

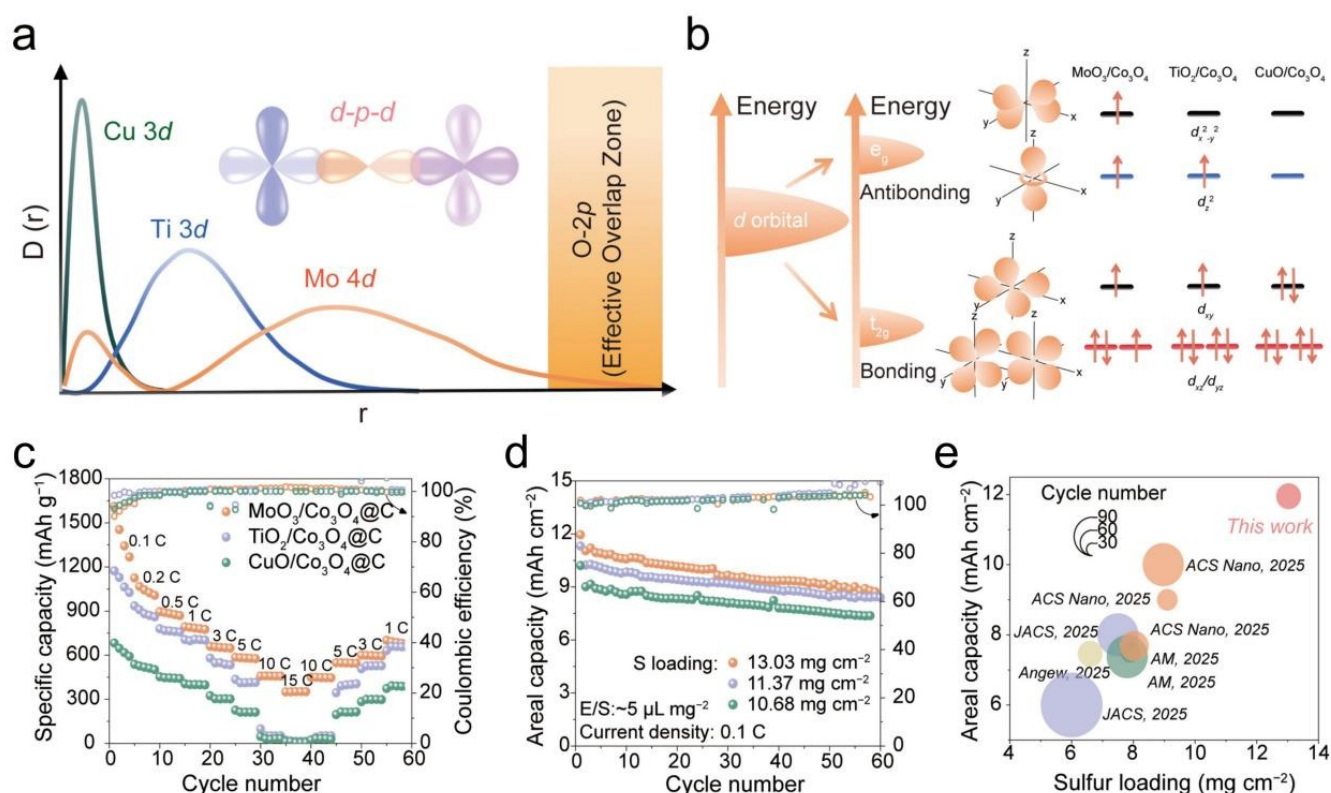
锂硫电池催化转化及溶剂化调控研究获进展

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/40789.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！

锂硫电池催化转化及溶剂化调控研究获进展。近日，广东工业大学轻工化工学院教授刘全兵团队与新加坡国立大学单路通博士合作，在锂硫电池催化转化及溶剂化调控方面取得重要进展。相关成果发表于《德国应用化学》（Angewandte Chemie International Edition）。



相关研究示意图。研究团队供图

论文第一作者、该学院硕士生田婧婧介绍，研究团队提出氧桥诱导自旋态调控策略，设计合成了蛋黄-蛋壳结构的 $\text{MoO}_3/\text{Co}_3\text{O}_4@\text{C}$ 纳米反应器。该材料通过界面Mo-O-Co氧桥的动态振动，激活Mo 4d-O 2p-Co 3d轨道相互作用通道，促使Co活性中心从低自旋态向高自旋态转变，增强Co 3d轨道与多硫化锂（LiPSs）中S 2p轨道的杂化能力，从而有效突破溶剂化屏蔽对催化位点的阻碍。

锂硫电池因理论比容量 (1675 mAh g^{-1}) 和理论能量密度 (2600 Wh kg^{-1}) 突出, 被视为下一代高能量密度储能体系的有力候选。但其实际应用受制于LiPSs穿梭效应、硫氧化还原动力学迟缓, 以及溶剂分子对活性位点的屏蔽效应。

针对上述难题, 该纳米反应器具备多重协同功能: 高自旋Co位点强化对LiPSs的化学吸附与催化转化; 同时调控电解液溶剂化结构, 促进溶剂分离离子对向接触离子对/聚集体转变, 降低Li⁺去溶剂化能垒并均匀化离子通量; 蛋黄-蛋壳双层结构对可溶性中间体形成空间限域, 抑制其向外扩散。三者协同从电子结构、溶剂化工程和物理限域层面提升反应动力学。

实验数据显示, 采用MoO₃/Co₃O₄@C改性隔膜的锂硫电池, 在15 C超高倍率下仍可输出352 mAh g⁻¹的容量; 在13.03 mg cm⁻²的超高硫载量下, 初始面积容量达11.96 mAh cm⁻², 可逆容量保持为8.72 mAh cm⁻², 处于当前锂硫电池研究的前沿水平。

该研究从氧桥振动-轨道耦合-自旋态转变-溶剂化结构重构的视角, 揭示了高自旋活性中心突破溶剂化屏障、加速硫氧化还原反应的新机制, 为高载硫、高倍率、长寿命锂硫电池的催化材料设计提供了理论依据和新路径。(来源: 中国科学报 朱汉斌)

相关论文信息: <https://doi.org/10.1002/anie.4944842>

作者: 刘全兵等 来源: 《德国应用化学》

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