[Recommendation]

doi: 10.3866/PKU.WHXB201903013

www.whxb.pku.edu.cn

探索氟代碳酸乙烯酯添加剂对钠离子电池正极的影响

刘忠范

北京大学化学与分子工程学院, 北京 100871

Insight into Effects of Fluoroethylene Carbonate Additive on the Cathode in Sodium Ion Batteries

LIU Zhongfan

College of Chemistry and Molecular Engineering, Peking University, Beijing 100871, P. R. China.

Email: zfliu@pku.edu.cn.

Published online: March 6, 2019.

储能技术已成为制约绿色新能源大规模开发利用的瓶颈技术, 作为便携式设备储能领域最受欢迎的高能量密度锂离子二次电池因受限于锂资源储量有限, 难以在新能源大规模储能市场中得以可持续发展¹。因此, 寻找可替代锂离子电池的二次电池成为一种必然发展趋势。钠与锂具有相似物理化学性能, 且其储量丰富, 因此近几年钠离子电池成为大规模储能市场的研究热点^{2,3}。然而受限于大的钠离子脱嵌带来的体积变化等原因, 钠离子电池的循环寿命与实际应用还有一定距离, 近年来领域内很多研究者致力于提高钠离子电池的循环稳定性^{4,5}。在电解液中添加添加剂已在锂离子电池中被证明是一种有效的提高电池循环稳定性的重要方法⁶。氟代碳酸乙烯酯(FEC)作为一种电解液添加剂, 具有较低的最低未被占据分子轨道(LUMO)能量, 易优先于其他电解液溶剂被还原, 通常被认为是很好的负极成膜添加剂, 在锂离子电池中得到广泛应用⁷, 也在钠离子电池中被证明对钠负极具有很好的成膜作用⁸, 然而, FEC对于钠离子电池正极的影响(有害或有益)尚未被研究过。鉴于此, 中国科学院苏州纳米技术与纳米仿生研究所陈立桅、沈炎宾等人以FEC对钠离子电池正极材料的影响为切入点, 深入研究了FEC对于层状钠离子正极材料P2-Na_xCo_{0.7}Mn_{0.3}O₂的影响。

该工作已在物理化学学报上在线发表(doi: 10.3866/PKU.WHXB201811033)⁹。该工作结合电

化学, 形貌分析, 化学成分表征, 原位结构分析等方法研究了FEC添加剂在钠离子电池中的作用。作者发现适量的FEC添加剂不仅可以显著抑制电解液溶剂PC的分解, 而且会在正极上形成一层富NaF的保护层, 提高循环过程中正极晶格结构的稳定性, 从而提高电池的循环稳定性。密度泛函理论(DFT)计算表明, FEC之所以能在正极上形成保护层, 可能与其容易在正极界面与钠盐阴离子ClO₄⁻结合反应有关。该工作为对设计及开发新的二次电池电解液添加剂起到了很好的启发作用。

References

- (1) Etacheri, V.; Marom, R.; Elazari, R.; Salitra, G.; Aurbach, D. *Energy Environ. Sci.* **2011**, *4*, 3243. doi: 10.1039/c1ee01598b
- (2) Hong, S. Y.; Kim, Y.; Park, Y.; Choi, A.; Choi, N. S.; Lee, K. T. *Energy Environ. Sci.* **2013**, *6*, 2067. doi: 10.1039/c3ee40811f
- (3) Palomares, V.; Serras, P.; Villaluenga, I.; Hueso, K. B.; Carretero-Gonzalez, J.; Rojo, T. *Energy Environ. Sci.* **2012**, *5*, 5884. doi: 10.1039/c2ee02781j
- (4) Cao, Y.; Xiao, L.; Wang, W.; Choi, D.; Nie, Z.; Yu, J.; Saraf, L. V.; Yang, Z.; Liu, J. *Adv. Mater.* **2012**, *24*, 1205. doi: 10.1002/adma.201100904
- (5) Yabuuchi, N.; Hara, R.; Kajiyama, M.; Kubota, K.; Ishigaki, T.; Hoshikawa, A.; Komaba, S. *Adv. Energy Mater.* **2014**, *4*, 1301453. doi: 10.1002/aenm.201301453
- (6) Lee, Y. J.; Kim, H.; Kang, K.; Choi, N. S. *J. Power Sources* **2016**, *320*, 49. doi: 10.1016/j.jpowsour.2016.04.070

-
- (7) Zhang, X.; Cheng, X.; Chen, X.; Yan, C.; Zhang, Q. *Adv. Funct. Mater.* **2017**, *27*, 1605989. doi: 10.1002/adfm.201605989
- (8) Komaba, S.; Ishikawa, T.; Yabuuchi, N. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2011**, *3*, 4165. doi: 10.1021/am200973k
- (9) Cheng, Z.; Mao, Y.; Dong, Q.; Jin, F.; Shen, Y.; Chen, L. *Acta Phys. -Chim. Sin.* **2019**, *35* (8), 868. [程振杰, 毛亚云, 董庆雨, 金峰, 沈炎宾, 陈立桅. 物理化学学报, **2019**, *35* (8), 868.] doi: 10.3866/PKU.WHXB201811033