

数据论文

氮氧锚定的单原子铜掺杂石墨烯作为碱离子电池负极的理论预测研究*

胡军平^{1)2)†} 梁丝思¹⁾²⁾ 段惠贤¹⁾²⁾ 田俊程¹⁾²⁾ 陈硕¹⁾²⁾ 戴柏杨¹⁾²⁾
黄春来¹⁾²⁾ 刘宇¹⁾²⁾ 吕营¹⁾²⁾ 万利佳¹⁾²⁾ 欧阳楚英^{3)‡}

1) (南昌工程学院, 南昌市光电转换与储能材料重点实验室, 南昌 330099)

2) (南昌工程学院理学院, 南昌 330099)

3) (江西师范大学物理系, 计算材料物理实验室, 南昌 330022)

(2024 年 10 月 18 日收到; 2024 年 12 月 5 日收到修改稿)

合理设计高容量的新型电极材料是进一步提高离子电池能量密度的关键。石墨烯曾被认为是离子电池负极材料最有前景的候选者之一, 然而因纯的石墨烯与相应离子的相互作用较弱, 导致其理论比容量都不高。基于此, 本文通过第一性原理评估氮氧(N, O)锚定的单原子铜掺杂石墨烯的二维材料 Cu/NO₂G 作为锂/钠/钾离子电池负极的可行性。计算结果显示, Cu/NO₂G 在热力学和动力学上都是稳定的, 在吸附 Li/Na/K 前后均保持良好导电性, 并且 Cu/NO₂G 储存 Li/Na/K 的理论比容量分别高达 1639.9 mAh/g, 2025.8 mAh/g, 1157.6 mAh/g, 在 Li/Na/K 嵌入的过程中, 其晶格常数变化微小(<1%), 这预示着其循环稳定性佳。此外, Li, Na, K 在 Cu/NO₂G 表面上的迁移势垒分别为 0.339 eV, 0.209 eV 和 0.098 eV, 表明其具有优异的倍率性能。综上所述, 本文结果为合理设计金属单原子掺杂石墨烯作为碱金属离子电池的新型负极材料奠定了坚实的理论基础。本文数据集可在 <https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00063> 中访问获取。

关键词: 第一性原理, 离子电池, 石墨烯, 掺杂

PACS: 31.15.A-, 82.47.Aa, 81.05.ue, 74.62.Dh

DOI: [10.7498/aps.74.20241461](https://doi.org/10.7498/aps.74.20241461)

CSTR: [32037.14.aps.74.20241461](https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00063)

1 引言

为了面对全球气候变化, 目前超过 150 个国家做出碳中和承诺, 将近 50% 的碳中和技术转让发生在能源领域, 而储能是实现能源革命的关键支撑技术^[1,2]。因此, 急需创造更多的储能技术来匹配我们快速变化的世界。近年来的研究与发现, 锂离子电池(LIBs)具有高能量密度、长周期寿命、轻巧便携、环境友好的优点, 使得其成为便携式设备和电

动汽车中最合适的电能存储装置^[3,4]。然而, 由于全球能源绿色转型和锂资源的有限性, 使得近年来锂的价格急速上涨, 积极开发新型储能技术已成为必然趋势^[5]。

锂、钠和钾同属第一主族元素, 具有相似的化学性质。这一特性促进了钠离子电池(SIBs)和钾离子电池(KIBs)的发展。与锂离子电池相比, 钠离子电池和钾离子电池具有显著的资源和成本优势。地壳中锂的平均含量(质量分数)仅为 0.0017%, 且分布不均衡, 相比之下, 钠和钾的含量(质量分

* 国家自然科学基金(批准号: 12264029)和江西省自然科学基金(批准号: 20242BAB25033)资助的课题。

† 通信作者. E-mail: jphu@nit.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: cyouyang@hotmail.com

数) 分别高达 2.3% 和 1.5%, 远高于锂^[6]. 这使得钠离子电池和钾离子具有较好的成本优势, 更适合用于大规模储能系统. 尽管近年来许多研究报道钠离子电池和钾离子电池是锂离子电池潜在替代品, 然而高性能的负极材料的开发和实际需求却相差甚远^[7,8].

目前, 钠/钾离子电池的研究主要集中在制备合适的正极材料上, 而负极材料的发展则要缓慢得多^[9]. 作为电池中的关键组成部分, 负极材料的选择直接影响到电池的电化学性能和循环寿命. 但目前的钠/钾离子电池负极材料的相关研究主要集中在碳基材料和 IVA, VA 族金属化合物^[9]. 如石墨作为商用锂离子电池最常见的负极材料, 具有长程有序的层状结构^[10]. 石墨存储 Li 和 K 的可逆比容量分别为 372 mAh/g 和 273 mAh/g, 然而存储 Na 的容量低至 35 mAh/g^[6], 限制了其在钠离子电池中的应用. 硬碳作为最主流的钠离子电池负极材料, 不同前驱体制备的硬碳具有不同的特性、形貌和结构, 这使得不同结构的硬碳材料对金属离子的存储能力存在较大差异, 且目前大部分的硬碳负极材料的比容量在 300 mAh/g 左右^[11,12]. 如 Kuai 等^[13] 制备的生物质硬碳作为钠离子电池负极材料具有 303.8 mAh/g 的可逆比容量. Zhang 等^[14] 通过龙虾壳制备的硬碳材料作为钾离子电池负极可逆比容量为 277 mAh/g. 虽然金属复合负极材料表现出较高的电化学活性, 但往往伴随着较大的体积变化, 导致循环稳定性差^[15-17]. 因此, 寻找高性能且稳定负极材料对于这些可充电电池的基本应用起着至关重要的作用.

