[Highlight]

doi: 10.3866/PKU.WHXB201611011

www.whxb.pku.edu.cn

一氧化钛/碳复合空心球在锂硫电池中的应用

郭玉国

(中国科学院化学研究所, 分子纳米结构与纳米技术重点实验室, 北京 100190)

随着科技的发展和进步, 一些新兴的应用领域, 如电动汽车、消费电子、大规模储能电站等, 对二次电池的性能也提出了越来越高的要求, 传统的锂离子二次电池偏低的能量密度成为制约其在这些领域应用的瓶颈。开发基于新化学原理储能的高能量密度电池体系正成为全球范围内的研究热点。单质硫的理论比容量为 $1675 \text{ mAh} \cdot \text{g}^{-1}$, 与金属锂构建成锂硫电池时, 其理论能量密度高达 $2600 \text{ Wh} \cdot \text{kg}^{-1}$; 同时, 硫还是一种来源丰富、价格低廉、对环境友好的材料。因此, 锂硫电池被认为是最具发展前景的电池体系之一。尽管如此, 受限于单质硫的物化特性及锂硫电池电化学反应过程中固有的反应特性, 锂硫电池的商业化应用仍然面临诸多技术难点, 主要包括: (1) 单质硫的导电性差; (2) 反应中间产物多硫化锂在有机电解液中极易溶解流失, 导致电池循环稳定性变差和库伦效率降低; (3) 硫在锂化过程中有较大的体积膨胀。

在近期发表的 *Nature Communications* 论文中, 新加坡南洋理工大学楼雄文课题组及北京计算科学研究中心刘利民课题组报道了一种由一氧化钛和碳组成的空心纳米球($\text{TiO}@\text{C}$), 并将其作为硫的载体应用于锂硫电池¹。一氧化钛的电导率远高于二氧化钛及 Magnéli 相的亚氧化钛($\text{Ti}_n\text{O}_{2n-1}$, $n = 4-10$), 同时其化学稳定性又与亚氧化钛(Ti_4O_7)类

似。理论计算的结果表明, 相对于二氧化钛, 一氧化钛与多硫化锂之间的吸附结合能更强。但是, 考虑到极性材料对多硫化锂的化学吸附能力有一定的限度, 当硫含量较高时, 电极中的多硫化锂并不能全部都被有效吸附在极性基体材料的表面²。为此, 研究人员设计了空心纳米结构作为硫的载体。当硫被限制在由一氧化钛和碳共同构成的空心球内部后, 锂硫电池在循环过程中形成的多硫离子能够被有效地束缚在该极性结构内部而不易溶出。这种空心结构的设计最大化地利用了极性材料对多硫离子吸附的作用, 相对于常规的纳米颗粒, 基于该空心纳米球构筑的正极材料表现出了更好的循环稳定性和倍率性能。在硫的面负载量达到 $4 \text{ mg} \cdot \text{cm}^{-2}$ 时, 锂硫电池仍表现出良好的电化学活性和循环稳定性。

楼雄文等人的工作克服了硫正极材料的主要问题, 同时, 揭示了空心纳米结构在锂硫电池中的应用优势, 为锂硫电池正极材料的设计和合成提供了新思路。

References

- (1) Li, Z.; Zhang, J.; Guan, B.; Wang, D.; Liu, L. M.; Lou, X. W. *Nat. Commun.* **2016**, 7, 13065. doi: 10.1038/ncomms13065
- (2) Li, Z.; Wu, H. B.; Lou, X. W. *Energy Environ. Sci.* **2016**, 9, 3061. doi: 10.1039/C6EE02364A