

2022年高能所博士后学术交流会

汇报人：刘 伟

合作导师：殷 雯 研究员

部 门：中子科学部

邮 箱：liuw@ihep.ac.cn

报告日期：2022.06.30

目 录

1

研究背景

2

研究经历

3

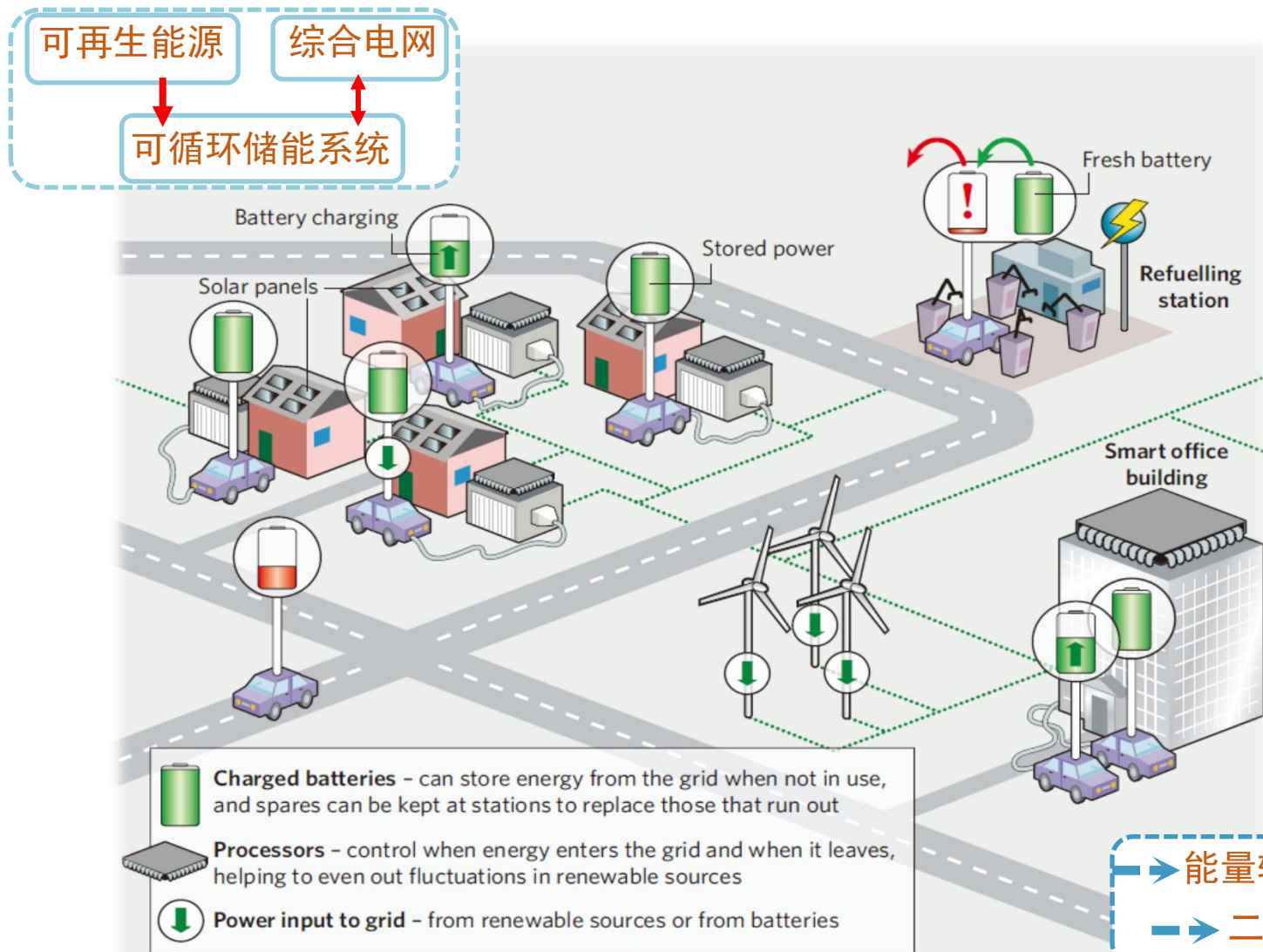
研究内容

4

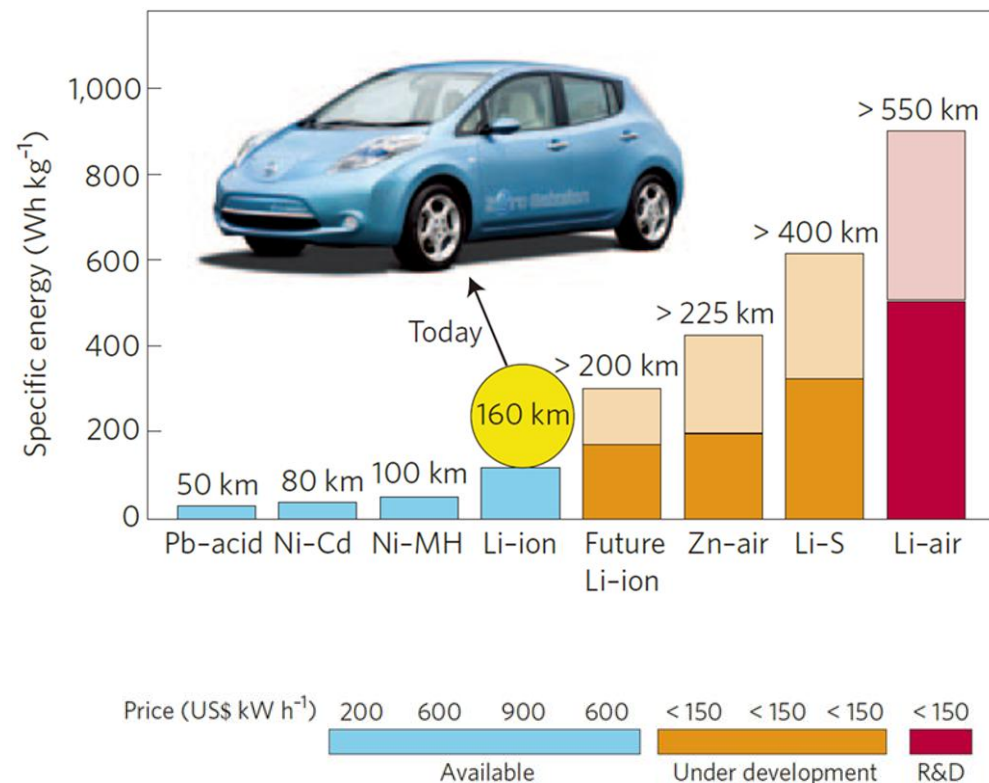
致 谢

1、研究背景

新能源在未来人类生产和生活的愿景



二次电池储能体系的能量密度



→ 能量转换与存储是关键
→ 二次电池是核心技术

2、研究经历-锂空位调节锂氧气电池中的电子/离子传输

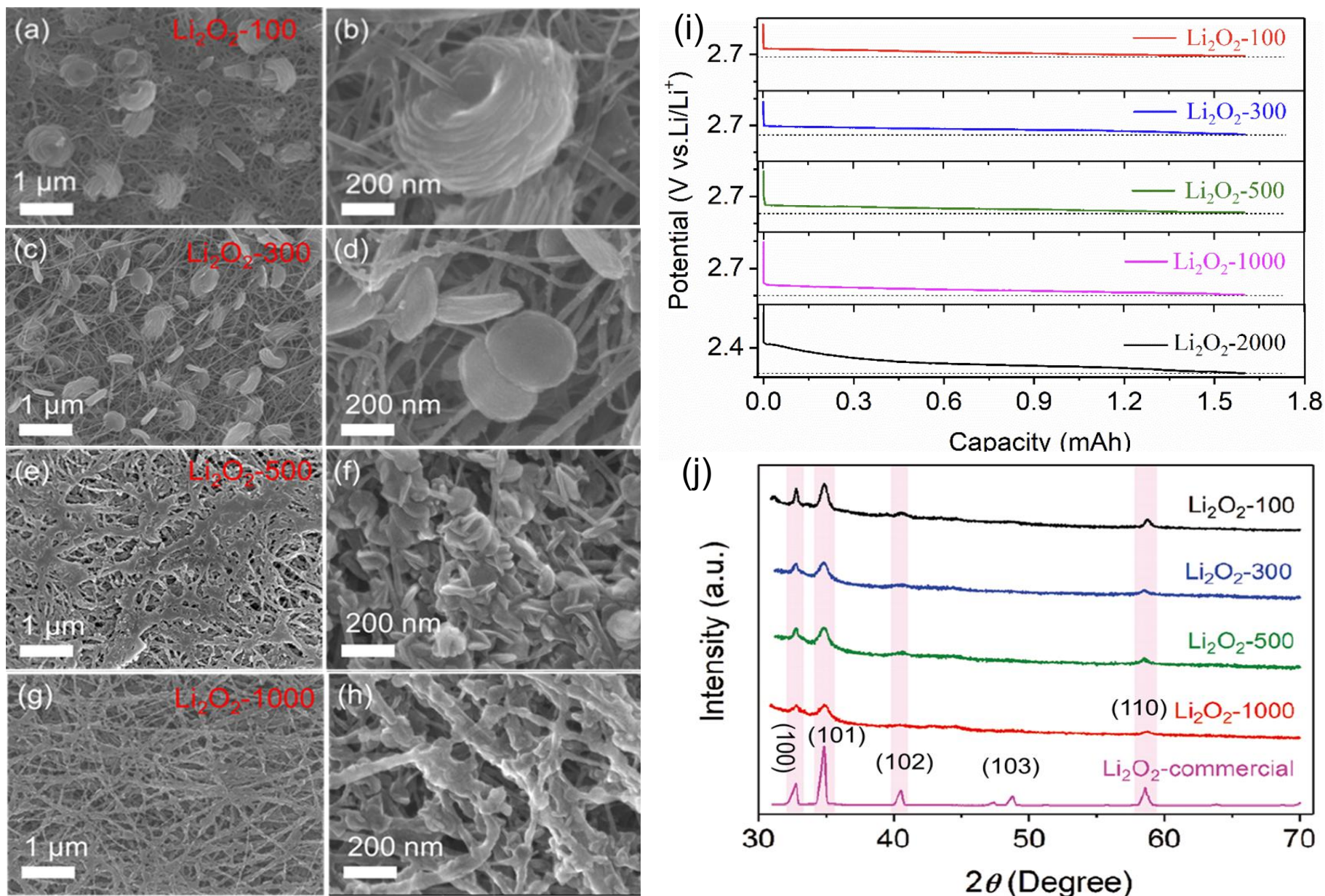


图1. 锂-氧气电池不同电流密度下的放电产物SEM图:

(a, b) 100 mA g^{-1} ,
(c, d) 300 mA g^{-1} ,
(e, f) 500 mA g^{-1} ,
(g, h) 1000 mA g^{-1} ,
(i) 容量为1.6mAh的电压-容量图,
(k) 不同电流密度下的放电产物XRD图。

