
锂硫电池用单原子催化剂研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/32428.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！

锂硫电池用单原子催化剂研究获进展。

锂硫电池以硫转换反应为核心，具有高能量密度和成本优势，是下一代储能技术颇有潜力的候选者之一。但在实际运行过程中，硫转换反应的动力学通常较为缓慢，限制了电池的实际性能。单原子催化剂尤其是新兴的高熵单原子催化剂能够提升硫转换反应动力学，但其背后的化学机制尚未明晰，常被简单归结为协同或熵增效应。这阻碍了单原子催化剂的设计与性能优化。

中国科学院金属研究所科研人员在前期研发高效锂硫电池催化剂的基础上，采用第一性原理计算与实验方法，揭开了这一“黑箱”，在单原子催化剂研究方面取得进展。研究发现，中心金属原子间的长程相互作用是影响催化性能的关键。基于此，研究实现了对高熵单原子催化剂元素种类和占比的精准定位，促进了硫转换反应，提升了锂硫电池性能。

研究发现并验证了不同中心金属原子间存在非键合作用的长程相互作用，且作用范围在亚纳米距离内。这种长程相互作用影响中心金属原子的d电子占据状态，导致非典型价态。熵的增加进一步促进了中心金属原子中d电子和基底碳原子中电子的重排。研究在第四周期过渡金属中筛选出5个潜在的高性能中心金属原子即Mn、Fe、Co、Ni、Cu。基于此设计的这一高熵单原子催化剂，可调节硫化物的吸附和转化反应动力学，并提高被吸附硫化锂的电子导电性。研究组装的锂硫电池在10 C的高倍率下具有800 mAh g⁻¹的初始容量，并可稳定循环200圈以上。

这一研究为单原子催化剂的进一步发展提供了理论支撑，并有望推动高比能锂电池技术的创新研究。

相关研究成果被遴选为封面文章和编辑推荐文章，发表在《先进材料》（Advanced Materials

）上。研究工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金和博士后创新人才支持计划等的支持。

[论文链接](#)

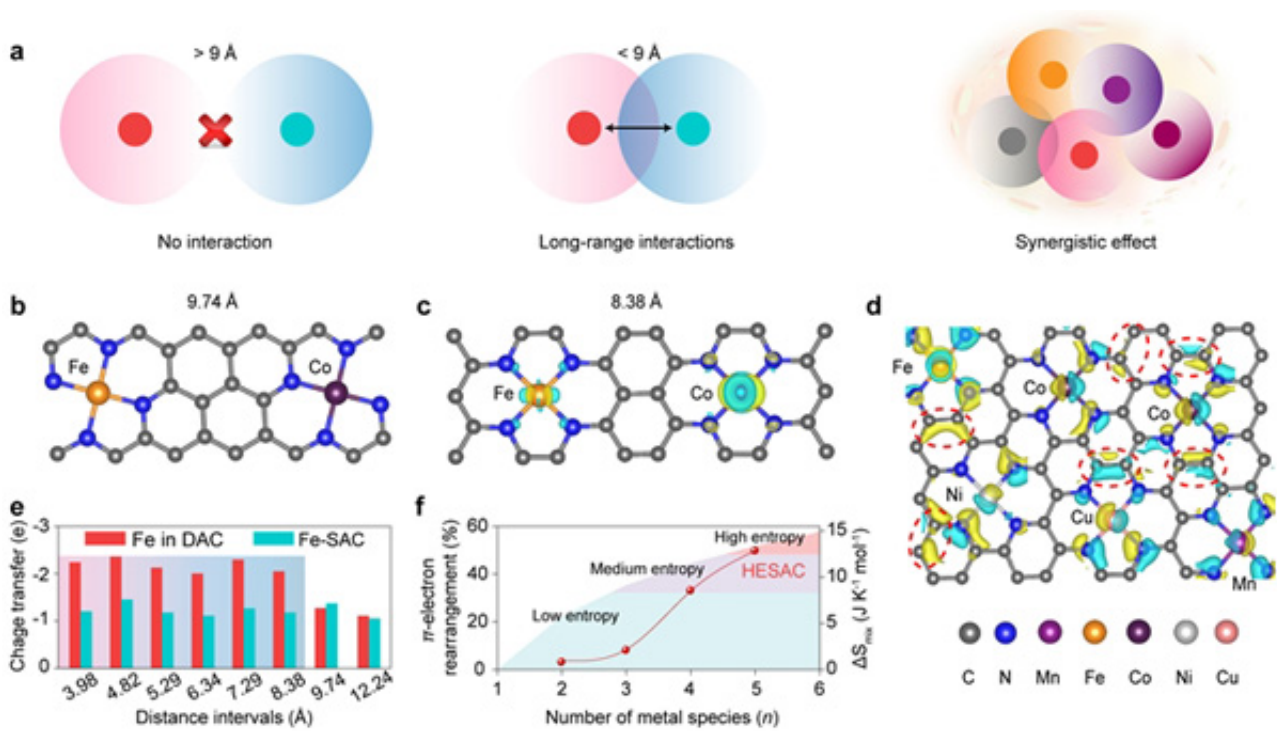
ADVANCED MATERIALS

Catalyzing Sulfur Conversion Reactions

The sluggish sulfur conversion reaction is a bottleneck for the improvement of lithium-sulfur battery performance. In article number 2413653, Feng Li, Zhenhua Sun, Tong Yu, and co-workers reveal that long-range interactions in high-entropy single-atom catalysts regulate the electron states, facilitating sulfur conversion. The cover illustrates that different metal atoms accelerate electron transport, thereby boosting high-rate performance.

WILEY-VCH

当期封面



高熵单原子催化剂种长程相互作用示意图

研究团队单位：金属研究所

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