相较于 3D 材料, 2D 材料以其独特的 2D 结构和优异的电化学性能脱颖而出^[18]. 例如, 在最近的研究发现, 二维磷烯作为钠和钾离子电池的负极理论比容量均高达 865 mAh/g^[19], 碳化物 MXenes 材料 V₂C, Cr₂C, MoC₂, TaC 等碳化物 MXenes 材料作为锂离子电池负极材料的理论比容量分别为 940, 1386, 894, 556 mAh/g^[20-23]. 目前石墨烯及其衍生物、磷烯、过渡金属碳化物、氮化物和碳氮化物等二维材料在金属离子电池中均得到了广泛的探索^[11,12,24-26]. 石墨烯作为使用最广泛的二维材料, 其具有柔韧性、高导电性、高比表面积^[27,28], 例如, 石墨烯的储 Li 理论比容量高达 744 mAh/g. 实际上本征石墨烯的储锂能力与其理论值相差甚远, 甚至逊色于石墨^[29]. 因为 Li 原子在石墨烯层上容易

形成团簇, 导致枝晶的形成, 从而使得循环过程中会使得容量衰减较快^[30,31]. Pollak 等^[32] 通过原位拉曼光谱研究发现, 锂与碳的结合能较低以及石墨烯吸附的 Li 原子之间存在着较强的库仑排斥作用, 很可能导致单层石墨烯的表面锂覆盖率较低.

幸运的是通过表面修饰可以增强石墨烯与 Li/Na/K 的相互作用, 掺杂剂可以有效地调节 C 原子的电荷和自旋密度, 从而调节石墨烯的电荷分布^[33,34]. N 和 B 作为 C 的临近元素, 它们有着接近的原子尺寸, 故 N 和 B 成为石墨烯最常见的改性掺杂剂. 目前大量研究表明 N 掺杂石墨烯是一种很有前途的负极材料^[35-38]. Ma 等^[38] 利用第一性原理计算了 N 掺杂石墨烯 3 种不同的模型在 LIBs 中的应用, 研究发现吡啶型石墨烯最适合储锂, 理论比容量高达 1262 mAh/g. Cai 等^[39] 通过实验合成 N, S 共掺杂石墨烯片作为 LIBs 负极材料在 100 mA/g 的电流密度下可逆容量达到 1016 mAh/g. 值得注意的是, 单原子金属掺杂石墨烯近年成为催化领域研究的热点, 这是由于单空位掺杂增强石墨烯反应活性, 进而提升了催化反应效率^[40,41]. Xiao 等^[42] 通过第一性原理计算发现石墨烯基单原子催化剂 (SACs) 一定程度上可以改变 Li₂S 的绝缘性, 并降低 Li₂S 沉积/溶解过程的能量. 其中 SA-Cu 吸附 Li₂S 后电子态密度在费米能级 (E_F) 附近最高, 并且可有效的催化 Li₂S 的氧化还原反应. 但目前将单原子金属掺杂石墨烯作为电极材料的研究相对有限.

为了探究掺杂石墨烯的储能的更多可能性, 选择将吡啶 (pyridinic) 结构的石墨烯中的部分 N 替换为 O, 并掺杂 Cu 得到 Cu/NO₂G 材料. 本文采用第一性原理研究的方法确定 Cu/NO₂G 在热力学和动力学上是稳定的, 并在吸附 Li, Na, K 前后均保持良好导电性. 随后, 通过增加 Cu/NO₂G 上吸附 Li/Na/K 原子的浓度来确定材料的储存能力, 结果显示 Cu/NO₂G 具有成为高容量离子电池负极材料的潜力, 其储存 Li, Na, K 的理论比容量分别高达 1639.9 mAh/g, 2025.8 mAh/g, 1157.60 mAh/g. 且在 Li, Na, K 离子嵌入过程中, Cu/NO₂G 的晶格常数变化均小于 1%, 这意味着其具有良好的循环稳定性. 最后, 评估了 Li/Na/K 在 Cu/NO₂G 表面的扩散行为, Li, Na, K 离子在 Cu/NO₂G 表面的迁移势垒分别为 0.339 eV, 0.209 eV 和 0.098 eV, 表明其优异的倍率性能. 以上结果都表明 Cu/NO₂G 是一种高性能的碱金属离子电池负极.