2、研究经历-锂空位调节锂氧气电池中的电子/离子传输

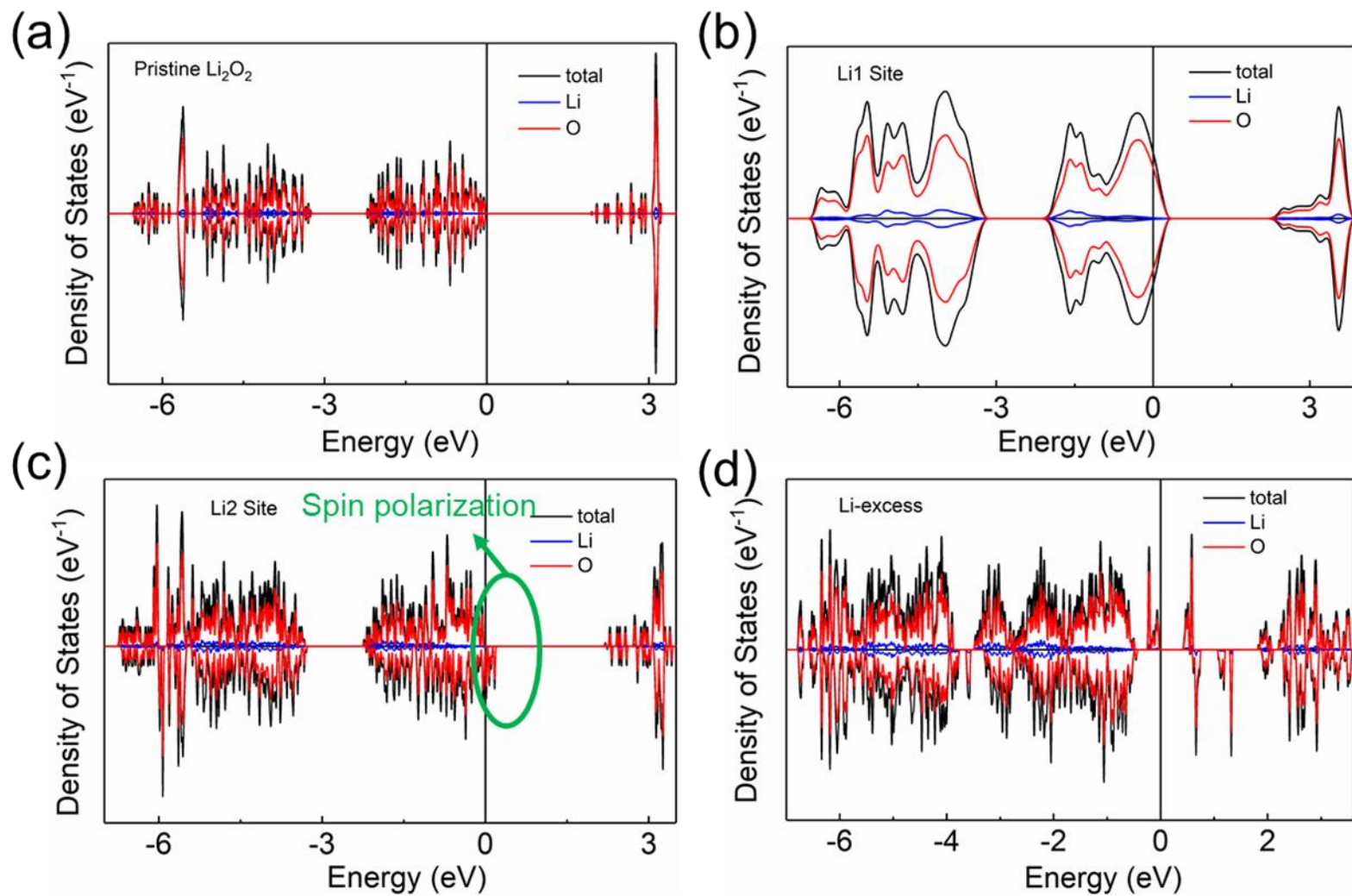


图2. 第一性原理的计算 Li_2O_2 在不同情形下的导电性情况, (a) Li_2O_2 的本征态, (b) 在 Li_2O_2 的Li1位置出现空位, (c) 在 Li_2O_2 的Li2位置出现空位, (d) 在 Li_2O_2 中出现富锂。

