



当前位置: [交大新闻网](#) → [科研动态](#)

## 我校参与完成的一项成果在Science发表

来源: 交大新闻网 日期2010-12-13 11:16 点击: 5182

2009-2010学年学生表彰奖励...

教育部赴西安交通大学巡视组...

首届微软亚洲研究院-C9高校...

我校与兵器集团公司联合举办...

钱学森日: 纪念一位伟人, 就...

中国社会科学报: 争创一流学...

我校参加《钱学森故事》一书...

“自动化技术应用现状与发展...

王锡凡院士“能源电力和我国...

第25届“最佳团日”落幕

我校自主招生30日起接受报名

2010西安交通大学模拟联合国...

学校检查人文、法学院学习实...

学校党委组织学习《普通高等...

学会包容——郑南宁校长在优...

近日, 我校金属材料强度国家重点实验室和前沿科学技术研究院齐亮博士和李巨教授, 与美国圣地亚国家实验室Jianyu Huang, 匹兹堡大学Scott Mao, 西北太平洋国家实验室Chong Min Wang等研究人员合作, 对锂离子电池负极的充放电过程进行了开创性的研究。他们通过原位高分辨透射电子显微镜技术, 首次在纳米尺度上实现对负极材料的充/放电过程的实时观测, 发现了锂离子嵌入过程中负极材料形貌和结构的奇特变化, 提出了相应的微观反应机制并通过第一性原理计算加以证实。该项结果已发表在2010年12月10日的《Science》杂志上, 同期杂志还附有锂离子电池领域的权威人士、美国麻省理工学院Yet-Ming Chiang教授对该论文的专题评述。

锂离子电池是利用锂离子在正极和负极材料中不同的化学势差来储藏和释放能量的一种电化学能量转换装置。充电过程中, 正极释放锂离子和电子; 锂离子穿过正负极之间的电解质, 在负极材料与充电源供给的高势能电子结合形成稳定化合物以储藏能量。在放电过程中, 负极材料释放锂离子和电子, 锂离子通过电解质回到正极, 电子通过外电路回到势能更低的正极从而对外释放能量。相对传统的镍氢电池, 锂离子电子拥有高能量和功率密度以及无记忆效应等一系列优点, 在手机、笔记本电脑等便携式电器和电动汽车等领域发挥了重要的作用。但如何进一步提高其能量和功率密度(目前锂离子电池汽车充电一次能行驶100~150公里, 远低于传统内燃机汽车加满汽油后600~800公里的行驶), 大幅度降低充电时间, 以及解决在多次使用后容量退化和可靠性问题, 成为限制锂离子电池进一步应用的瓶颈。研究锂离子电池充放电的基本微观机制, 从根本上找出可能导致电池老化失效的原因已经成为新一代高性能电池的必行之路。

为了从原子尺度上理解纳米材料在锂离子电池中的特殊性能, 本论文的 authors 设计了一套世界上最小的锂离子电池, 其中负极材料仅是一根直径100纳米10微米长的单晶二氧化锡纳米线, 纳米线的一端浸入的耐真空的电解质中并与电解质另一端作为正极的钴酸锂形成一套开放的电池系统。他们使用高分辨透射电子显微镜对该电池的充放电过程进行实时观察, 发现在锂离子从电解质嵌入纳米线时会导致其剧烈的膨胀, 延展和卷曲变形; 但与二氧化锡块体的低塑性完全不同, 不管变形如何剧烈, 该纳米线在充放电过程中始终保持结构的完整性, 这进一步验证了纳米材料作为电极的优越性能。微观结构上, 已膨胀的纳米线会给邻近未完全反应的区域施加巨大的拉应力, 导致反应前端形成一个含有高密度流动位错的“美杜莎区”(Medusa, 希腊神话中的女妖, 其头发都是扭动的长蛇, 如同本次试验中观测到的流动的云状位错网)产生。这些流动位错既可以作为锂离子嵌入纳米线的快速通道, 使反应前端继续沿着纳米线轴向扩展, 同时又破坏纳米线的晶体结构, 使其在大量嵌入锂离子后发生固态非晶化转变; 而这些新生成的非晶体又吸收已形成的位错, 使“美杜莎区”永远保持在反应前端。这些实时的观测实验揭示了由于锂离子嵌入/输出导致的机械性能和结构变化的反应机制, 并建立一整套纳米尺度的电池构造和观测方法, 对设计具有高能量密度和高寿命的新型电池材料的研究有开创性的指导意义。另外, 该电池有望在封装后单独用做纳米装置的动力源。

在研究过程中, 齐亮博士和李巨教授对实验结果进行了严格的理论分析。他们使用第一性原理计算工具和模拟退火算法, 获得与实验结果一致的二氧化锡体积膨胀率, 并考虑纳米线在大尺度上的弹性变形, 解释了实验所观察到的纳米线体积膨胀的各向异性。同时通过对二氧化锡理论强度的计算, 验证了反应前端产生高密度流动位错云的可能性, 并解释了该位错结构对纳米材料的机械变形和结构转化的关键性作用。最后通过第一性原理和分子动力学的计算, 得到与实验相符的锂离子在纳米线中的扩散系数, 验证了锂离子在已反应的纳米线块体中的扩散是整个充电过程的最重要的限速步骤, 为将来设计可快速充电的电极材料提供了理论依据。

该项研究得到了我校卓越团队计划的资助。齐亮博士的工作是今年暑假在我校工作期间做出的。李巨教授是我校材料学院院长江学者讲座教授。

文章作者: 材料学院

责任编辑: 星火

稿件管理 | 在线投稿 | 联系我们  
西安交通大学新闻网 制作维护: 腾飞工作室  
热线电话: 86-29-82663865 86-29-82668246  
86-29-82665290  
陕ICP备0211991号 西安交通大学网络中心提供网络带宽

### 相关文章

- [“Web of Science”学术讲座举行](#)
- [我校校友吕心力论文在《Science》上发表](#)

发表评论:  匿名发表 用户名:  [查看评论](#)