
研究实现水系锌电正极精准调控

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/36645.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！

研究实现水系锌电正极精准调控

。作为水系锌离子电池正极材料的候选材料，二氧化锰具有低成本、高理论容量和高工作电压的优势，但其固有缺陷限制了电化学性能。

近日，中国科学技术大学研究团队在 MnO_2

层间分别引入具有吸电子和供电子基团的有机分子，结合同步辐射共振非弹性X射线散射技术、X射线吸收谱和理论计算，证

明具有不同电子效应的插层剂对 MnO_2

电子结构的调控。结果表明，带吸电子基团的分子插层可促进 $\text{Mn } 3d\text{-}O 2p$ 轨道杂化，降低晶场分裂能，增强与 Zn 的相互作用，进而改善离子传输动力学，展现出优异的倍率性能。

科研团队选取含吸电子基团的7-乙酰氧基-4-甲基香豆素（AMC）有机分子、含供电子基团的7-羟基香豆素（HC）有机分子作为插层剂，通过液相插层法制备得到两种插层型二氧化锰，利用密度泛函理论计算确认含吸电子基团的AMC有机分子与氧的相互作用更强，并促进 $\text{Mn } 3d$ 与 $O 2p$ 轨道之间杂化程度的增强。

同步辐射RIXS、sXAS的测试显示，AMC- MnO_2 的 d -

d 激发峰向更低的能量损失方向移动，表明

AMC- MnO_2 的晶场分裂能更低，即 $3d\text{-}e_g$ 和 $3d\text{-}t_{2g}$

之间的能级差减小。同步辐

射紫外光电子能谱结果显示，AMC- MnO_2

具有更低的功函数，说明其费米能级上移，利于电子转移，实现充放电过程中离子的快速传输。

同步辐射原位XRD进一步探测了AMC- MnO_2

正极在充放电过程

中的结构演变。原位探测发现：当带

电离子嵌入AMC- MnO_2

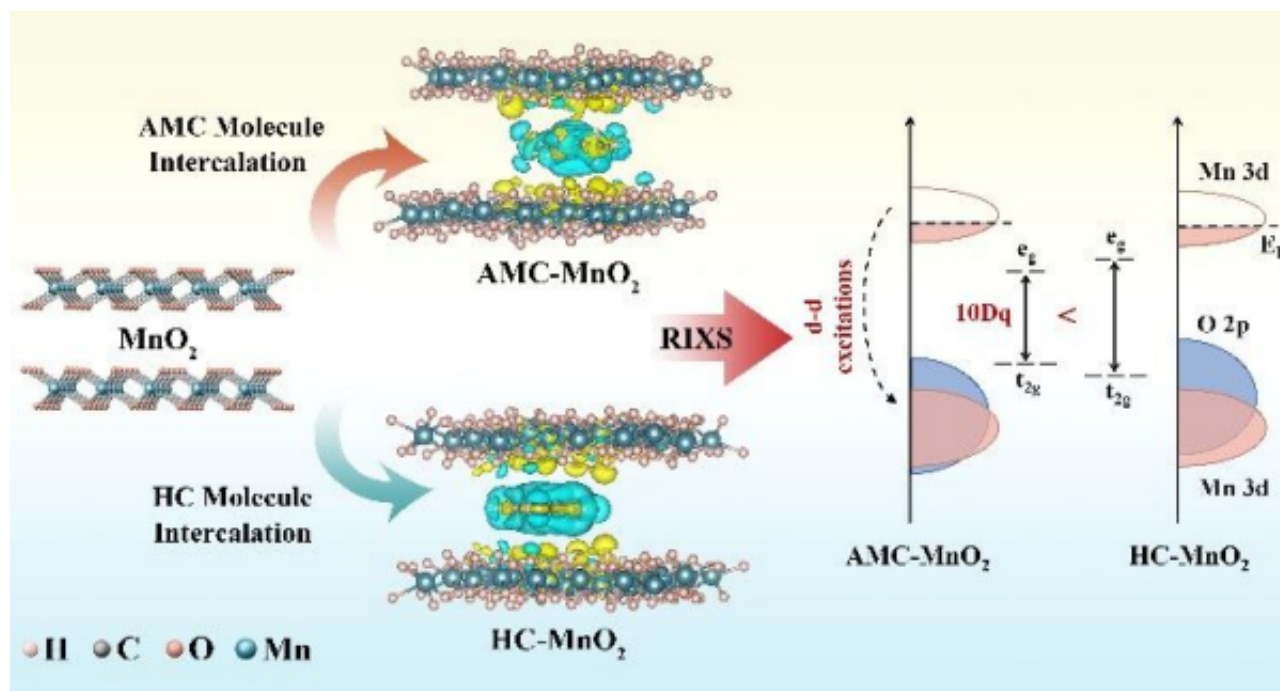
时，会增加与二氧化锰层间的相互作用，使得层间距收缩；当离子脱出时，层间相互作用削弱，使得层间距膨胀。由此研究发现，AMC- MnO_2

正极在充放电过程中具有可逆的层间距和价态演变，说明带有吸电子效应基团的AMC分子插层能够稳定二氧化锰主体结构。

上述工作探讨了基于电子调制分子插层的二氧化锰结构变化与储能机制，为插层型材料设计提供了新思路。

相关研究成果发表在《美国化学会志》(JACS)上。研究工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金和中国博士后科学基金等的支持。

[论文链接](#)



基于电子调制分子插层MnO₂的同步辐射研究

研究团队单位：中国科学技术大学

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](#)转发