2、研究经历-锂空位调节锂氧气电池中的电子/离子传输

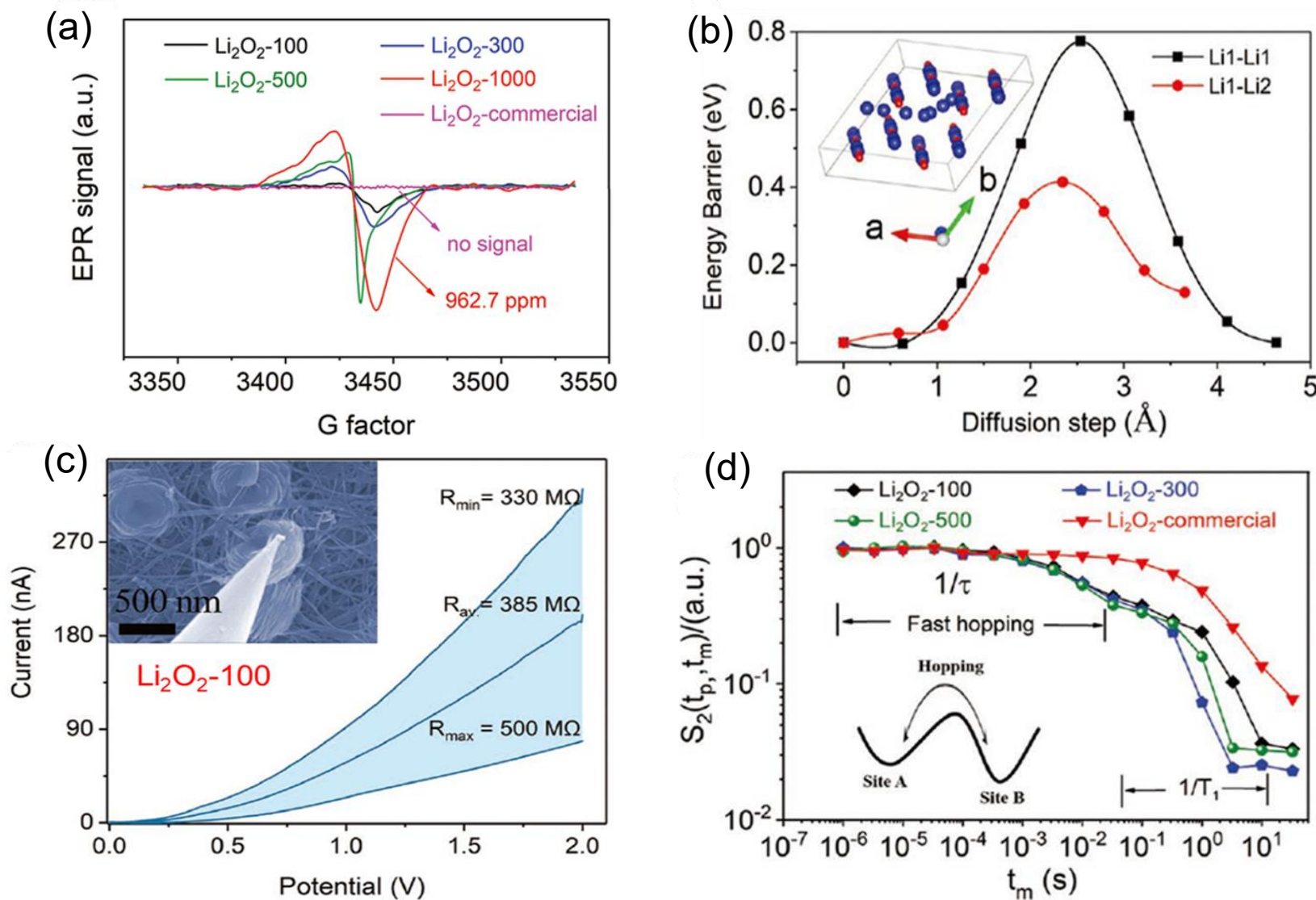
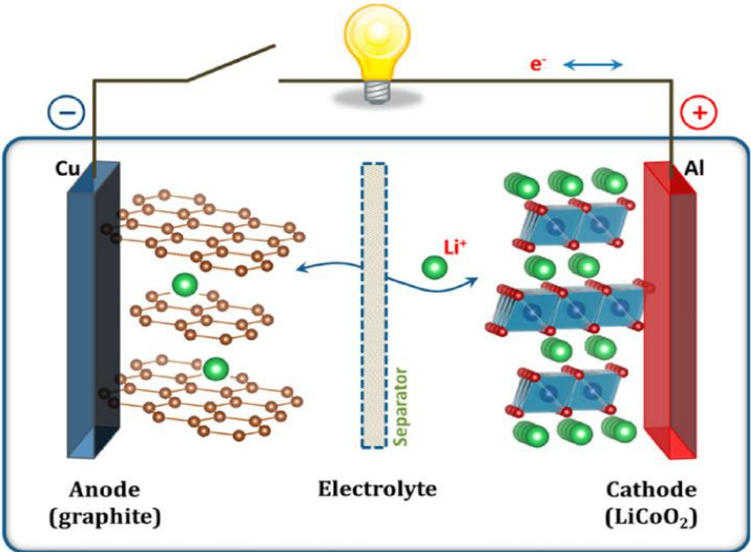
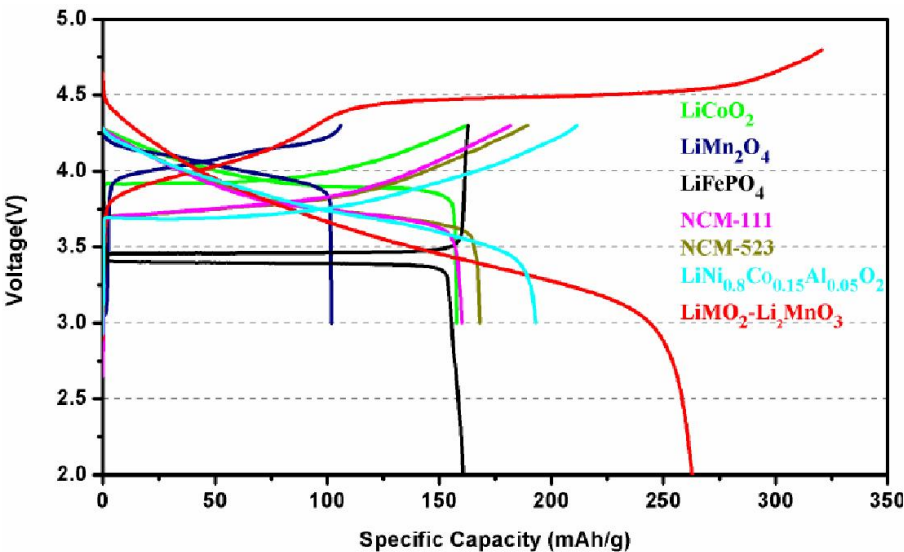


