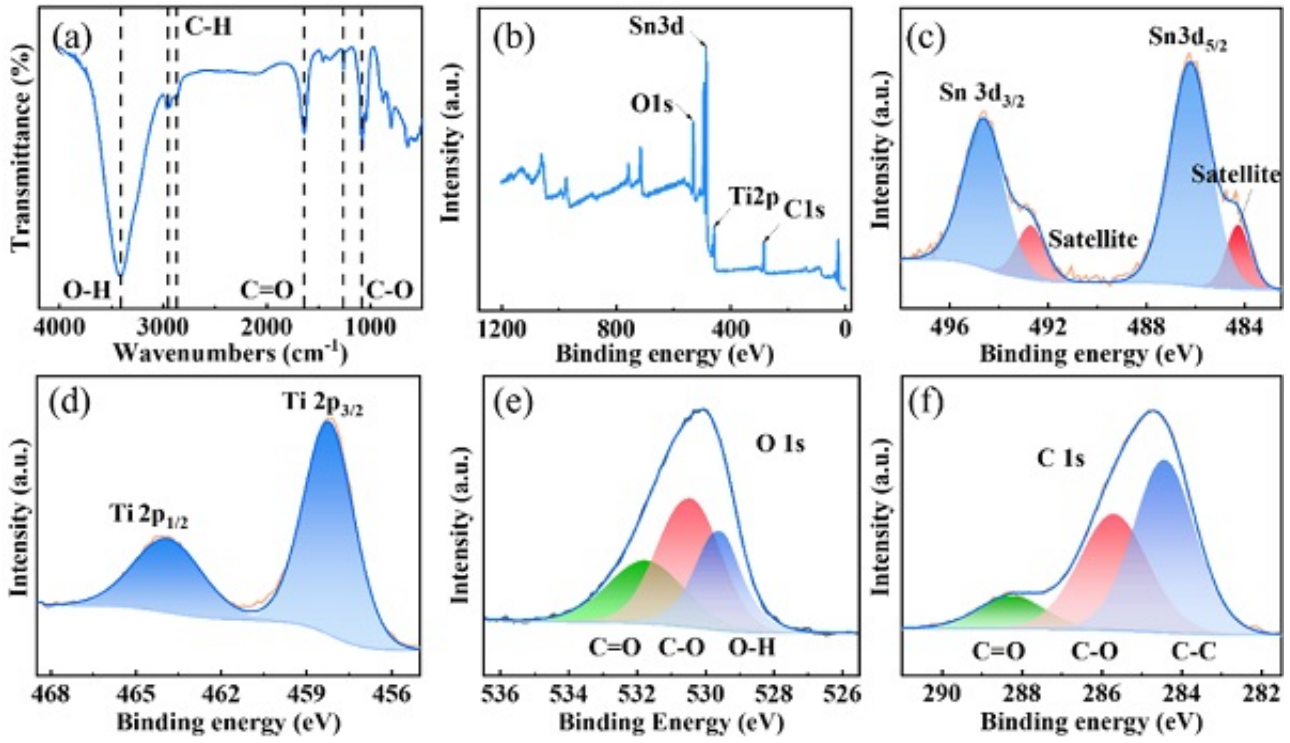


图2 (a) Sn-Ti-EG-150的FTIR谱，(b) XPS谱和(c)-(f) 对应于 Sn，Ti，O，C的高分辨XPS谱。

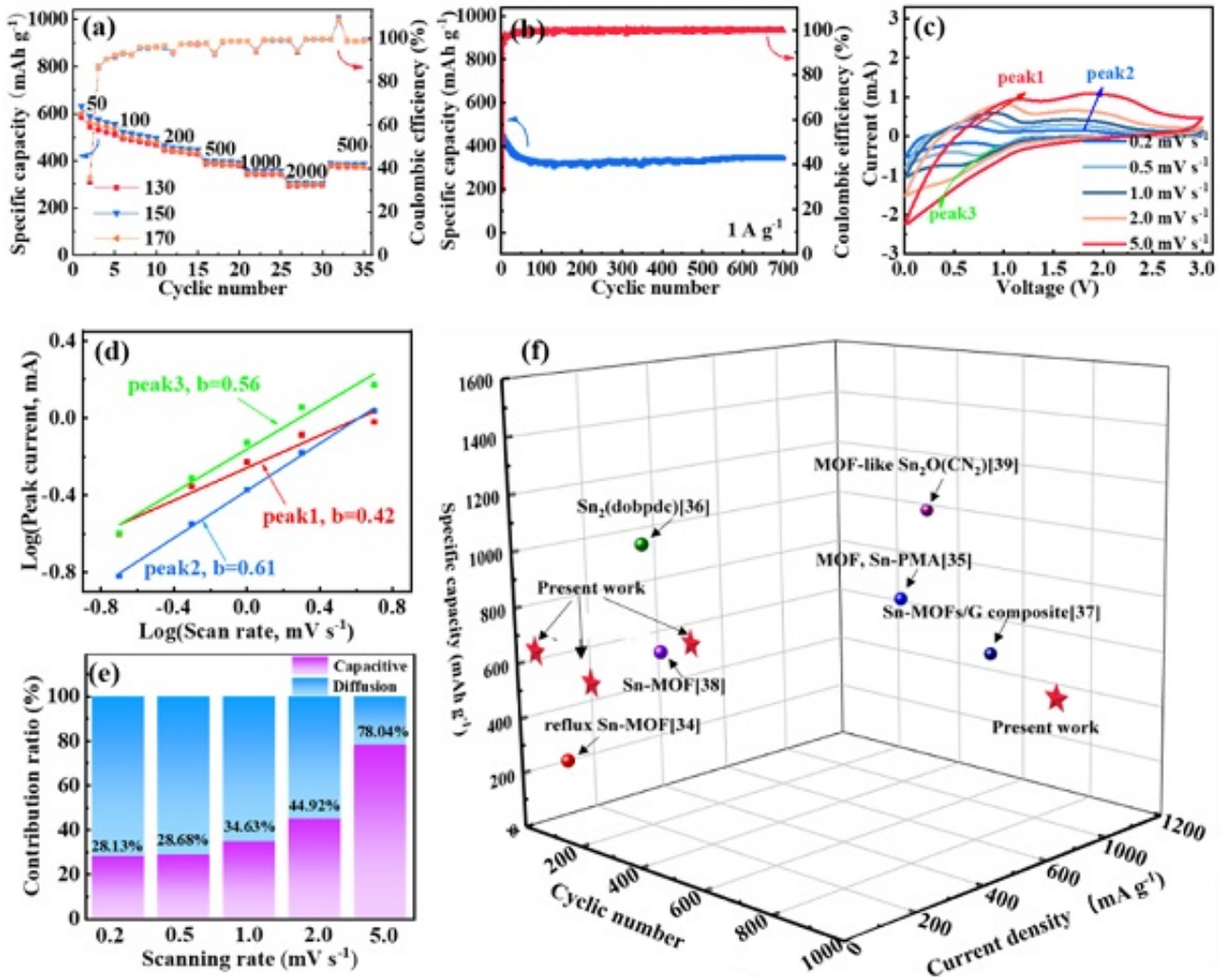


图3 Li//Sn-Ti-EG 半电池的电化学性能: (a) Sn-Ti-EG-130, -150, -170的倍率性能; (b) Sn-Ti-EG-150在 $1 \text{ A g}^{-1}$ 下的循环稳定性; (c) Sn-Ti-EG-150在 $0.2, 0.5, 1, 2, 5 \text{ mV s}^{-1}$ 扫描速率下的 CV 曲线; (d) 来自 CV 的峰值电流与扫描速率之间的对数关系, (e) Sn-Ti-EG-150电极在不同扫描速率下对总容量的电容和扩散贡献; (f) Sn-Ti-EG-150阳极的锂离子储存性能与取自文献[34-39]的其他 Sn 基 MOF 阳极的对比情况。

