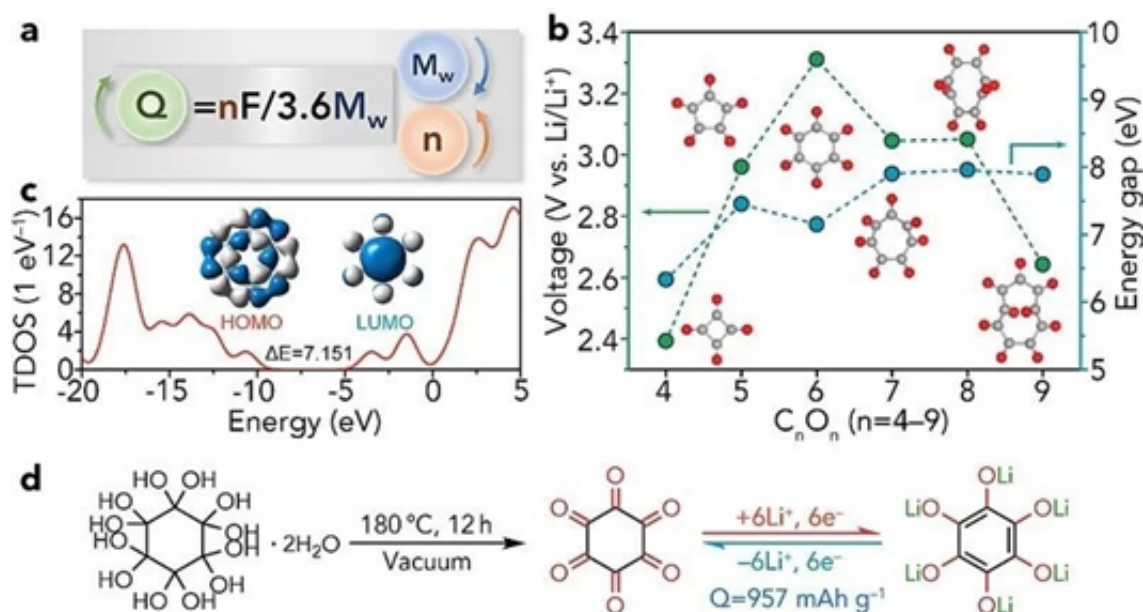


环己六酮刷新锂离子电池有机正极容量世界纪录

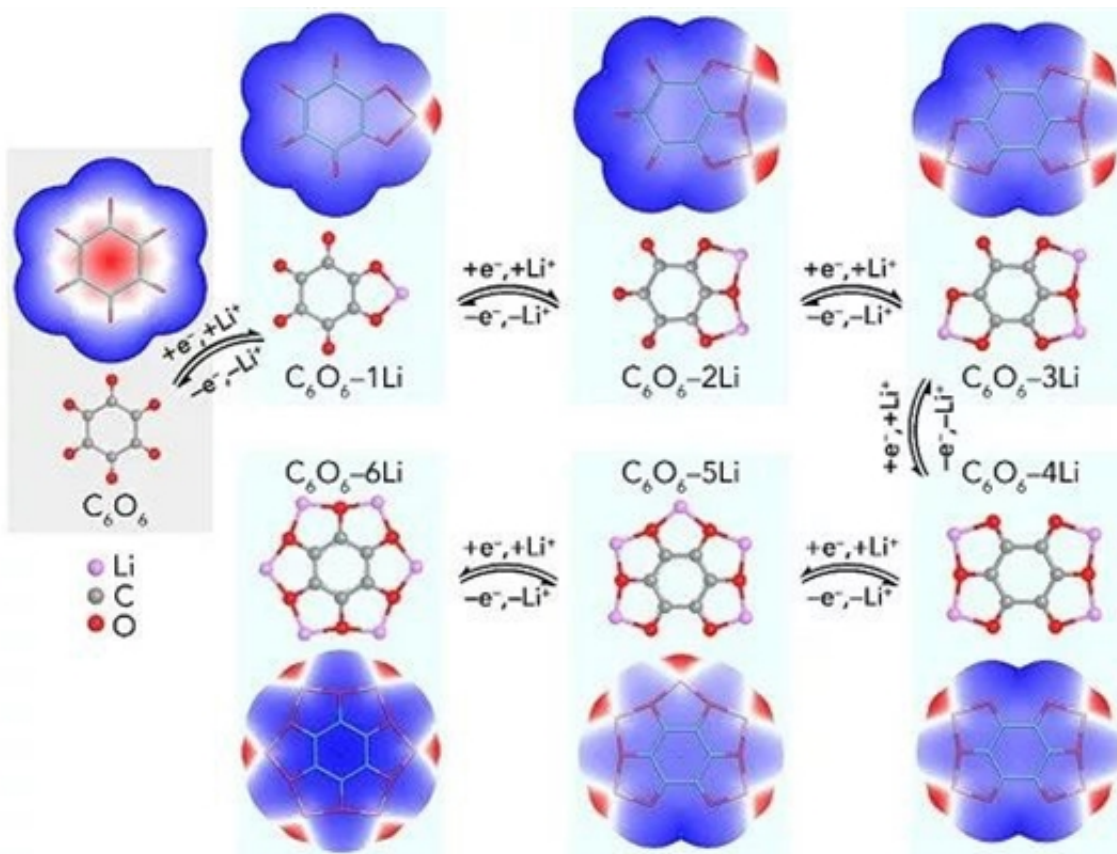
作者：辛雨 马超 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/5277.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！