图3. (a) 电子顺磁共振表征不同放电电流密度下的锂空位浓度, (b) 模拟 Li_2O_2 中Li的跃迁路径, (c) Li_2O_2 的导电性表征, (d) 固态核磁自旋回波技术表征 Li_2O_2 中Li离子传输速率。

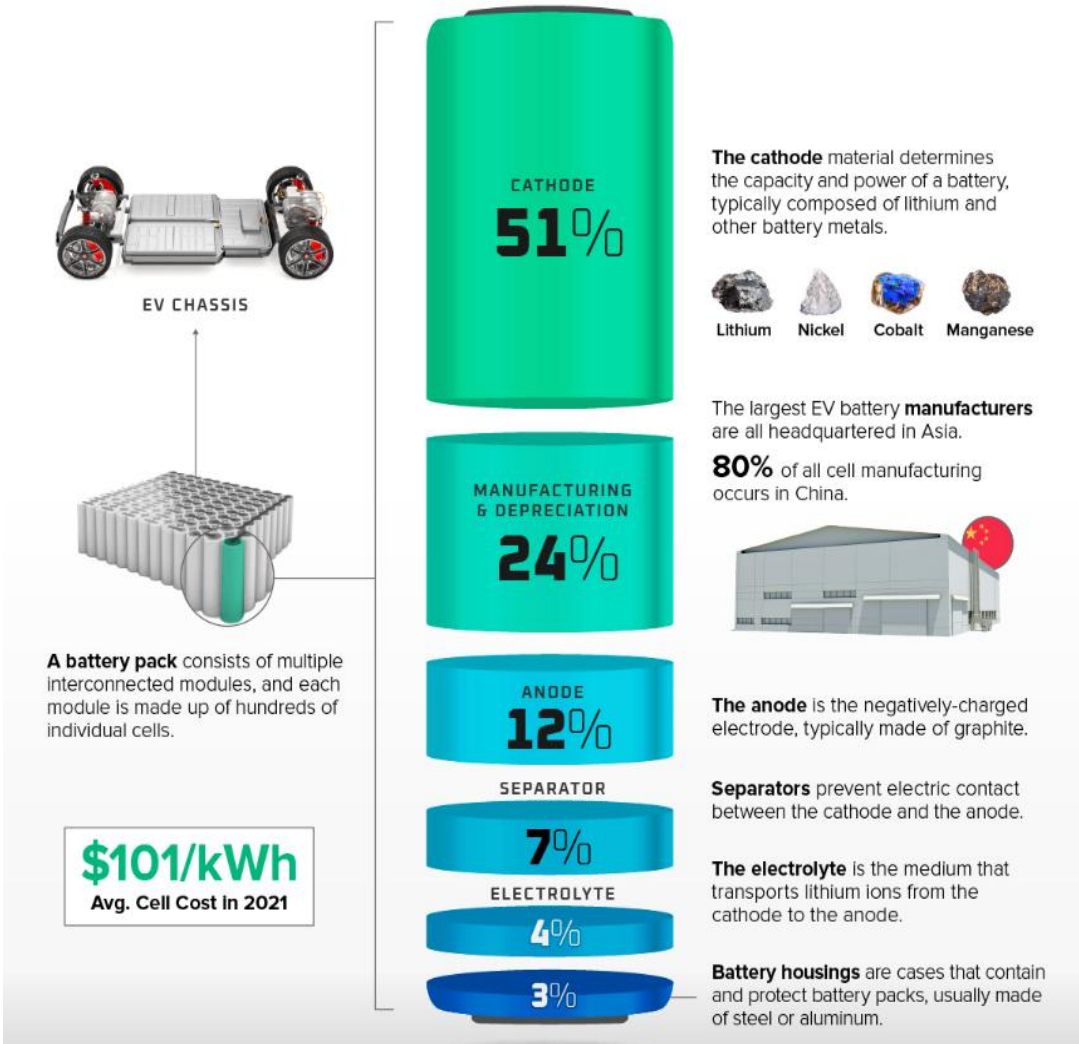
3、研究内容-富锂锰基三元正极材料的改性研究



锂离子电池的结构示意图



不同正极材料充放电容量-电压对比



电池的成本分解

富锂锰基三元正极材料存在的科学问题及研究热点：

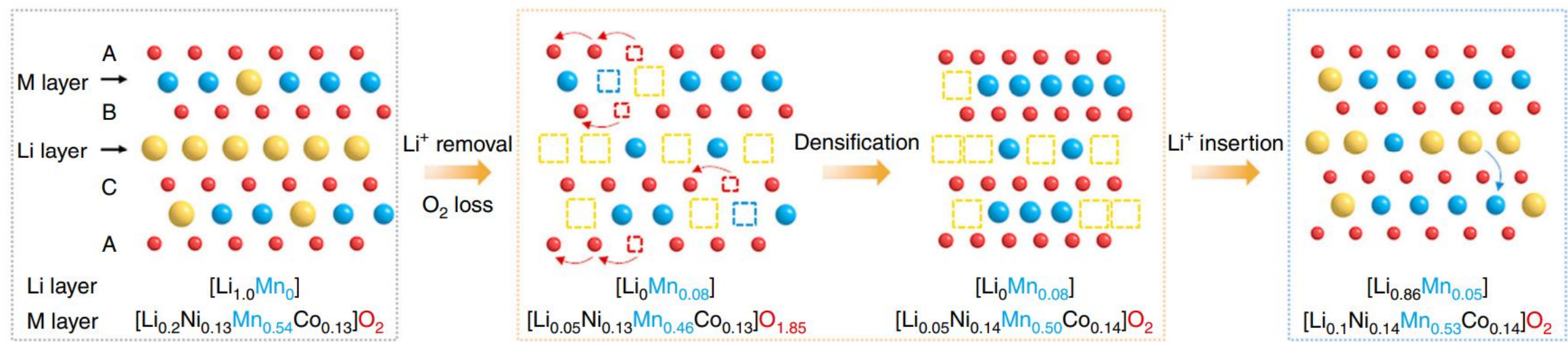
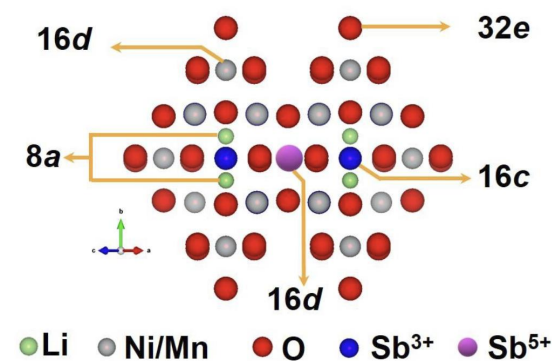


图4. 三元正极材料在首圈充放电过程中的相转变及阳离子迁移示意图

表1. 三元正极材料中部分阳离子半径对比图

Ions	IV Coordination (tetrahedral)	IV Coordination (octahedral)
