

---

# 高电压热电池用氟化物正极材料研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/37673.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！*

高电压热电池用氟化物正极材料研究获进展。

近年来，过渡金属氟化物（TMF）因氟离子的强电负性而表现出高理论电压和优异的热稳定性，被视为下一代高压热电池的理想正极材料。然而，TMFs材料的低电子电导率、复杂合成工艺，以及在熔盐电解质中的溶解问题，制约了其实际应用，尤其在高温条件下，熔盐的强溶剂化能力加剧了正极活性物质的溶解与穿梭效应，导致电极结构破坏和性能衰退。

近日，中国科学院过程工程研究所团队提出了基于离子筛分概念的选择性限域策略。实验表明，该策略通过原位构筑亚纳米多孔碳界面，有效抑制了正极材料的溶解与穿梭效应，有助于热电池性能实现提升。

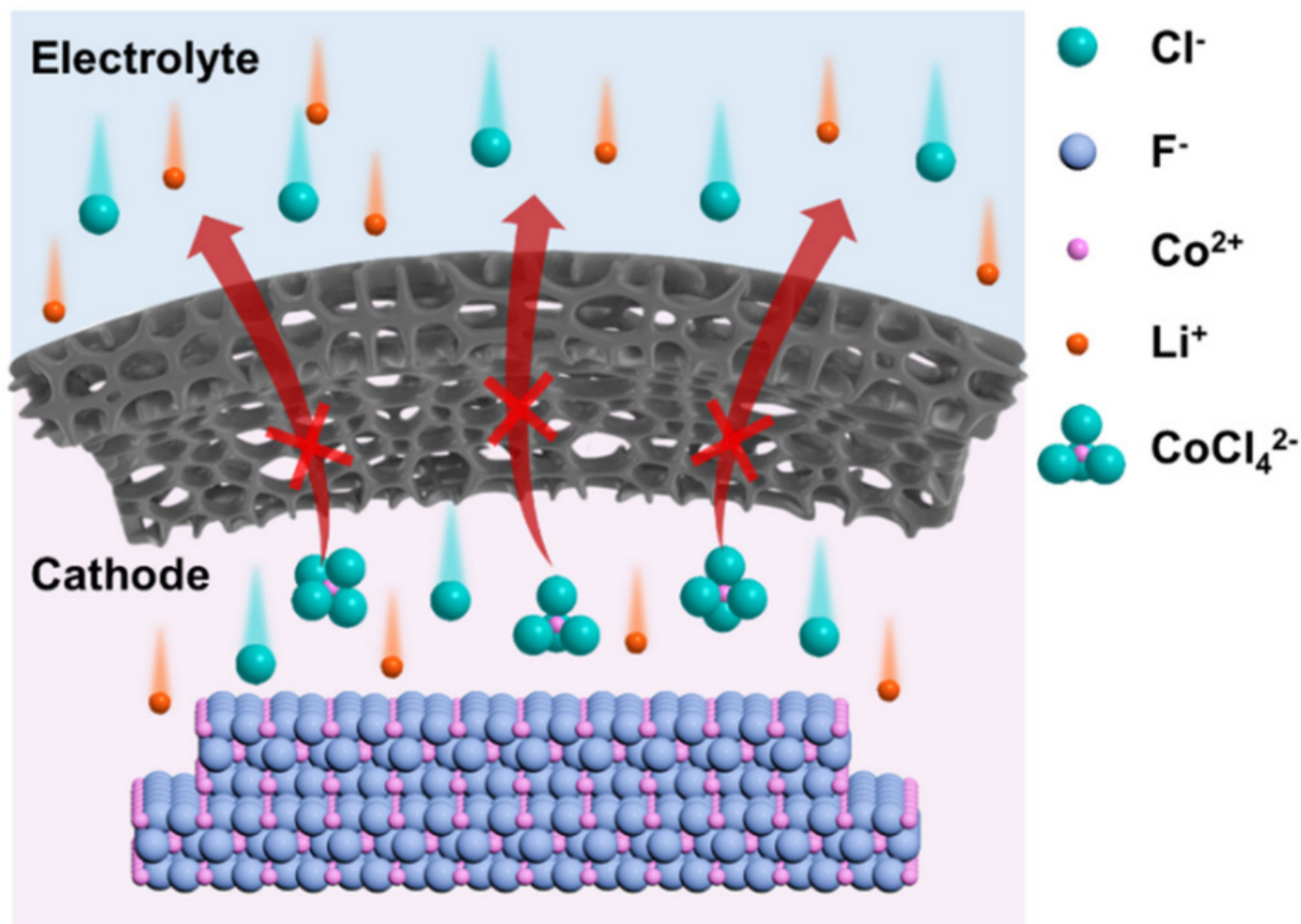
研究团队引入了离子筛分机制，利用锂离子与溶解的 $\text{CoCl}_4^{2-}$ 等金属氟化物络合离子之间的尺寸差异，在二氟化钴（ $\text{CoF}_2$ ）颗粒表面构建了具有0.54nm均匀亚纳米孔道的共价有机框架衍生碳界面（CSC）。该界面通过原位生长和碳化工艺形成“plum pudding@shell”复合结构，既能有效限制 $\text{CoF}_2$ 衍生的络合离子外迁，又保证了锂离子的高效传输。实验数据显示，基于 $\text{CoF}_2$ @CSC700-24正极的热电池在100mA  $\text{cm}^{-2}$ 电流密度和500 °C工作温度下，放电平台电压超过2.5V，比容量高达365mAh  $\text{g}^{-1}$ ，比能量达882Wh  $\text{kg}^{-1}$ ，为目前可搜索文献中的高压热电池正极中的最高值。

团队通过机理研究进一步揭示了 $\text{CoF}_2$ 在熔盐中的溶解行为，即通过热力学计算与实验验证发现， $\text{CoF}_2$ 会与电解质中的氯化锂（LiCl）发生阴离子交换生成 $\text{CoCl}_4^{2-}$ ，该络合物是导致活性物质迁移的主要原因。亚纳米孔道界面通过尺寸筛分作用，有效阻隔了 $\text{CoCl}_4^{2-}$ 的扩散，从而明显抑制了穿梭效应。恒电流间歇滴定法测试表明，CSC界面可稳定锂离子扩散系数，提升反应动力学。

该研究为解决金属氟化物正极的溶解问题提供了新思路，也为发展下一代高能量密度、高功率热电池及其他锂离子电池体系提供了可行的界面工程策略。

相关研究成果发表在《科学进展》（Science Advances）上。

[论文链接](#)



亚纳米多孔界面实现电解质与正极界面之间离子尺寸离子选择性传输示意图

研究团队单位：过程工程研究所

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://iikx.com)转发