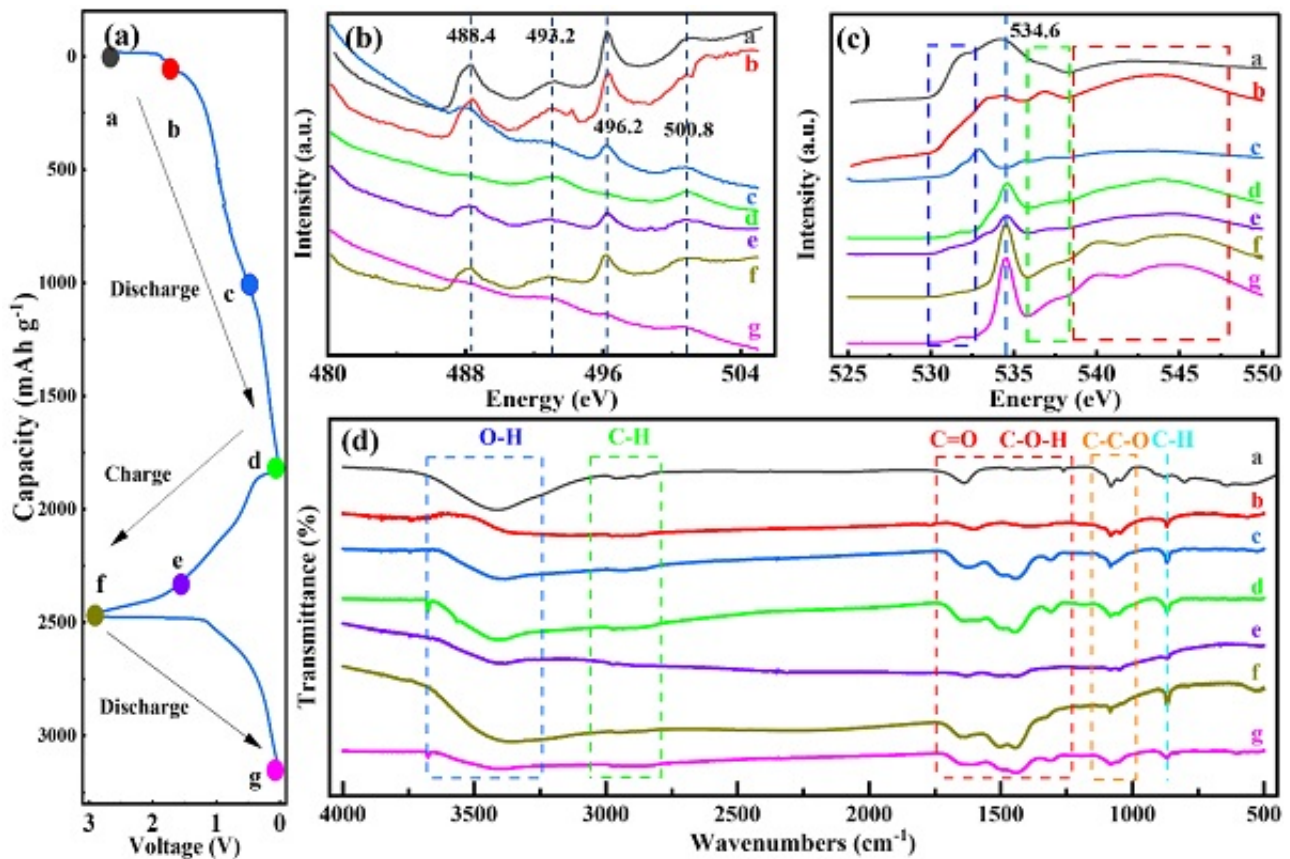


图4 (a) Sn-Ti-EG-150在50 mA g<sup>-1</sup>电流密度下的充电/放电曲线及进行非原位软 X 射线吸收和 FT-IR 分析测试对应的不同荷电状态(a: 3.0 V , b: 1.5 V , c: 0.5 V , d: 0.01 V , e: 1.5 V , f: 3.0 V 和 g: 0.01 V); (b)相应的Sn-Ti-EG-150电极的非原位 SnM5,4-edge , (c) O K-edge sXAS 和(d) FT-IR 谱。

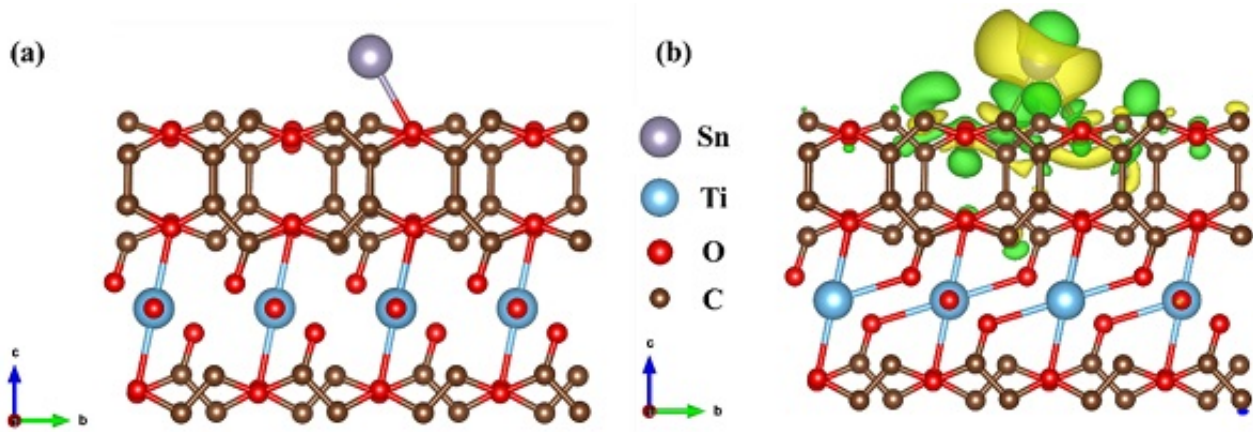


图5。密度泛函理论计算。(a) Sn 原子负载在 Ti-C-O (100)晶面上的优化结构, (b)负载在 Ti-C-O 结构上的 Sn 原子相应的电荷密度差。

## 5、总结与展望：

综上所述，本文研制了一种非晶态双金属有机化合物 Sn-Ti-EG 作为锂离子电池的新型阳极材料。Sn-Ti-EG

---

阳极具有优异的锂离子储存性能，显示出特别显著的长期循环稳定性。从 sXAS、FTIR、XRD、SEM 和 TEM 元素映射分析所得的非原位测试结果表明，锡和含氧有机成分是电极高容量的主要贡献者。在强配位作用约束下原位形成的超细 Sn 团簇有助于缓解大体积变化，从而保持电极的高循环稳定性。密度泛函理论的计算结果也进一步证实了 Sn 原子与 C-O 原子之间存在强的配位相互作用。新型 Sn-Ti-EG-150 电极在电流密度为 50、100、200、500、1000、2000 mA g<sup>-1</sup> 时的放电容量分别为 630.8、522.3、463.8、400.6、347.4 和 308.1 mAh g<sup>-1</sup>。即使在 1.0 A g<sup>-1</sup> 的环境下进行了 700 次循环之后，它仍然保持了 345 mAh g<sup>-1</sup> 的高容量。可以说，采用大规模低碳策略制备的 Sn-Ti-EG 电极是锂离子电池下一代极具前途的阳极材料。