Li^+	$0.69 \text{ \AA}$	$0.76 \text{ \AA}$
Mn^{4+}	$0.39 \text{ \AA}$	$0.53 \text{ \AA}$
$\text{Sb}^{3+} = 0.76 \text{ \AA}$		$\text{Sb}^{5+} = 0.60 \text{ \AA}$



3、研究内容-富锂锰基三元正极材料的改性研究

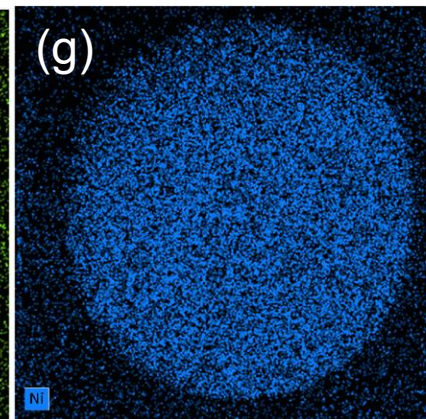
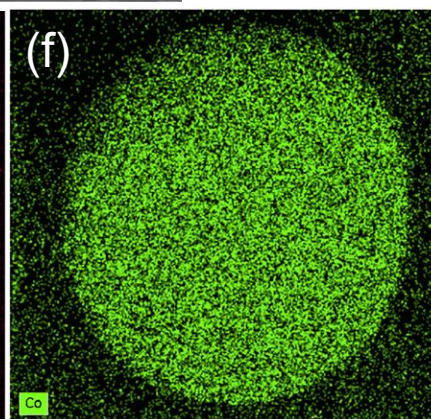
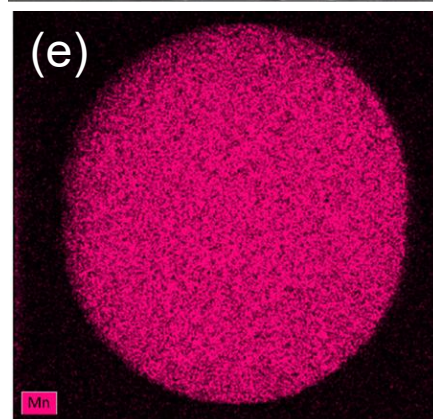
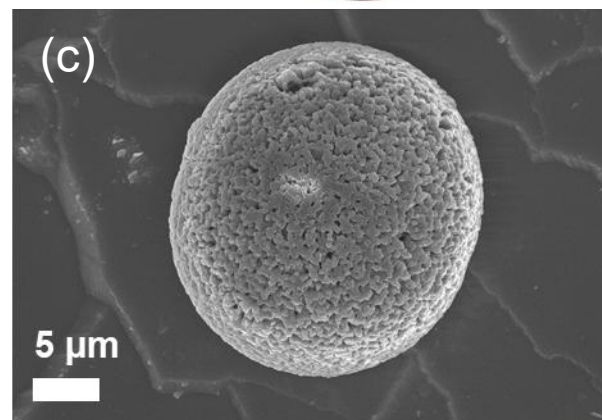
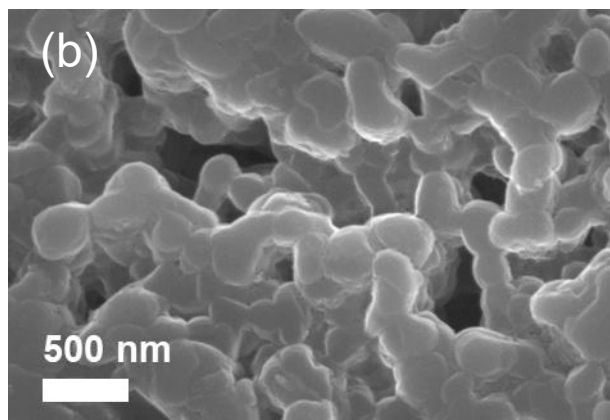
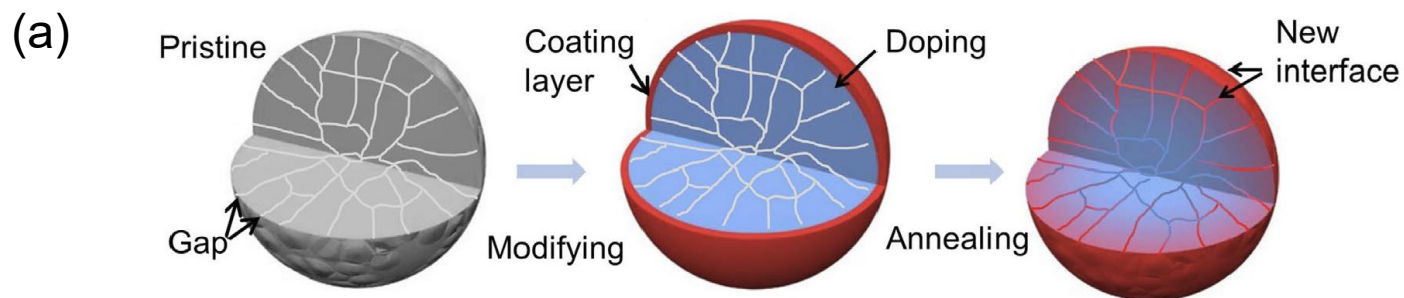


