
科学家利用精准智能碳化实现高倍率高安全钠电硬碳负极开发

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/31478.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！

科学家利用精准智能碳化实现高倍率高安全钠电硬碳负极开发。 碳基材料的微观结构决定了其钠电负极的电化学性能。然而，与有机前驱体材料精确和可控的结构相比，传统加热碳化技术由于其加热/冷却速率较慢、碳化时间较长，难以精确控制碳化动力学，使得精细调控碳基材料结构并制备高性能钠电负极存在巨大挑战。

针对该难题，华科大、武大、浙大团队提出了一种基于瞬态高温的动力学解耦碳化策略，即从精确的前驱体结构到精细的碳化过程控制再到准确的碳结构，可控制备了膨胀碳基负极材料，显著提高了钠离子电池负极的容量、倍率和循环稳定性。

相关成果Interlayer-Expanded Carbon Anodes with Exceptional Rate and Long-term Cycling via Kinetically Decoupled Carbonization为题于2025年1月21日在Joule期刊上发表。论文通讯作者为姚永刚教授、黄云辉教授、方永进教授、朱书泽教授，第一作者为程志恒和张豪。

碳化技术是将有机材料转化为各类碳产品的常用方法。碳化过程可有效去除杂质，并促进碳的结晶和石墨化，进而调控碳负极的微观结构和电化学性能。然而，传统碳化方法（例如以5~10 °C/min的升温速率加热至1000~1500 °C）不仅能耗高且热解、结晶和石墨化过程紧密耦合难以独立优化，导致碳材料结构难以精确调控，进而限制了材料性能的提升。

以目前主流的钠离子电池碳基负极材料为例，包括硬碳和软碳：（1）硬碳具有无序的微观结构、丰富的缺陷和纳米孔，能够为钠离子提供更多的储存位点和扩散通道，具有较高的比容量（可达300mAh/g以上）和优异的循环稳定性；然而，其电压平台较低，尤其是高倍率（>5C）或低电压（<0.05V）条件下，极易引发钠枝晶生长和电解液分解等问题，导致电池容量和安全性急剧下降。（2）软碳结构相对有序，具有良好的导电性和倍率性能，安全性高；然而，其层间距较窄，储钠容量较低（通常低于200mAh/g），且在高温碳化后易形成紧密的石墨结构，不利于钠离子的存储。因此，当前的碳负极在同时实现高容量、优异倍率性能和高安全性方面仍存在巨大挑战，严重阻碍了钠离子电池行业的高速发展。

针对上述问题，研究团队基于瞬态高温提出了一种碳化反应微观过程动力学解耦的新策略。利用碳化过程中前驱体除杂（氢、氧等元素的挥发，激活能较低且扩散时间长）、晶化（石墨微晶生长，激活能高且反应较快）和石墨化（层间距收缩，激活能高且反应较慢）的热力学和动力学参数差异，首先，将PTCDA前驱体在700 °C下保温1小时，去除易挥发的杂质元素；随后，在1950 °C下进行22秒快速高温冲击加热处理，实现碳结晶并抑制层间距收缩，实现了具有sp² 碳含量

高、晶粒尺寸大和层间距宽的膨胀碳负极材料的可控制备，同时降低能耗约80%。分子动力学模拟表明，这种精确碳化过程成功解耦了热解、结晶和石墨化步骤，尤其是通过第二步瞬态加热实现。因此，膨胀碳负极展现出卓越的电化学性能：在0.2C下比容量高达310.6mAh/g，在10C下倍率性能可达234.8mAh/g，且在10C下循环超过6000次后仍保持稳定，显著优于现有的硬碳和软碳负极。电化学测试和原位XRD表征进一步证实，膨胀碳在2~0.01V的宽电压范围内无钠金属聚集，其扩大的层间距显著促进了钠离子的快速嵌入，实现了快速充电和长循环寿命。

此外，我们从多种碳前驱体（包括有机小分子、聚合物和复杂前驱体）出发，合成了一系列膨胀碳材料，验证了该策略的普适性；且从大规模制备装置和工艺能耗、成本、供应链及性能等关键指标进行了全面评估，进一步表明该研究具有极大的实际应用潜力和价值。（来源：科学网）