高容量有机羰基正极材料的分子设计以及环己六酮的合成和反应机理 南开大学供图



环己六酮反应机理的理论计算模拟 南开大学供图

环己六酮刷新锂离子电池有机正极容量世界纪录。锂离子电池是一种非常重要的储能技术，目前已广泛应用于各类便携式电子设备，并有望在电动汽车、智能电网及分布式储能等领域大规模应用。随着人类社会发展的信息化、移动化、智能化，新型高容量、长寿命、低成本、高安全的电池亟待开发。

近日，中国科学院院士、南开大学化学学院教授陈军团队设计合成了一种具有超高容量的锂离子电池有机正极材料——环己六酮，刷新了锂离子电池有机正极材料容量的世界纪录。相关研究成果发表于《德国应用化学》。

正极是锂离子电池的短板

锂离子电池的容量、能量密度等性能由正极限性，陈军告诉《中国科学报》：可以说，正极是锂离子电池的一个‘短板’。

另外，现有的锂离子电池正极材料包含钴等金属元素，合成工艺涉及选矿、冶炼、回收等技术，存在资源匮乏、环境污染等难题。因此，高容量、可再生、绿色环保、低成本的锂电池正极材料已成为当前该领域的研究热点和重点。陈军说。

含有碳、氢、氧等元素的有机电极材料因其结构可设计性、对环境友好以及廉价丰富等优点被认为是极具发展前景的下一代锂离子电池正极材料。然而，该类材料仍面临实际容量不高(< 600 mAh/g)、易溶解于有机电解液等问题，导致其能量密度较低、容量衰减较严重、循环寿命较短。因此，如何设计合成具有超高容量的有机正极材料，并解决其在电解液中的溶解问题是锂离子电池

池的一项挑战。

研究人员把目标锁定在环己六酮。该材料只由六个羰基构成，不存在任何非电化学活性的结构单元，且每一个羰基都能参与电化学反应，因此，环己六酮在众多有机羰基正极材料中体现出目前最高的理论比容量(957 mAh/g)。

开发出更高容量的锂离子电池正极材料可以不断提高电池体系的能量密度，从而提升电池的工作时间。陈军表示。

突破：提高材料的容量和寿命

在众多的有机羰基正极材料中，环己六酮材料虽具有最高的理论容量，但其易与水反应生成稳定的水合物，也因此一直没有被成功合成出来。经分析探索，研究人员发展了一种脱水反应新方法，通过精确控制脱水反应的温度和压力，成功实现了环己六酮材料的合成。

另外，就正极材料而言，循环寿命的长短是决定其能否实现实际应用的一个重要因素。作为有机小分子材料，环己六酮易溶解在基于有机酯类和醚类的锂离子电解液中，导致其循环寿命较短。

论文第一作者、南开大学博士卢勇接受《中国科学报》采访时表示，为解决此问题，团队结合相似相溶原理，采用基于离子液体的电解液，并经过系列优化，发现离子液体较大的极性能够使环己六酮的溶解度大大降低。

陈军指出，该方法有效提高了环己六酮的循环寿命，为环己六酮进一步的实际应用奠定了基础。他表示，合成具有超高容量的环己六酮材料，并优化匹配的电解液、提高材料寿命，是这项研究的两个主要突破。

随后研究人员研究了环己六酮材料在锂离子电池中的充放电反应机理和电化学性能，结果表明环己六酮的放电比容量可达902 mAh/g，为目前已知的有机电极材料容量最高值，组装的电池还体现了长循环寿命等特征。

锂离子电池的顶峰

研究人员表示，以环己六酮为正极的锂离子电池能够实现电池容量更高、寿命更长等优势，为将来锂离子电池在电动汽车、储能电网等领域的应用提供支撑。

论文审稿人认为，该研究首次合成了超高容量环己六酮正极材料，并通过理论计算和实验手段研究了环己六酮在锂离子电池中的性能和充放电机理，是一项具有原始创新的工作，是未来可持续能源存储技术领域的一个重要突破。

陈军指出，超高容量锂离子电池环己六酮正极材料的合成以及锂离子电池的应用探究，将有机正极材料的能量密度提高到一个新的水平。

具体来说，环己六酮材料的能量密度高达1533 Wh/kg，此能量密度远高于目前商品化的锂离子电池正极材料，如钴酸锂(约600 Wh/kg)，同时也高于目前研究报道的其他有机正极材料。陈军认为，对只含有高丰度碳、氧元素的高能量密度环己六酮材料进行进一步优化，有利于实现其大规模的实际应用，为未来高容量有机电极材料的设

计、制备和电池应用提供新思路。

美国工程院院士、康乃尔大学教授LyndenA.

Archer表示，这一开创性成果把该领域的工作高度推向了顶峰。

相关论文信息：<https://doi.org/10.1002/anie.201902185>

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