2 计算方法

本文的所有计算都是在维也纳从头算模拟包(VASP)^[43,44]软件下基于密度泛函理论(DFT)^[45,46]完成的。本文的交换关联势采用局域密度近似(LDA)用Perdew和Zunger参数化的Ceperly-Alder泛函来模拟^[47,48]。为了确保计算的准确性，平面波展开截止能量 E_{cut} 设置为520 eV，采用Monkhorst-Pack方案对布里渊区进行采样^[49]，结构优化布里渊区K点采样网格数为 $3 \times 3 \times 1$ ，电子结构计算布里渊区K点采样网格数为 $5 \times 5 \times 1$ 。总能量和离子力的收敛标准分别为 10^{-5} eV和 10^{-3} eV/Å。声子谱使用phonopy软件包进行计算^[50]。确定碱性金属原子在Cu/NO₂G的最佳迁移路线和势垒，具体是采用CI-NEB方法^[51]在包含4个Cu原子、4个N原子、8个O原子和56个C原子的 2×2 超胞上进行计算。在所有计算中，沿材料平面法向量方向的真空层都确保高于20 Å，以避免每个片层的相互作用。

3 结果与讨论

3.1 Cu/NO₂G 几何结构

首先，用1个N原子和2个O原子取代由17个

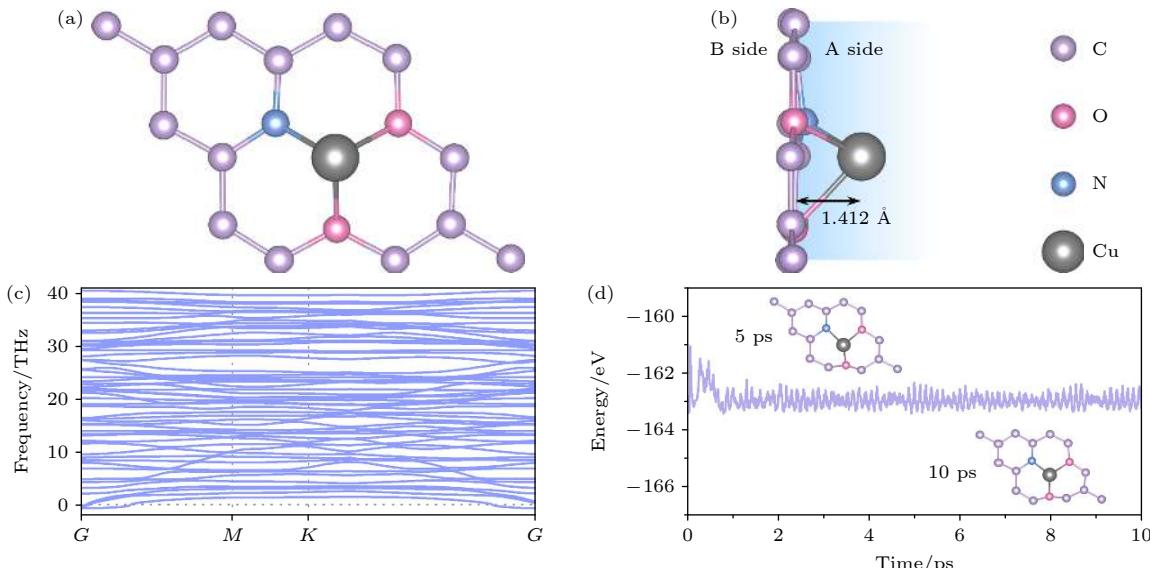


图1 (a) 结构优化后Cu/NO₂G的俯视图; (b) 结构优化后Cu/NO₂G的侧视图; (c) Cu/NO₂G单层的声子色散曲线; (d) 300 K下AIMD模拟的结果，插图为5 ps和10 ps时的原子结构俯视图

Fig. 1. (a) Top view of the optimized Cu/NO₂G; (b) side view of the optimized Cu/NO₂G; (c) phonon dispersion curves of Cu/NO₂G monolayer; (d) results of AIMD simulations at 300 K, where insets are snapshots of atomic structures at 5 ps and 10 ps.

C原子组成的缺陷石墨烯空位处的3个C原子，并在缺陷空位掺杂1个Cu原子，掺杂Cu原子的屈曲高度为1.412 Å。**图1(a), (b)**为Cu/NO₂G结构优化后的俯视图和侧视图。该结构的晶格常数 $a=b=7.332$ Å，Cu—N, Cu—O, N—C键长分别为1.886 Å, 2.070 Å和1.344 Å, C—C平均键长为1.412 Å, O—C平均键长为1.390 Å。由于材料中掺杂了Cu原子，材料的两面不再具有对称性，因此如**图1(b)**中，将材料凸面标记为A面，凹面标记为B面。此外，如**图1(c), (d)**所示，色散声子谱和分子动力学计算也表明材料在热力学和动力学上具有稳定性，这为Cu/NO₂G作为离子电池电极材料提供了保障。

3.2 Li/Na/K 的吸附计算

离子电极材料的一个关键特性是对碱金属离子具有较强的吸附能力。为了确定Li, Na和K在Cu/NO₂G的最佳吸附位置，本研究系统地考察了**图2(a)**所示的3种类型的吸附位点：绿色为六圆环的中心上方的空位、青色为原子上方的顶位、粉色为原子与原子之间上方的桥位。鉴于材料两面的不对称性，吸附计算需要分别考虑A面和B面。吸附能 E_{ad} 的计算公式定义如下：