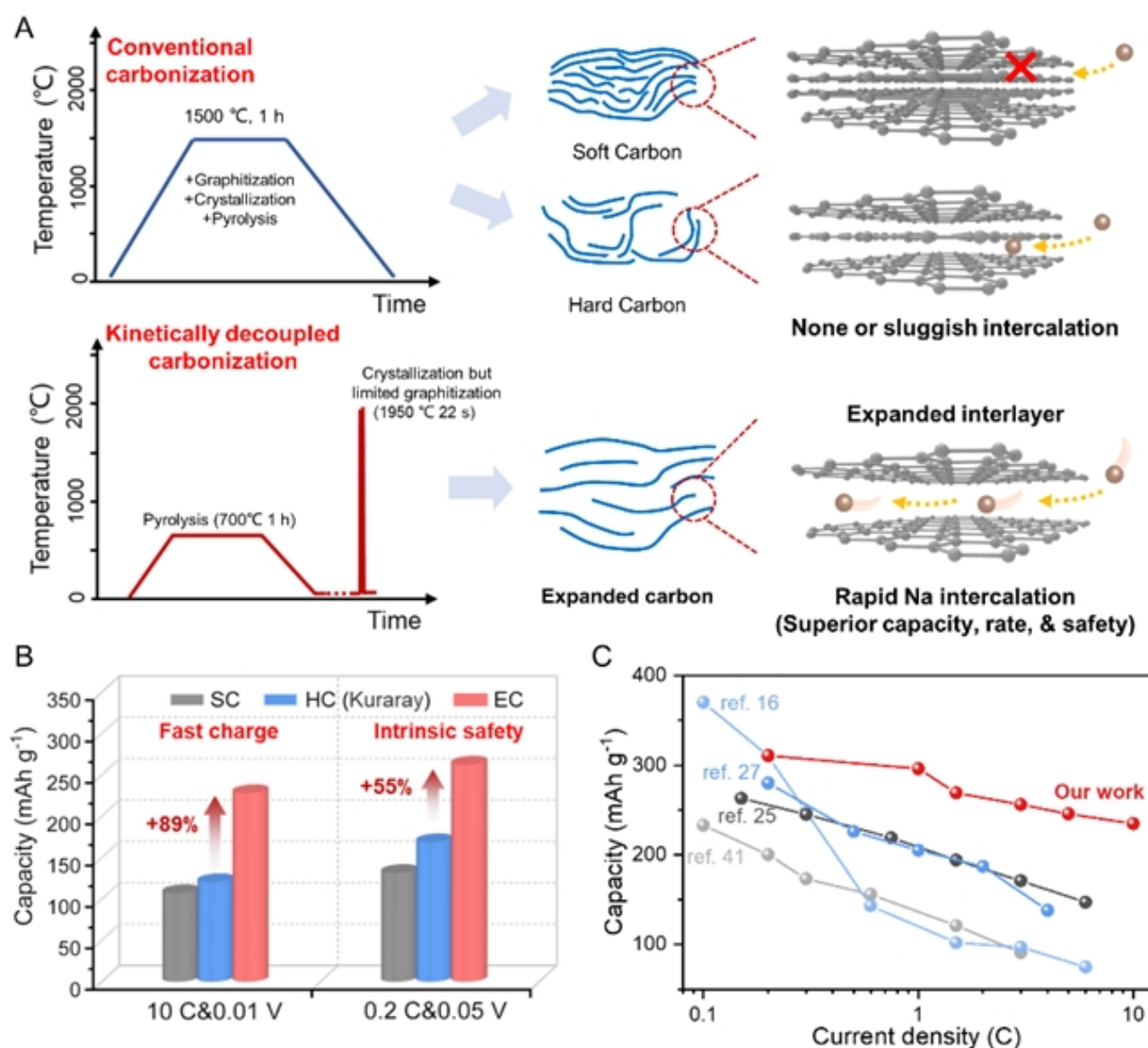


图1：动力学解耦碳化示意图及膨胀碳负极的电化学性能。

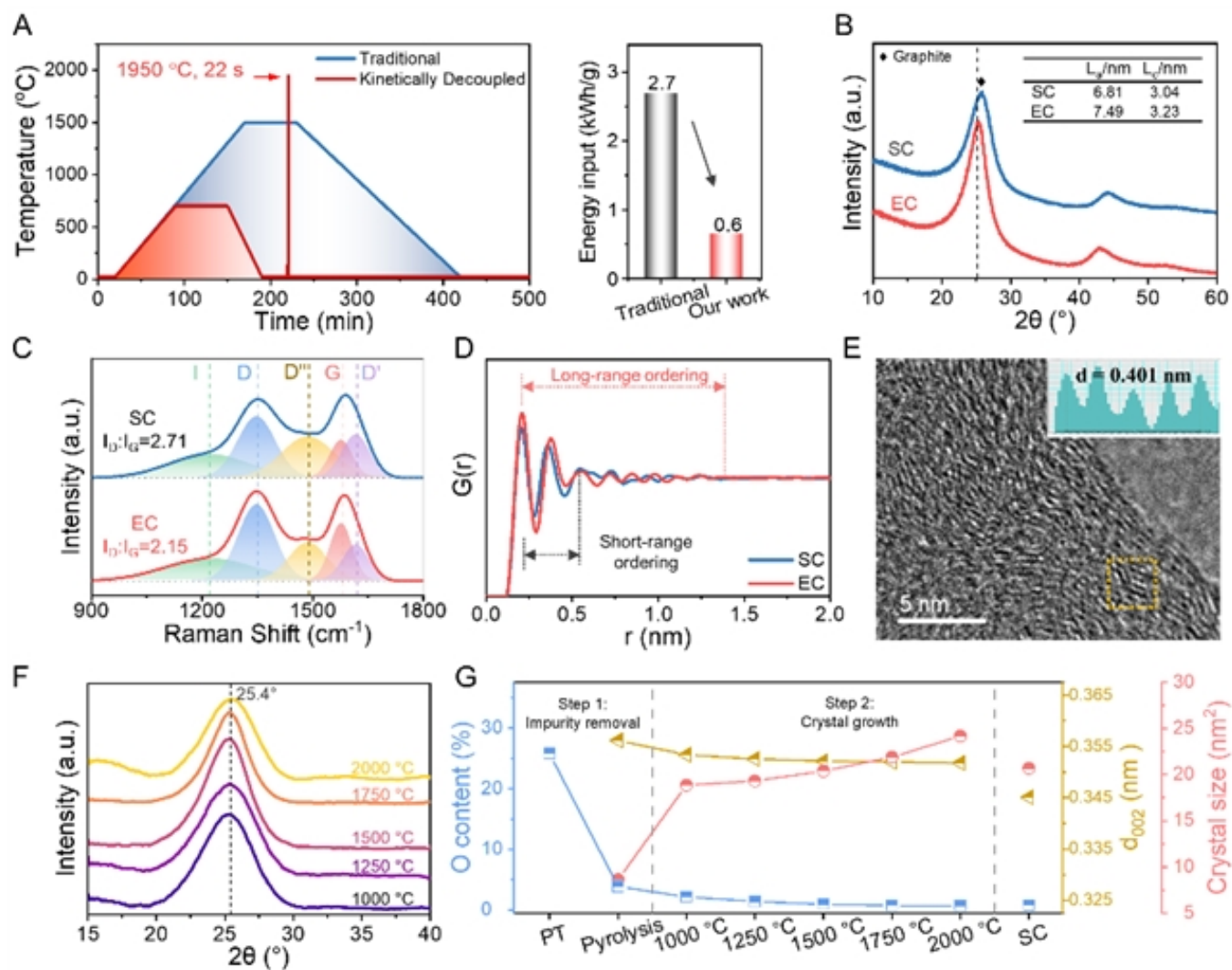


