

编号: CDUT-2020-4

中文标题: 合理的提出氧空位在锂-氧电池中的电催化作用。

英文标题: Rationalizing the Effect of Oxygen Vacancy on Oxygen Electrocatalysis in Li-O₂ Battery

入藏号:

中国科学院文献情报中心期刊分区 (升级版): 材料科学 1 区/TOP

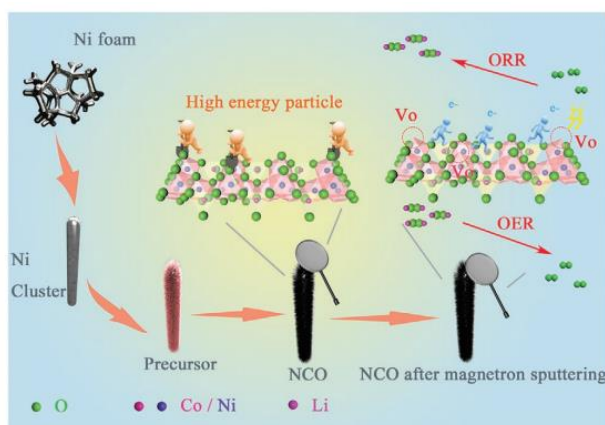
作者: 李嘉宝, 舒朝著, 刘春海, 陈先飞, 胡安俊, 龙剑平

来源出版物: small 卷: 16

DOI:10.1002/smll.202001812 出版年: June 18, 2020

第一地址: 成都理工大学

关键词:



摘要: 尽管表面氧空位在改善锂-氧电池氧氧化还原反应中的有效性, 但这一改善背后的根本原因仍不清楚。这里, 尖晶石 NiCo₂O₄ 中氧空位的浓度首先通过磁控溅射来调节, 在实验和密度泛函理论 (DFT) 计算的基础上, 全面研究了锂氧电池的催化活性与氧空位的关系。氧空位产生的正效应来源于相对于费米能级 (E_f) 向上移动的反束缚轨道, 它在 E_f 周围提供了额外的电子态, 最终增强了氧的吸附和氧化还原反应中的电荷转移。然而, 过多的氧空位会出现负的影响, 因为由于电中性原则金属离子大多被还原为低价。这不仅使晶体结构不稳定, 而且削弱了从 Li₂O₂ 的反键轨道捕获电子的能力, 导致析氧反应 (OER) 有较差的催化活性。

文章链接地址: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/smll.202001812>