$$E_{\text{ad}} = E_{\text{total}} - E_{\text{host}} - E_A, \quad (1)$$

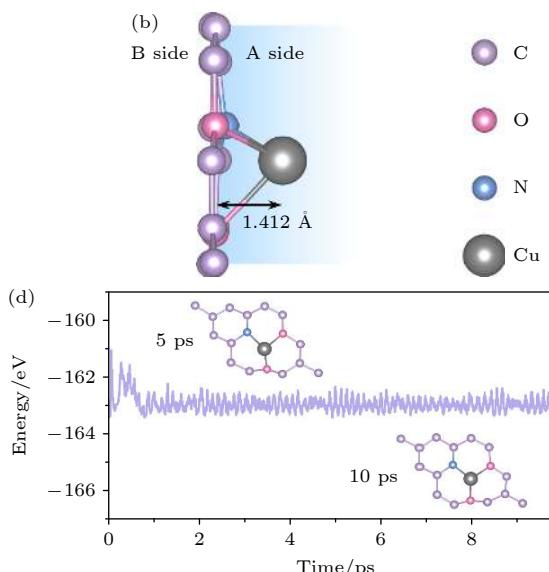


图2 (a) 3种类型的吸附位点示意图；(b) Li原子在Cu/NO₂G上的吸附位点示意图；(c) 原子颜色编码：C (紫色), O (粉色), N (蓝色), Cu (灰色)

其中 E_{host} , E_{total} 分别为单个 A ($A = \text{Li}/\text{Na}/\text{K}$) 原子吸附在 $\text{Cu}/\text{NO}_2\text{G}$ 前后的系统总能, E_A 为碱性金属 A 的内聚能. 根据(1)式, 吸附能应为负值, 这有助于抑制枝晶的形成. 吸附能越小, 表明相应的吸附结构越稳定, 且有利于克服金属离子之间的库仑排斥作用, 从而实现电池的高容量.

Li 和 Na 在 $\text{Cu}/\text{NO}_2\text{G}$ 的 A 面最稳定的吸附点为 C_5O 环的空位的上方, K 在 $\text{Cu}/\text{NO}_2\text{G}$ 的 A 面最稳定的吸附点为 C_6 环的空位的上方, 吸附后构型如图 2(b)–(d), 吸附能分别为 -0.508 eV , -0.442 eV 和 -0.940 eV . Li (0.76 \AA) 和 Na (1.02 \AA) 的离子半径较小, 更容易适应孔径较小的 C_5O ($\text{C}-\text{C}$ 平均键长为 1.395 \AA ; $\text{C}-\text{O}$ 平均键长为 1.399 \AA) 环, 与其形成更紧密的相互作用. 相较之下, K (1.38 \AA) 的离子半径较大, 更适合孔径更大的 C_6 环 ($\text{C}-\text{C}$ 平均键长为 1.423 \AA). 如图 2(e)–(g) 所示, B 面 Li , Na

和 K 最稳定的吸附点则均为 Cu 原子的顶位附近, 吸附能分别为 -1.434 eV , -0.844 eV 和 -1.197 eV . Bader 电荷分析显示 $\text{Cu}/\text{NO}_2\text{G}$ 吸附碱金属原子后, Li , Na 和 K 均与石墨烯层之间存在电荷转移, Li 向 $\text{Cu}/\text{NO}_2\text{G}$ 单层转移了 0.845e , Na 向 $\text{Cu}/\text{NO}_2\text{G}$ 单层转移了 0.835e , K 向 $\text{Cu}/\text{NO}_2\text{G}$ 单层转移了 0.842e . 表 1 中的数据通过 Bader 电荷分析得到的不同元素的平均电子转移数量, 可以发现无论吸附哪种碱金属原子, Cu 和 C 均失去电子带正电荷, 而 N 和 O 则是得到电子, 表现出电负性. 图 3 中的差分电荷密度图直观地展示了吸附过程中的电荷得失情况.

为了确认材料是否在吸附碱性金属前后均保持导电性, 因此选择计算了本征 $\text{Cu}/\text{NO}_2\text{G}$ 吸附 $\text{Li}/\text{Na}/\text{K}$ 后最稳定的吸附构型的态密度 (DOS), 如图 4(a) 所示, 可以看到本征 $\text{Cu}/\text{NO}_2\text{G}$ 呈现金