图2：动力学解耦碳化对碳负极结构的影响规律。

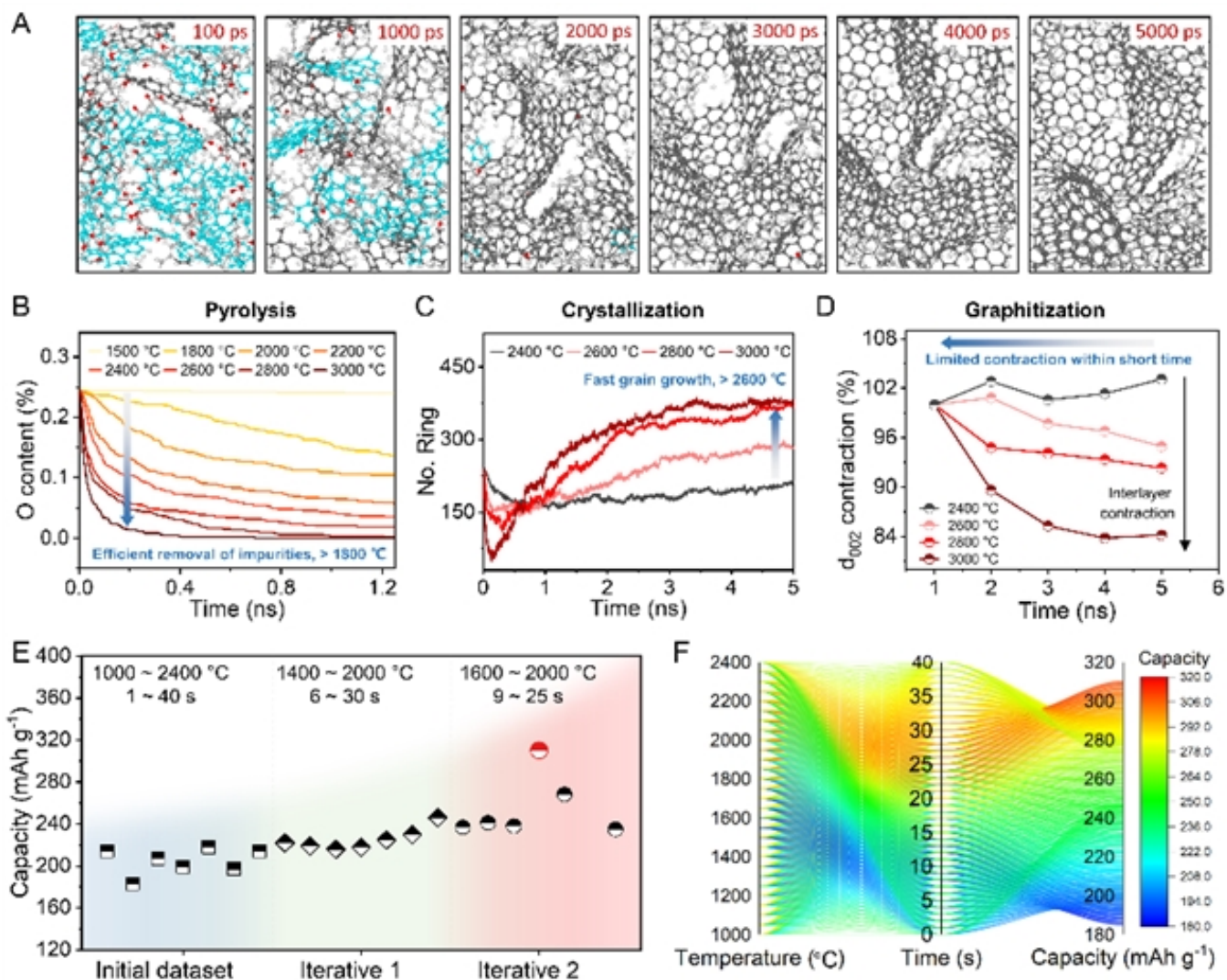