图5. (a) 富锂锰基三元正极材料 ($\text{Li}_{1.2}\text{Ni}_{0.13}\text{Co}_{0.13}\text{Mn}_{0.54}\text{O}_2$, LNCM) 修饰改性示意图, (b-g) LNCM不同放大尺寸的SEM及mapping图。

3、研究内容-富锂锰基三元正极材料的改性研究

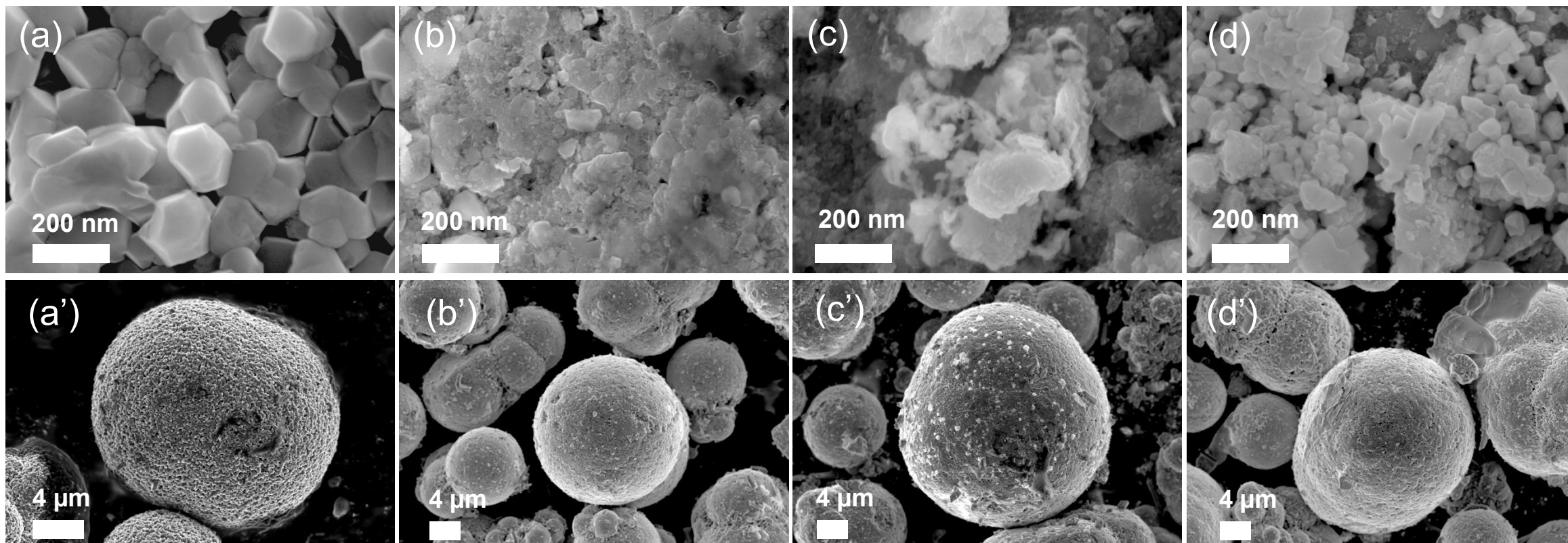


图6. LNCM与不同含量Sb掺杂在不同放大倍数下的SEM图：（a, a'）为LNCM空白对照组，（b, b'）为质量分数1% Sb掺杂的LNCM（Sb-LNCM-1），（c, c'）为质量分数3% Sb掺杂的LNCM（Sb-LNCM-3），（d, d'）为质量分数5% Sb掺杂的LNCM（Sb-LNCM-5）。