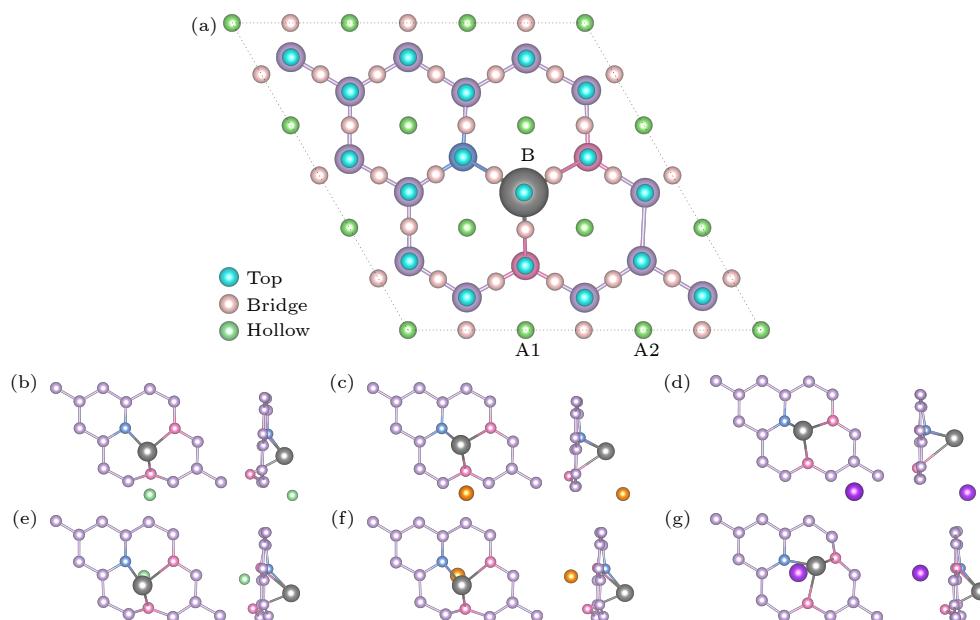


图 2 (a) $\text{Cu}/\text{NO}_2\text{G}$ 上 A 面和 B 面所考虑的吸附位点俯视图; (b)–(d) 分别为 $\text{Li}/\text{Na}/\text{K}$ 在 A 面最稳定的吸附构型的俯视图和侧视图; (e)–(g) 分别为 $\text{Li}/\text{Na}/\text{K}$ 在 B 面最稳定的吸附构型的俯视图和侧视图

Fig. 2. (a) Top view of adsorption sites considered on side A and side B of $\text{Cu}/\text{NO}_2\text{G}$; (b)–(d) the top and side views of the most stable adsorption configurations of $\text{Li}/\text{Na}/\text{K}$ on the A side; (e)–(g) the top and side views of the most stable adsorption configurations of $\text{Li}/\text{Na}/\text{K}$ on the B side.

表 1 $\text{Cu}/\text{NO}_2\text{G}$ 吸附 $\text{Li}/\text{Na}/\text{K}$ 后的 Bader 电荷分析

Table 1. Bader charge analysis of $\text{Cu}/\text{NO}_2\text{G}$ $\text{Li}/\text{Na}/\text{K}$ adsorbed states.

	Average charge states						
	Li	Na	K	C	N	O	Cu
$\text{LiCuNO}_2\text{C}_{14}$	-0.845	—	—	-0.162	1.232	1.115	-0.355
$\text{NaCuNO}_2\text{C}_{14}$	—	-0.835	—	-0.154	1.206	1.097	-0.403
$\text{KCuNO}_2\text{C}_{14}$	—	—	-0.842	-0.142	1.224	1.053	-0.503

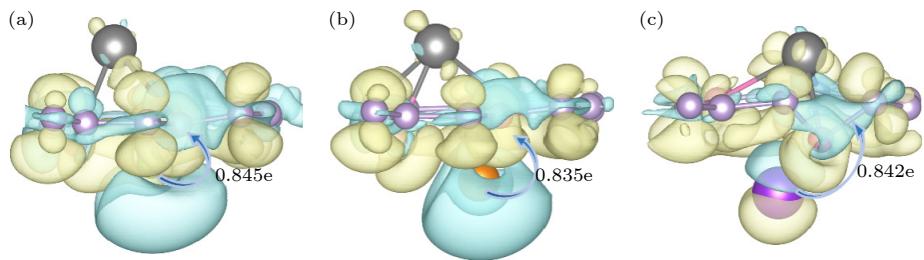


图 3 (a) Li, (b) Na, (c) K 吸附在 Cu/NO₂G 的 B 面上的电荷密度差的侧视图, 蓝色和黄色分别代表电子耗尽区和积累区, 相应的等值面 (isosurface level) 的数值为 0.0015 Bohr⁻³

Fig. 3. Side views of the charge density difference of (a) Li, (b) Na and (c) K atom adsorbed on B side of Cu/NO₂G. The blue and the yellow colors represent regions with electron depletion and accumulation, respectively. The corresponding value of isosurface level is 0.0015 Bohr⁻³.

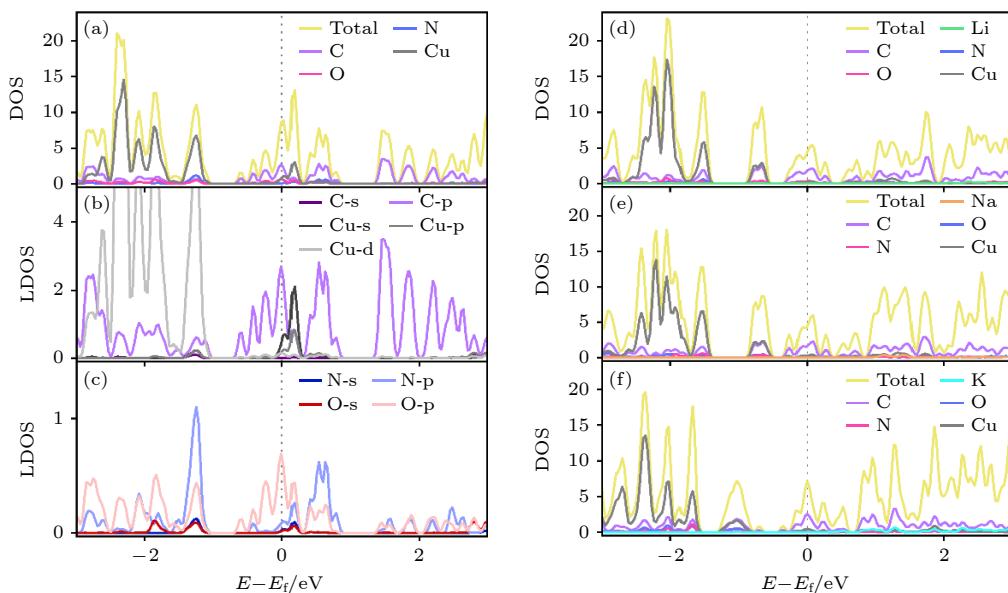


图 4 (a) Cu/NO₂G 态密度图; (b) Cu/NO₂G 中 C 和 Cu 的局部态密度图; (c) Cu/NO₂G 中 N 和 O 的局部态密度图; (d) Cu/NO₂G 吸附 Li 原子后态密度图; (e) Cu/NO₂G 吸附 Na 原子后态密度图; (f) Cu/NO₂G 吸附 K 原子后态密度图