图3：碳化反应过程的理论计算与机器学习智能优化。

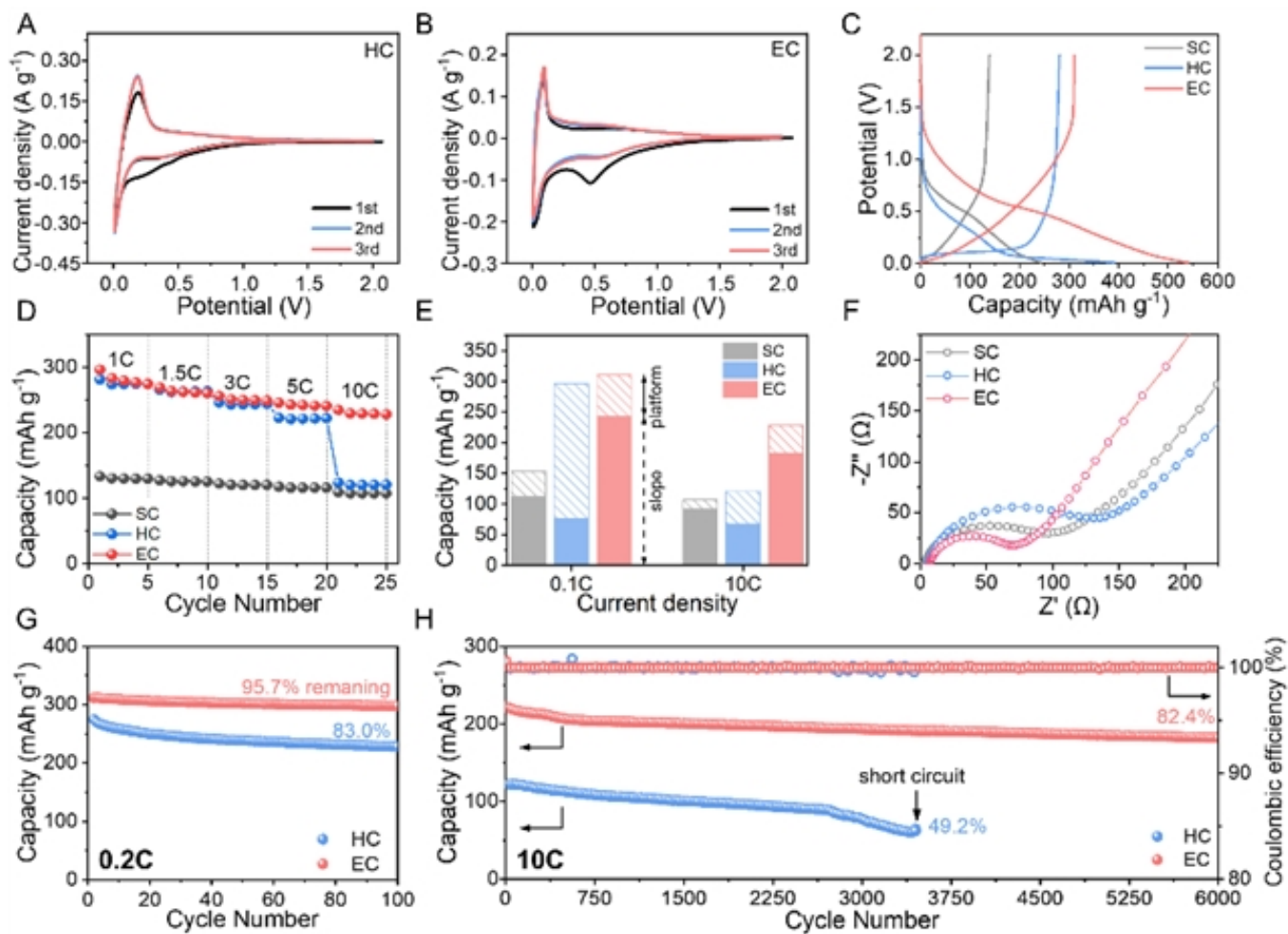


图4：膨胀碳负极的钠离子电池电化学性能。