## 6、作者简介：

黄镇东，2012 年博士毕业于香港科技大学，随后于日本京都大学从事博士后研究工作至 2014 年回国加入到南京邮电大学材料科学与工程学院省部共建有机电子与信息显示国家重点实验室工作，现为材料学院教授、博导，新能源材料与器件系主任，长期致力于新型半导体储能材料的设计、合成、性能调控及柔性储能器件研究。先后主持或完成国家自然科学基金面上 2 项和青年项目 1 项、省自然科学基金、省高校自然基金各 1 项，参与 2022 年江苏省重点研发计划碳达峰碳中和专项 1 项。入选江苏省双创博士计划，在 Nature Communications、Advanced Functional Materials 等期刊发表 SCI 论文 60 余篇，获授权中国发明专利 10 余件。担任南京机械工程学会理化与无损检测专委会

---

副主任委员、eScience和Energy Reviews期刊青年编委。

## 期刊介绍 Introduction

Energy Materials and Devices 《能源材料与器件(英文)》(ISSN 3005-3315)创刊于2023年9月，由教育部主管，清华大学主办，清华大学出版社出版，清华大学出版社自主研发平台SciOpen发行，聚焦能源材料与器件领域的基础研究、技术创新、成果转化和产业化全链条创新研究成果，通过开放获取(Open Access)方式面向全球发表原创性、引领性、前瞻性研究进展，推动能源科学和产业发展，助力碳达峰、碳中和。Energy Materials and Devices由清华大学康飞宇教授担任创刊主编，首期已正式出版。

## 关注领域 Scope

具有引领性、创新性和实用性的先进能源材料与器件，包括但不限于：

- 二次电池
- 太阳能电池
- 燃料电池
- 液流电池
- 超级电容器
- 安全评估
- 电池回收
- 材料表征和结构解析
- 碳足迹和碳税负等主题

## 期刊特色 Why publish with us

High-quality and rapid peer-review 审稿周期短, 2~3周

Fast publication 快速出版, 接收即可分配DOI号在线预发表

Fully Open Access 开放获取

APC covered by the publisher 免费发表

Promote your article worldwide 全球自媒体和新媒体宣传

Chance for the Best Paper Award 最佳论文奖

---

## 文章类型 Paper types

### 综述 Review

In-depth summaries of representative results and achievements of the past 5-10 years in selected topics based on or closely related to the research expertise of the s.

### 研究论文 Research Article

Original reports covering important results in any area of energy materials and devices.

### 评论 Communication

Feature exciting research breakthroughs in the field of energy materials and devices.

### 观点 Perspective/Highlight

Comment on topical issues or express views on the developments in related fields.

### 宣传渠道 Global publicity

微信公众号 Wechat: Energy Mater Devices

视频号 Channels: EnergyMaterDev

微博 Weibo: EnergyMaterDevices

小红书 Xiaohongshu: EnergyMaterDevices

知乎 Zhihu: EnergyMaterDev

精准邮件推送 Email Campaign

科学网 Kexuewang

Twitter 推特: EnergyMaterDev

Facebook 脸书: Energy Mater Dev

LinkedIn 领英: Energy Mater Devices

EurekAlert! 優睿科

Kudos

TrendMD

---

诚邀投稿 Call for papers

诚邀与具有引领性、创新性、实用性的先进能源材料与器件相关的文章投稿！

欢迎扫码订阅 Register



欢迎扫码订阅，您可留下邮箱地址，我们将在第一时间与您分享EMD期刊的精彩内容。

关于我们 About us

期刊网址：<https://www.sciopen.com/journal/3005-3315>

投稿平台：<https://mc03.manuscriptcentral.com/emd>

邮箱：[energymaterdev@tup.tsinghua.edu.cn](mailto:energymaterdev@tup.tsinghua.edu.cn)

作者：黄镇东教授团队 来源：Energy Materials and Devices

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