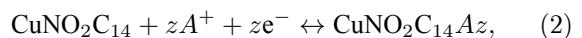
Fig. 4. (a) DOS of Cu/NO₂G; (b) LDOS plots for C and Cu in Cu/NO₂G; (c) LDOS plots for N and O in Cu/NO₂G; (d) DOS of Cu/NO₂G after Li adsorption; (e) DOS of Cu/NO₂G after Na adsorption; (f) DOS of Cu/NO₂G after K adsorption.

属态, 费米能级附近的态密度主要由 C 贡献. 考虑到 Cu/NO₂G 中的碳 (C) 原子数量远大于其他原子 (如 Cu, O 等), 碳的态密度会在总体态密度中占有较大的比例. 随后绘制了局部态密度 (LDOS) 图, 如图 4(b), (c) 所示, C 的 2p 轨道态密度在费米能级附近最为突出, Cu 的 4s 轨道在费米能级附近也较为突出, 说明在 Cu 的掺杂对提高材料的导电性有一定的贡献. 如图 4(d)–(f) 所示, 当吸附 Li/Na/K 时, 材料仍然保持着金属态, 这可以说明 Cu/NO₂G 若是作为 LIBs, SIBs 和 KIBs 的负极材料, 可以保证电池在运行过程中具有良好的导电性.

3.3 平均开路电压和存储容量

本研究进一步计算了 Cu/NO₂G 嵌入 Li/Na/K

的平均开路电压 (OCV) 和理论比容量, 对于可充电离子电池的负极材料, 高比容量和适宜的工作电压是其关键性能指标. 平均 OCV 是阳极的理论氧化还原电位, 从安全和能量密度的角度看, 较低的平均 OCV 值对阳极材料更为有利. 根据 3.2 节单个 Li/Na/K 原子吸附的基础上在 Cu/NO₂G 上增加 Li/Na/K 原子的吸附浓度, 相应的半电池反应方程式如下:



其中, A 为碱性金属原子 Li/Na/K, z 为 Cu/NO₂G 上吸附的 Li/Na/K 原子的数量. 为了评估吸附原子与宿主材料之间的相互作用的大小, 定义平均吸附能 E_{ave} 的计算公式如下:

$$E_{\text{ave}} = (E_{\text{total}} - E_{\text{host}} - zE_A)/z, \quad (3)$$

其中 E_{host} , E_A 的定义与上文保持一致, E_{total} 为 Cu/NO₂G 吸附多个 Li/Na/K 原子后的体系总能量. E_{ave} 为负值时, 表明碱性金属原子具有自发嵌入的可能性. 因此当 $E_{\text{ave}} > 0$ 时, 即可推断材料对碱金属原子的吸附能力已达到其饱和状态, 即金属原子吸附量已达峰值. 忽略体积和熵效应, 平均开路电压 V_{ocv} 采用如下公式^[52,53]进行计算:

$$V_{\text{ocv}} = -(E_{\text{total}} - E_{\text{host}} - zE_A)/(ze). \quad (4)$$

考虑到实际离子在充放电过程中迁移速度会非常快, 根据 3.2 节计算的吸附位点的稳定性前期按 3 个的增量增加 Li, Na 和 K 原子的浓度. 当 Cu/NO₂G 吸附 3, 6, 9, 12, 15, 17 个 Li 原子时 E_{ave} 均为负值, 分别为 -0.145 V, -0.217 V, -0.273 V, -0.078 V, -0.070 V, -0.039 V, 当吸附 Li 原子数增加到 18 个时, Cu/NO₂G 的 E_{ave} 为正值 (0.017 V). 因此 Cu/NO₂G 最多可以吸附 17 个 Li 原子, 其对应的化学计量数为 Li₁₇CuNO₂C₁₄. V_{ocv} 与 Li 原子数量的折线图如图 5 所示. 对于在 Cu/NO₂G 上吸附的 Na 原子数量 $z = 3, 6, 9, 12, 15, 18, 21$ 和 24 时, 对应的 E_{ave} 分别为 -0.361 V, -0.224 V, -0.131 V, -0.073 V, -0.105 V, -0.036 V, -0.102 V 和 -0.018 V. 虽然当吸附 Na 原子数量为 24 时 E_{ave} 为负值, 但弛豫后结构不稳定, 晶格变化达到了 15%, 因此预测一个 Cu/NO₂G 晶胞最多可以容纳 21 个 Na 原子, 对应的化学计量数为 Na₂₁CuNO₂C₁₄. 当 Cu/NO₂G 上吸附的 K 原子数量 $z = 3, 6, 9, 12$ 和 15 时, E_{ave} 分别为 -0.576 V, -0.491 V, -0.205 V, -0.270 V 和 -0.076 V. 同样地当 Cu/NO₂G 上吸附的 K 原子数量超过 12 个后材料晶格常数的变化超过了 10%, 故 Cu/NO₂G 最多可容纳的 K 原子数量为 12 个, 对应的化学计量数为 K₁₂CuNO₂C₁₄.