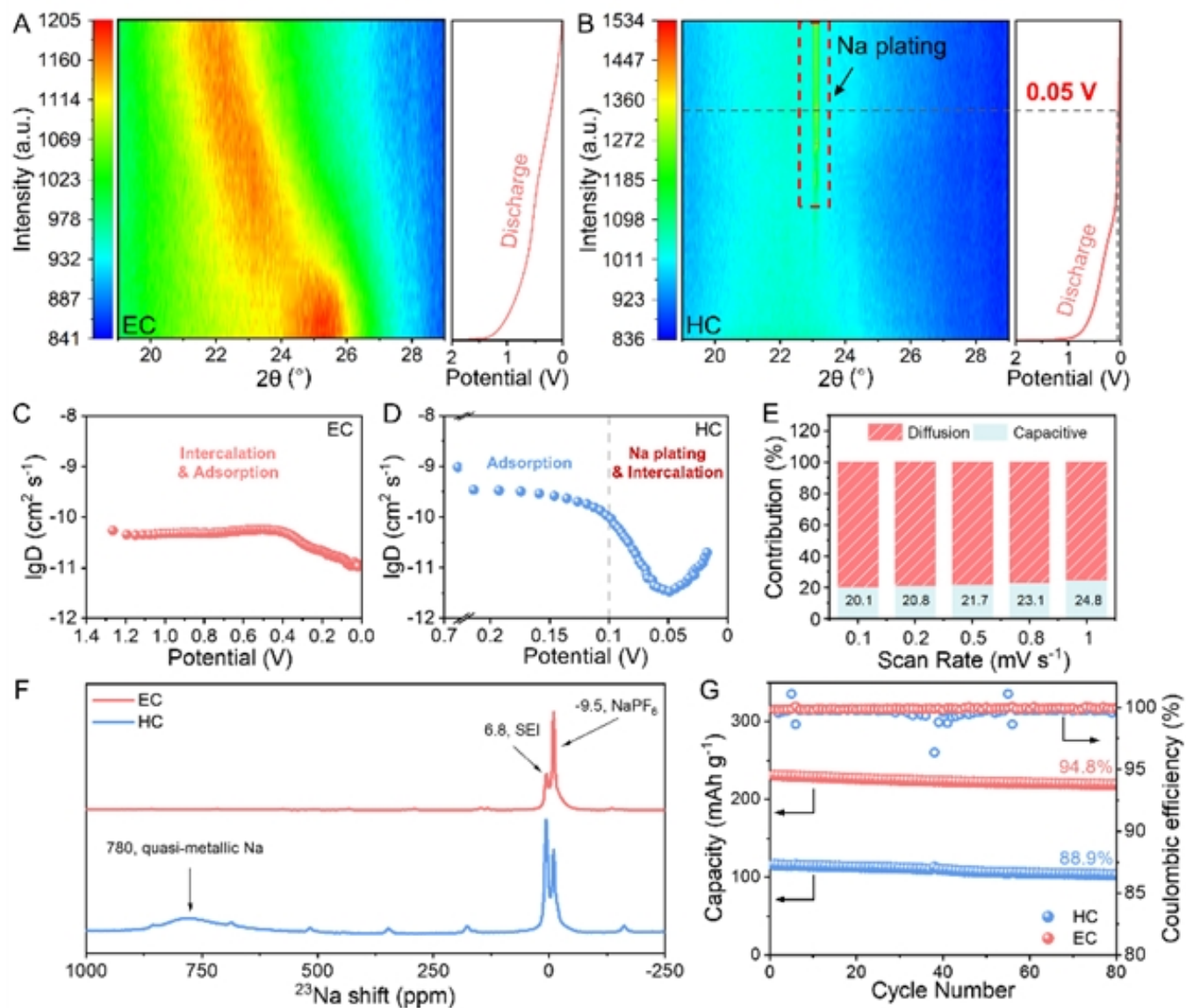


图5：膨胀碳负极的储钠机理研究。

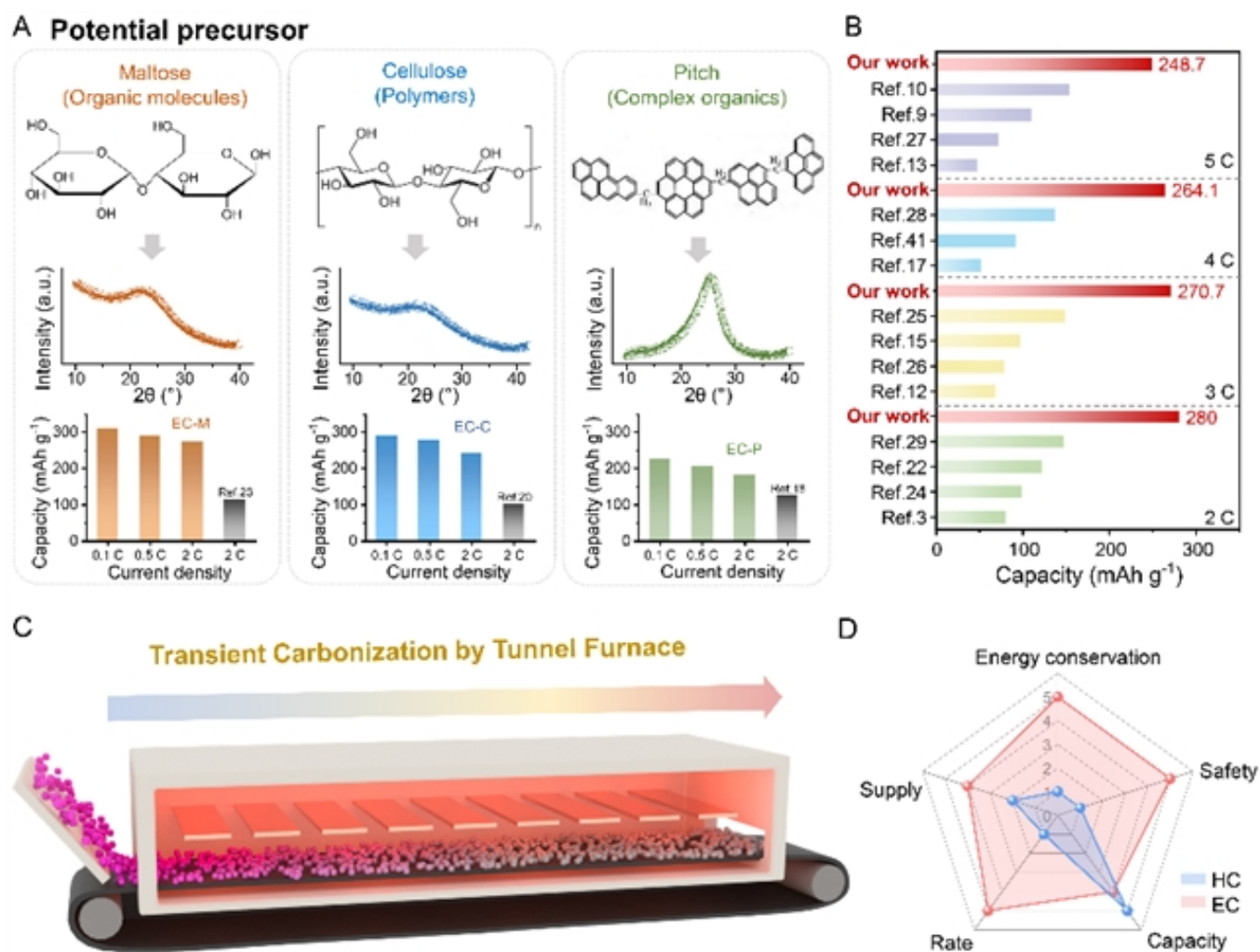


图6：基于瞬态高温解耦策略的膨胀碳负极制备工艺的普适性与规模化前景。

相关论文信息：<https://doi.org/10.1016/j.joule.2024.101812>

作者：姚永刚等 来源：《焦耳》

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](https://www.iikx.com)转发