
学者通过计算筛选出新型高性能电池材料

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/36540.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！

学者通过计算筛选出新型高性能电池材料。在能源存储技术快速发展的今天，锂离子电池和钠离子电池因其卓越的性能而被广泛应用于便携式电子设备、电动汽车和大规模储能系统。但传统电池材料在电池能存多少电、充电有多快、反复充电能使用多久等方面都遇到了难题。

针对这些挑战，天津大学国家储能技术产教融合创新平台吉科猛团队联合国内外科研单位，通过先进的理论计算方法，预言了一类新型二维拓扑二硫化物单层材料，这些材料在快充性能、循环稳定性、耐热稳定性等方面展现出巨大潜力。

研究团队通过计算模拟发现，这些材料作为负极活性材料，其丰富的锂、钠离子存储位点和超快的离子传输能力，可显著提升电池负极的快充性能。作为硫正极材料载体，它们能有效锚定并催化转化多硫化物中间体，有望大幅延长正极循环寿命并优化其快充表现。

该新型二维材料用于电池负极时的电化学性能指标突出：储存锂离子时，理论上每克能存1.60安时的电量；储存钠离子时，每克能存1.35安时的电量。同时，离子在该材料中移动时遇到的阻力特别小，离子扩散势垒分别低至0.206电子伏和0.046电子伏。这些性能远优于现有二维碳材料和磷材料的水平，给高性能电池研发提供了全新的材料选择。

目前，常用的锂硫电池和钠硫电池普遍存在一个问题——多硫化物会乱跑。这回直接影响电池稳定性和充电效率。研究团队通过计算发现，此类新型二维材料表面有特殊的化学特性和吸附能力，能牢牢抓住多硫化物，阻止它们乱跑，从而能很好地提升电池反复使用的稳定性和充电效率。此外，该材料在从室温到约227 °C温度区间时，其耐热性和动力学性能依旧表现良好，为电池在高温工况场景如新能源汽车夏季户外长时间行驶、工业储能系统高温环境运行、便携式电子设备高功率放电等的应用提供了关键技术理论支撑。

该研究得到了国家自然科学基金和深圳市人力资源和社会保障局的项目支持，目前相关研究成果已经在线发表于《先进科学》。（来源：中国科学报 陈彬）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1002/advs.202515841>

作者：吉科猛等 来源：《先进科学》

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