3、研究内容-富锂锰基三元正极材料的改性研究

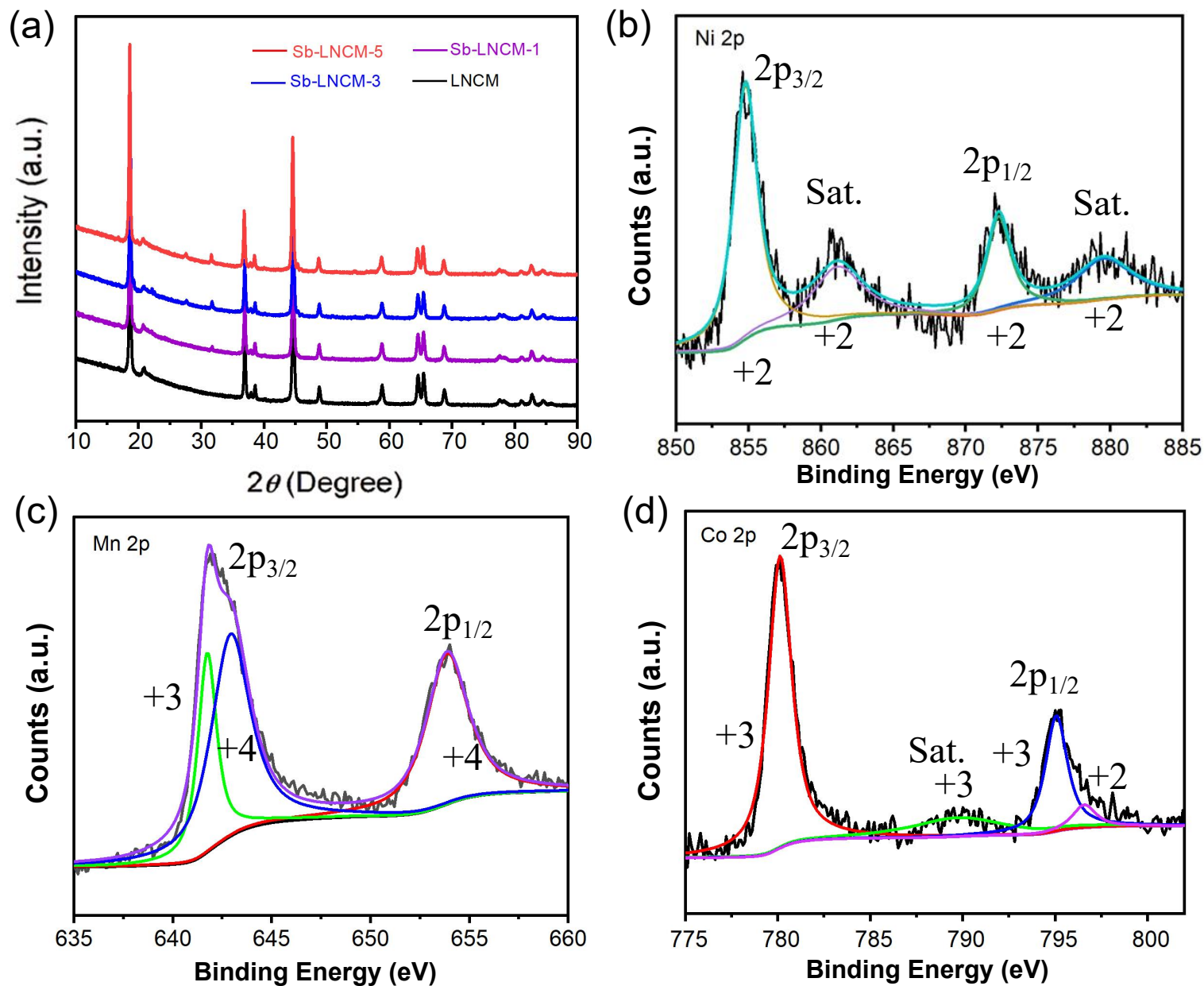


图7. (a) LNCM与不同含量Sb掺杂的XRD对照图谱, (b ~ d)为LNCM中Ni 2p, Co 2p, Mn 2p的XPS谱图。

3、研究内容-富锂锰基三元正极材料的改性研究

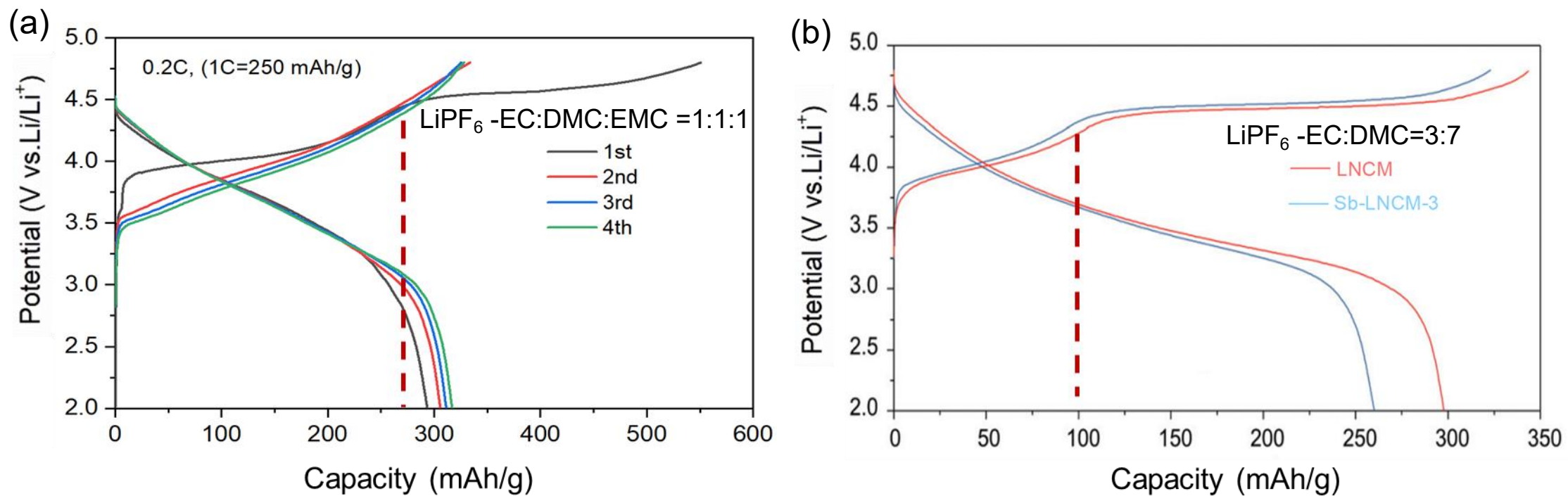
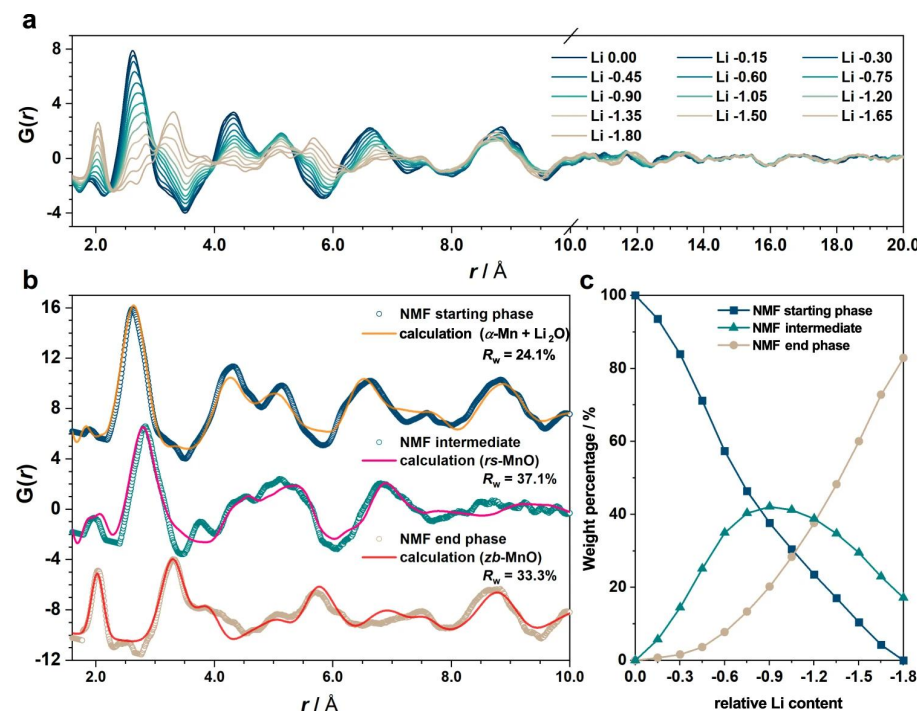
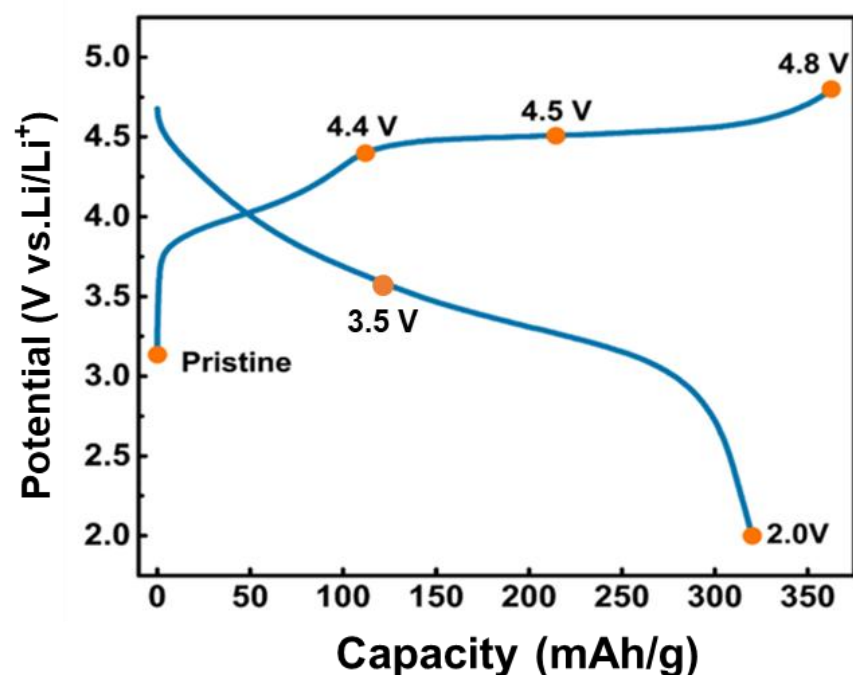


