

编号: CDUT-2020-9

中文标题: 硫族元素表面功能化的 $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{X}_2$ ($\text{X} = \text{O}, \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) 作为高性能的锂离子电池阳极材料

英文标题: Chalcogenated- $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{X}_2$ MXene ($\text{X} = \text{O}, \text{S}, \text{Se}$ and Te) as a high-performance anode material for Li-ion batteries

入藏号: WOS:000504658100011

中国科学院文献情报中心期刊分区 (升级版): 工程技术 二区/Top

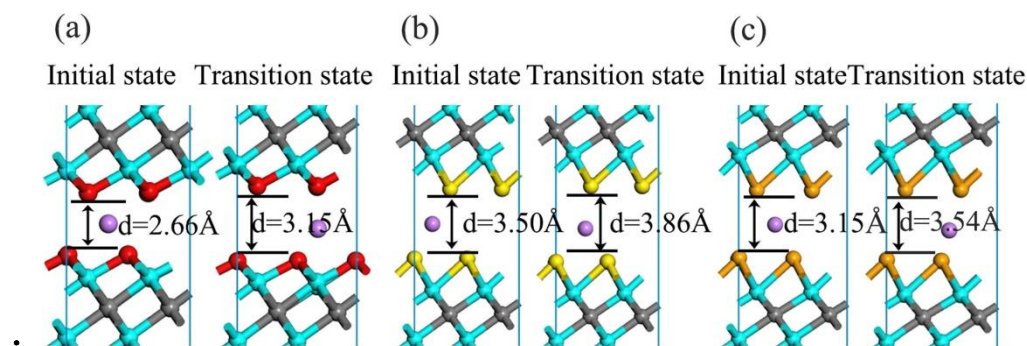
作者: 李德桥, 陈显飞, 向盼, 杜海英, 肖蓓蓓

来源出版物: APPLIED SURFACE SCIENCE 卷 501, 文献号: 144221

第一地址: 成都理工大学

关键词: 硫属原子功能化的 $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{X}_2$, 第一原理计算, 锂离子电池阳极, 扩大电极层间距

代表图



摘要: Ti_3C_2 MXene 中有限的层间间距和非理想的表面官能团类型不利于锂离子在电极中的嵌入和扩散, 导致电极材料的理论容量偏低。表面化学可以有效地调控固体的表面性质, 是一种改善二维电极材料电化学性能的重要手段, 因为锂离子主要存储于二维电极材料的表面。基于第一性原理计算, 本论文提出采用硫族原子对 Ti_3C_2 -MXene 进行表面功能化, 提高其作为锂离子电池阳极材料的电化学性能。研究表明功能化后的电极材料展示出良好的金属导电性和更好的机械强度, 可以承受因锂离子反复脱/嵌而产生的内应力, 避免产生电极粉化问题。与 $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{O}_2$ 相比, $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{S}_2$ 和 $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{Se}_2$ 中可以获得更高的锂离子容量 (462.6 mA h/g 和 329.3 mA h/g) 和更低的锂离子迁移能垒 (0.25 eV 和 0.15 eV)。此外, 硫族原子功能化后, 可以有效地提升电极的层间间距, 有利于锂离子

子的嵌入。目前的研究结果表明 S 和 Se 表面修饰的 Ti_3C_2 作为锂离子电池阳极材料具有高的容量、低的扩散能垒和低的开路电压。

文章链接地址：<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433219330375?via%3Dihub>