随后计算了理论比容量, 并与其他材料的理论比容量进行了对比. 理论比容量计算公式如下:

$$C = zF/M, \quad (5)$$

其中 z 为吸附 Li/Na/K 原子的个数, F 为法拉第常数 (26789 mAh/mol), M 为 Cu/NO₂G 的摩尔质量 ($M_{\text{Cu/NO}_2\text{G}} = 277.7 \text{ mol/g}$). 计算得到 Cu/NO₂G 的储 Li 的理论比容量为 1639.9 mAh/g, 对应的晶格变化约为 0.61%. 其理论比容量均高于吡啶 (pyridinic) 结构的石墨烯的理论比容量, 更是石墨 (约 372 mAh/g)^[54] 储 Li 容量的 4 倍多. 而 Cu/NO₂G

储 Na 的理论比容量更是高达 2025.8 mAh/g, 晶格变化也只有~0.19%. Cu/NO₂G 储 K 的理论比容量为 1157.6 mAh/g, 晶格变化为约 0.92%. 可见 Cu/NO₂G 作为锂/钠/钾离子电池的负极材料不仅拥有优秀的理论比容量, 还具备出色的循环性能.

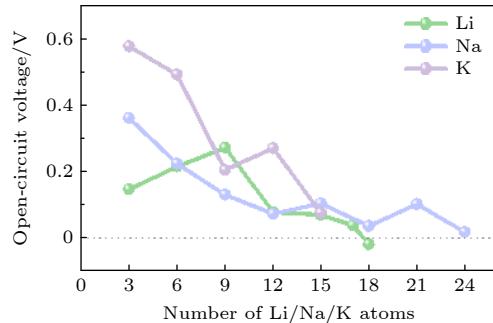


图 5 不同浓度 Li/Na/K 嵌入 Cu/NO₂G 的 V_{ocv}

Fig. 5. V_{ocv} of the Cu/NO₂G with different concentrations of Li/Na/K embedded.

如图 6 所示, 将 Cu/NO₂G 的理论比容量与近年来发现二维材料的理论比容量进行对比, 可以发现 Li, Na 和 K 的理论比容量仅仅低于 b-Bi 而高于其他二维材料^[52]. 其中 Cu/NO₂G 储 Na 理论比容量高于 B₂S (~1498 mAh/g)^[55,56], PC₆ (~1301 mAh/g)^[57], BP (~1282 mAh/g)^[58,59], Si₃C (~1115 mAh/g)^[60], 是 Ti₂CS₂ (~936 mAh/g)^[61], Phosphorene (~865 mAh/g)^[62,63], MoN₂ (~864 mAh/g)^[64], TiSi₂N₄ (~854 mAh/g)^[65], GeSe (~707 mAh/g)^[66], DB silicene (~622 mAh/g)^[67], V₃C₂ (~606 mAh/g)^[68], TiB₄ (~588 mAh/g)^[69], GeS (~512 mAh/g)^[70] 的理论比容量的 2—3 倍, 甚至是 TiS₂ (~479 mAh/g)^[71], Ti₃C₂S₂ (~463 mAh/g)^[72], Ti₃C₂ (~352 mAh/g)^[73], Nb₂S₂C (~348 mAh/g)^[74], SrB₈ (~308 mAh/g)^[69], Nb₂C (~271 mAh/g)^[75], VS₂ (~233 mAh/g)^[76,77] 的理论比容量的 4 倍以上.

特别注意的是, Cu/NO₂G 的储锂、储钠和储钾的理论比容量都比较高, 这主要是因为 Cu/NO₂G 体系中, 掺杂原子 Cu 可以调控石墨烯的电子结构和表面性质, 此外锚定原子, 即氮原子和氧原子可以使得活性位点所在位置的面积增大, 形成协同吸附效应进而进一步增加活性位点的活性, 进一步提升对碱金属离子的吸附能力从而获得提升存储容量. 另外, 储锂、储钠和储钾的理论比容量具有差异, 这种差异性的可能性主要归因于以下两点. 1) 离子吸附能力: 不同碱金属离子的电负性不同,

与基底材料的相互作用强度也不同, 导致吸附能存在差异。吸附能越负, 吸附能力越强, 理论比容量越高。钠离子在更多吸附位点上具有负的吸附能, 且吸附能普遍低于锂和钾, 表明其与基底材料的相互作用更强, 因此具有更高的理论比容量。2) 离子尺寸和结构稳定性: 钾的离子半径最大, 其次是钠, 锂最小。较大的离子尺寸会导致更大的晶格常数的变化, 并且在吸附数量较多时有更强的静电排斥效应, 从而影响材料的结构稳定性导致存储能力减弱。例如尽管钾的吸附能力强于锂, 但我们的计算表明, 锂的理论比容量高于钾的, 这主要是因为当吸附钾的数量达到 13 时, 尽管平均吸附能仍为负值, 但材料的体积膨胀过大, 显著削弱了结构的稳定性。总之, Cu/NO₂G 的储锂、储钠和储钾的存储能力的差异受到材料结构、离子性质等多种因素的影响。