图7. (a, b) LNCM与Sb-LNCM-3在不同电解液条件下的电压-比容量对比图。

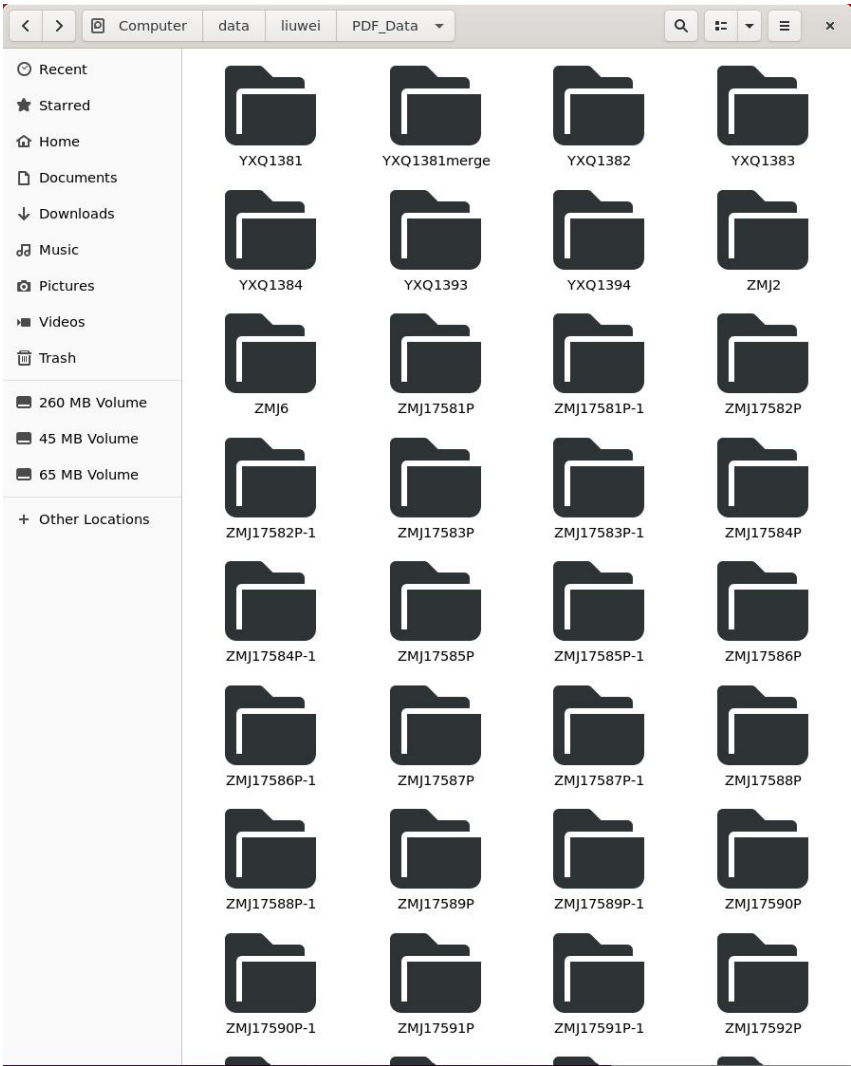
3、研究内容—富锂锰基三元正极材料的改性研究

工作计划:

- 进一步完善材料形貌结构等表征，以及材料的充放电和电化学性能测试；
- 对比元素掺杂和界表面修饰对材料电化学性能和结构稳定性的影响；
- 利用中子全散射技术，深入解析特定电压条件下（开路电压下、2.0 V、3.5 V、4.4 V、4.5 V以及4.8 V等），材料发生的结构相变以及晶体结构的演化；



承担相关电池用户数据处理



参与组内及个人基金项目申报

项目编号: 2021YFA1600700

密 级: 公开

国家重点研发计划

项目任务书

项目名称:

高强韧金属基复合材料的跨尺度组织原位探测与集成调控

所属专项:

大科学装置前沿研究

指南方向(榜单任务):

6.2 粒子流、先进光源新实验技术研究

创新分类:

基础研究

项目管理专业机构:

科学技术部高技术研究发展中心

推荐单位:

中国科学院

项目牵头承担单位:

中国科学院金属研究所 (公章)

项目负责人:

肖伯律

执行期限:

2022 年 01 月 至 2026 年 12 月

中华人民共和国科学技术部制

其他参与单位	序号	单位名称	单位性质	组织机构代码
	1	中国科学院上海高等研究院	事业型研究单位	121000007178346862
	2	南京工业大学	大专院校	1232000046600680XN
	3	散裂中子源科学中心	事业型研究单位	124419006614719858
	4	上海交通大学	大专院校	1210000042500615X0
	5	大连理工大学	大专院校	12100000422436090K

- 感谢多物理谱仪殷雯研究员的指导和提供的优秀科研环境！
- 感谢博士期间郭再萍教授、黄云辉教授和麦立强教授的指导和帮助！
- 感谢课题组徐菊萍师姐、夏远光师兄和陈怀灿师兄的帮助和指导！
- 感谢高能所和散裂中子源科学中心的良好科研平台！



殷雯



徐菊萍



夏远光



陈怀灿

感谢各位评委老师
批评指正！

