

锂离子电池材料的电化学原位 XRD 及 XAFS 研究

The Study of Electrode Materials for Lithium-Ion Batteries by Electrochemical In-Situ XRD and XAFS Techniques

龚正良¹, 张炜², 吕东平², 郝晓罡², 文闻³, 姜政³, 杨勇^{1,2,*}

(¹厦门大学能源研究院, 福建 厦门 361005)

(²厦门大学化学系, 固体表面物理化学国家重点实验室, 福建 厦门 361005)

(³中国科学院上海应用物理研究所, 上海 201204)

同步辐射光源及其相关的谱学技术因为其高亮度、单色性好以及能量可调等突出特点, 为锂离子电池材料组成-结构-性能关系的解析, 尤其是充放电循环过程的电化学反应机理、电池老化过程及失效机理的原位、实时动态研究提供了强有力的分析手段. 本文介绍了本课题组基于上海同步辐射光源所开展的锂离子电池电极材料电化学原位 X 射线衍射(XRD)与 X 射线吸收精细结构(XAFS)研究工作. 如结合原位 XRD 及 XANES 的研究结果解释了我们所合成 $\text{Li}_2\text{FeSiO}_4$ 及 $\text{Li}_2\text{Mn}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{SiO}_4$ 超过一个锂离子逆脱嵌过程中材料结构变化及电化学反应机理^[1,2]. 利用同步辐射原位 XRD 对 $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_2\text{F}_3$ 的研究表明电极反应按固溶体嵌入-脱出反应机理进行, 充放电过程中材料具有优异的结构稳定性. 利用原位 XAFS 研究了 FeF_3 材料充放电过程电荷补偿机制、反应过程中的相组成和结构变化^[3]. XANES 谱提供了丰富的关于 FeF_3 材料放电或充电反应过程的信息, 根据各个放电态的吸收谱所表现出来的共吸收点的位置, 并结合非原位 XRD 结果, 可以清楚地证明该电极材料不同的嵌锂阶段, 即在 0-2.78 Li 范围存在两个反应阶段: 0-0.92 Li 的嵌脱型反应阶段和 0.92 - 2.78 Li 的转化型反应阶段. EXAFS 结果比较直观定量地反映了 FeF_3 与 Li 的反应过程中 Fe-F、Fe-Fe 键长和配位数的变化规律以及相应的结构演变信息^[4].

参考文献: (5号宋体)

- [1] Lv D, Bai J, Zhang P, *et al.* Chem. Mater., 2013, 25: 2014-2020.
- [2] Lv D, Wen W, Huang X K, *et al.* J. Mater. Chem., 2011, 21: 9506-9512.
- [3] 郝小罡, 刘子庚, 龚正良, 等. 中国科学:化学, 2012, 42: 38-46.
- [4] Zhang W, Duchesne P N, Gong Z, *et al.* J. Phys. Chem. C, 2013, 117: 11498-11505.

资助项目: 国家重点基础研究发展计划“973”(2011CB935903和2007CB209702)和国家自然科学基金(21233004和21021002)资助以及上海同步辐射光源(SSRF)光源开放课题的支持

*通讯作者: 杨勇, 电子邮箱: yyang@xmu.edu.cn.

第一作者简介: 龚正良, 博士, 厦门大学助理教授, 2007年毕业于厦门大学化学系, 获理学博士学位. 2008年8月-2010年7月在新加坡国立大学进行博士后研究. 目前主要研究方向为应用电化学、化学电源、新型储能材料. 电子邮箱: zlgong@xmu.edu.cn.