[Highlight]

doi: 10.3866/PKU.WHXB201603141

www.whxb.pku.edu.cn

一种新型锂离子和钠离子电池两用二维负极材料

黄云辉

(华中科技大学材料科学与工程学院, 武汉 430074)

伴随着人们对于清洁、便携式能源需求的不断增长, 锂离子电池由于较高的能量密度以及较长的循环寿命一直成为学术界和产业界追逐的热点, 目前已广泛应用于各种便携式电子设备和电网储能, 特别是近年来在新能源汽车领域的商业化应用越来越迫切^{1,2}。众所周知, 锂离子电池的综合表现高度依赖其电极材料。现阶段广泛使用的负极材料是石墨, 石墨成本低廉且具有较好的综合性能, 但其较低的储锂容量满足不了新一代高比能电池的技术要求。其它负极材料如硅、氧化物等也都面临一些应用问题, 其中最突出的就是充放电过程中的体积膨胀及导电性较差, 这将导致循环寿命大幅度缩短。近些年来, 钠离子电池作为一种锂离子电池的替代储能器件获得了迅速的发展, 这主要是源于钠离子电池优秀的安全性、丰富廉价的原材料以及环境友好等特性³。因此如何设计和制备适用于新一代锂/钠离子电池两用负极材料同时具备较高的容量、优异的循环特性、快速充放电能力以及满足大规模使用的安全性, 是一个非常有益的课题。

鉴于二维单层材料具有平整的表面和较大的比表面积, 作为电池的负极材料是极有可能获得高能量密度和高迁移率。最近山东大学戴瑛教授领衔的团队通过第一性原理计算的方法在金属离子电池方面取得了重要进展⁴。该研究成果发表在最近的 *The Journal of Physical Chemistry Letters* 上。该团队设计并获得了一种可同时应用于锂/钠离子电池的优异负极材料——二维 Mo_2C ⁴。结果显示该单层材料具有极佳的动力学和热力学稳定性。在金属离子吸附的测试中, 该材料不仅可以作为锂离子电池的负极材料同时在钠离子电池中

也具有潜在的应用价值。据报道, 二维 Mo_2C 材料对于锂离子和钠离子的迁移势垒分别为 35 和 15 meV。这项结果显示出了该材料出色的迁移特性, 同时预示着在锂/钠离子电池的使用中将具有快速的充放电特性, 对比于广泛研究的 MXenes、石墨烯体系以及 MoS_2 等材料有着更加优秀的性能。此外, 在锂离子电池的测算中理论容量达到了 $526 \text{ mAh} \cdot \text{g}^{-1}$, 平均电极电位为 0.14 eV; 结构上吸附金属离子前后对整体材料体积的影响可以忽略不计, 而且吸附的锂离子层间分布着的类自由电子也进一步保证了锂离子的迁移, 这些性质都预示着二维 Mo_2C 将有可能成为非常优秀的负极材料。与此同时, 二维 Mo_2C 在对钠离子电池的应用中也表现出不俗的性能, 包括可观的容量以及合适的平均电极电位等。分析结果显示钠离子之间的排斥力和与表面的吸附形成了竞争的关系, 进一步表面修饰有望进一步提升其应用于钠离子电池时的电化学性能。因此, 二维 Mo_2C 材料将有希望在锂/钠离子电池领域成为下一代储能电池极具竞争力的电极材料, 该团队的工作将激发对这类材料的进一步研究开发及可能的实际应用。

References

- (1) Tang, Q.; Zhou, Z.; Shen, P. *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, 134 (40), 16909. doi: 10.1021/ja308463r
- (2) Dubal, D. P.; Ayyad, O.; Ruiz, V.; Gomez-Romero, P. *Chem. Soc. Rev.* **2015**, 44 (7), 1777. doi: 10.1039/C4CS00266K
- (3) Palomares, V.; Casas-Cabanas, M.; Castillo-Martinez, E.; Han, M. H.; Rojo, T. *Energy Environ. Sci.* **2013**, 6 (8), 2312. doi: 10.1039/c3ee41031e
- (4) Sun, Q.; Dai, Y.; Ma, Y.; Jing, T.; Wei, W.; Huang, B. *J. Phys. Chem. Lett.* **2016**, 7, 937. doi: 10.1021/acs.jpcllett.6b00171