
宁波材料所在全固态锂电池无锂正极方面取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/6842.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！

宁波材料所在全固态锂电池无锂正极方面取得进展。基于转化反应的黄铁矿型 FeS_2 具有环境友好、价格低廉以及理论比容量高(890mAh^{-1})等优点。在锂电池中， FeS_2 在充放电过程中会发生如下反应：

显然，在首次循环之后， Li-FeS_2 电池将变成 Li-FeS_y 及 Li-S 电池。由于多硫化物的穿梭效应、活性物质在转化反应过程中的体积变化以及电绝缘性生成产物 $\text{Li}_2\text{S/S}$ 的较差反应动力学，导致 FeS_2 在基于有机溶剂的液态电解液中表现出较差的电化学性能。为此，研究人员通过调整电解液的组分以降低多硫化物的穿梭效应，但多硫化物的穿梭效应只能在一定程度上得到缓解。采用固体电解质能完全避免多硫化物的穿梭，但在固态电池中活性物质的体积变化对电池性能的影响比液态电池更为显著。常用的解决手段是制备 FeS_2 与导电材料的复合物，同时达到缓解循环过程中体积变化和提高反应动力学的效果。但导电材料不会对电池的容量有贡献，从而降低电池质量能量密度。

针对以上问题，中国科学院宁波材料技术与工程研究所所属新能源所研究员姚霞银团队与陈亮团队合作，通过第一性原理计算与实验相结合的方式，创新性地在FeS₂中引入具有催化作用的过渡金属，达到了在不牺牲电池质量能量密度的前提下，提高FeS₂在全固态锂电池中的反应动力学的目的。通过对比不同过渡金属(Cu、Co和Ni)对FeS₂形貌及电化学性能的影响，筛选出Co对FeS₂性能具有最优化作用(图1)。并且所得到的Co_{0.1}Fe_{0.9}S₂具有最小的颗粒尺寸，这有利于提高材料的比表面积，缓解循环过程中的体积变化以及减小电化学反应过程中Li⁺的传输路径。电化学测试结果表明，是电化学反应中的决速步骤，而Co的加入，对该反应有明显的促进作用，使基于FeS₂的全固态电池在500mA g⁻¹电流密度下循环100圈后，可逆容量从197.1mA h g⁻¹提高到543.5mA h g⁻¹，该提升效果明显优于过渡金属Cu和Ni。

研究人员进一步通过密度泛函理论计算的方法确定了Co掺杂后决速步能垒从2.09eV降低至1.86eV。DOS结果也显示，由于d轨道填充作用，多一个d电子的Co使得费米能级附近态密度提高，从而提高了电化学活性(图2)。

相关工作发表于ACS Nano, 2019, 13, 9551-9560，该工作得到国家重点研发计划(2018YFB0905400)、国家自然科学基金面上项目(51872303)、中科院青年创新促进会项目(2017342)等的资助。

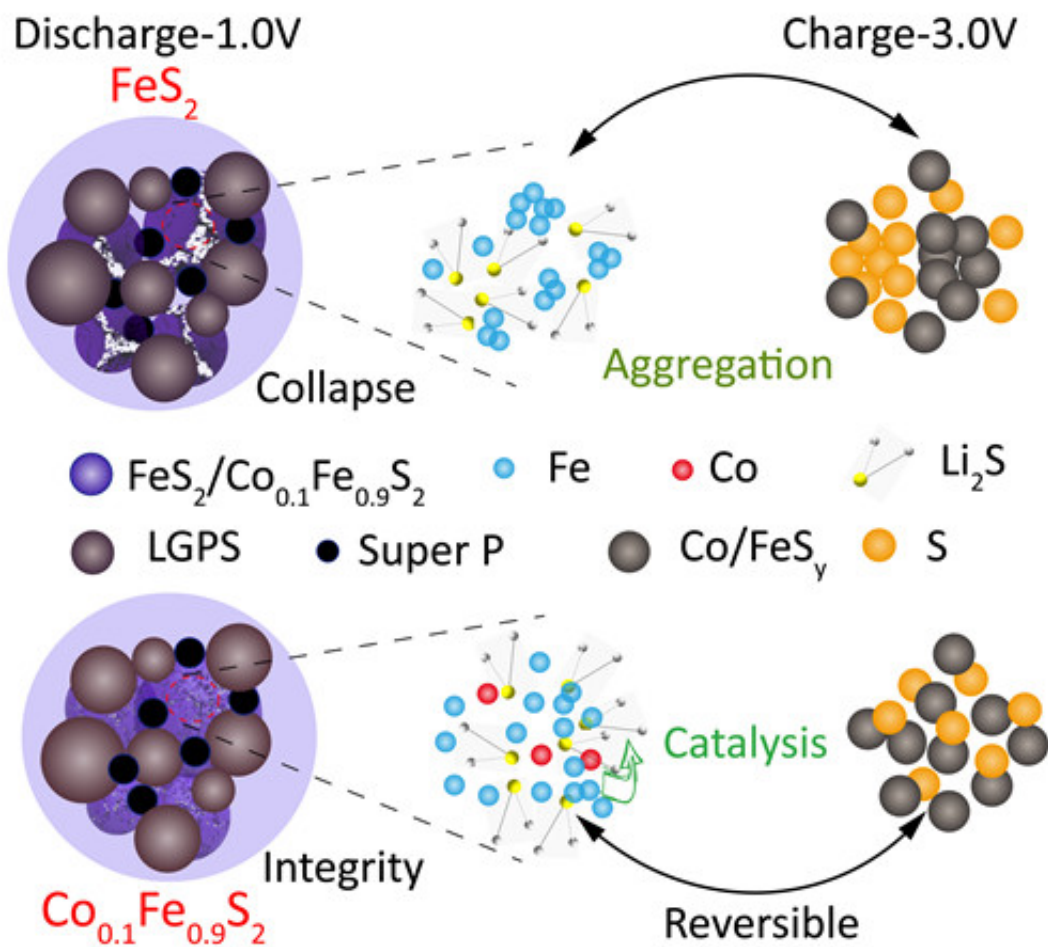


图1 Co对FeS2催化作用示意图

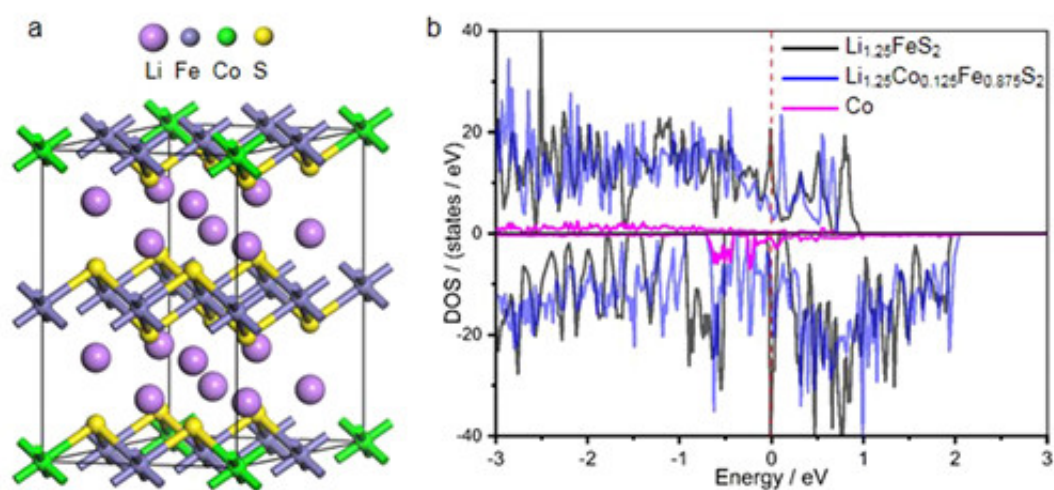


图2 (a) $\text{Li}_{1.25}\text{Co}_{0.125}\text{Fe}_{0.875}\text{S}_2$ 的结构图，(b) $\text{Li}_{1.25}\text{FeS}_2$ 和 $\text{Li}_{1.25}\text{Co}_{0.125}\text{Fe}_{0.875}\text{S}_2$ 的电子态密度图

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