3.4 Cu/NO₂G 上的碱性金属原子迁移

扩散势垒与电池的倍率性能密切相关, Li/Na/K 离子在材料上的扩散势垒越低, 阳离子迁

移越快。这里采用了 CL-NEB^[51] 方法分别去求得 Li/Na/K 原子在 Cu/NO₂G 上的鞍点、最低扩散势垒的路径。基于 Li/Na/K 原子在 Cu/NO₂G 单层的吸附最佳吸附点来确定迁移路径, 但由于两种材料的 A 和 B 侧的不对称性, 因此材料的 A 和 B 两侧均需要进行扩散计算, 这里采用 2 × 2 的超胞计算迁移势垒, 相应的化学计量数为 Cu₄N₄O₈C₅₆。

首先计算 Li/Na/K 原子在 Cu/NO₂G 单层 A 侧的迁移, Li/Na/K 原子均考虑了 3 种迁移路线, 由于前面计算表明 Li 和 Na 单原子在 Cu/NO₂G 的 A 侧最佳吸附位点为图 2(a) 的 A1 点, 而 K 原子在 Cu/NO₂G 的 A 侧最佳吸附位点为图 2(a) 的 A2 点, 故 K 选择的迁移路径与 Li/Na 的迁移路径不同。如图 7(c) 所示, Li 原子在 Path-1, Path-2 和 Path-3 上的扩散势垒分别为 0.339 eV, 0.649 eV 和 1.254 eV, Na 原子在 Path-1, Path-2 和 Path-3 上的扩散势垒分别为 0.224 eV, 0.209 eV 和 0.826 eV, K 原子在 Path-1, Path-2 和 Path-3 上的扩散势垒分别为 0.098 eV, 0.297 eV 和 0.381 eV。对于 Cu/

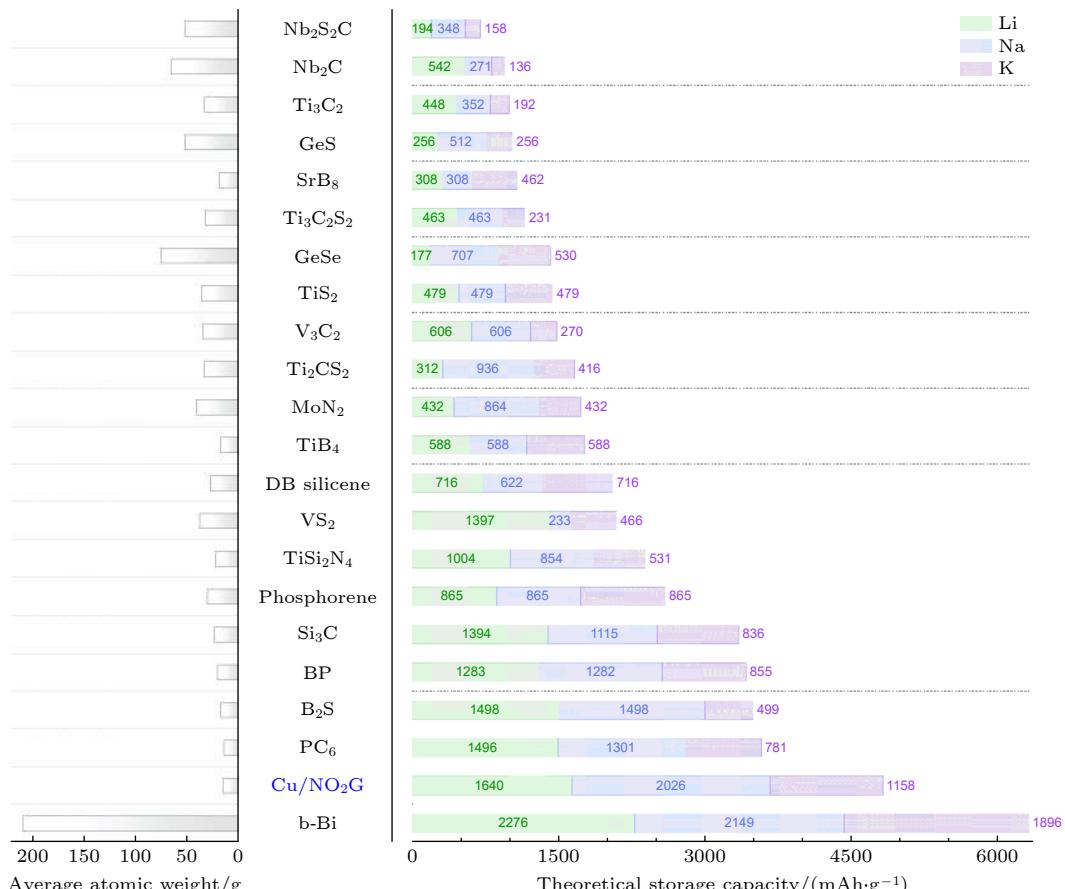


图 6 Cu/NO₂G 与其他二维材料的理论比容量对比图

Fig. 6. Comparison of the theoretical specific capacities between Cu/NO₂G monolayer and other 2D anode materials.

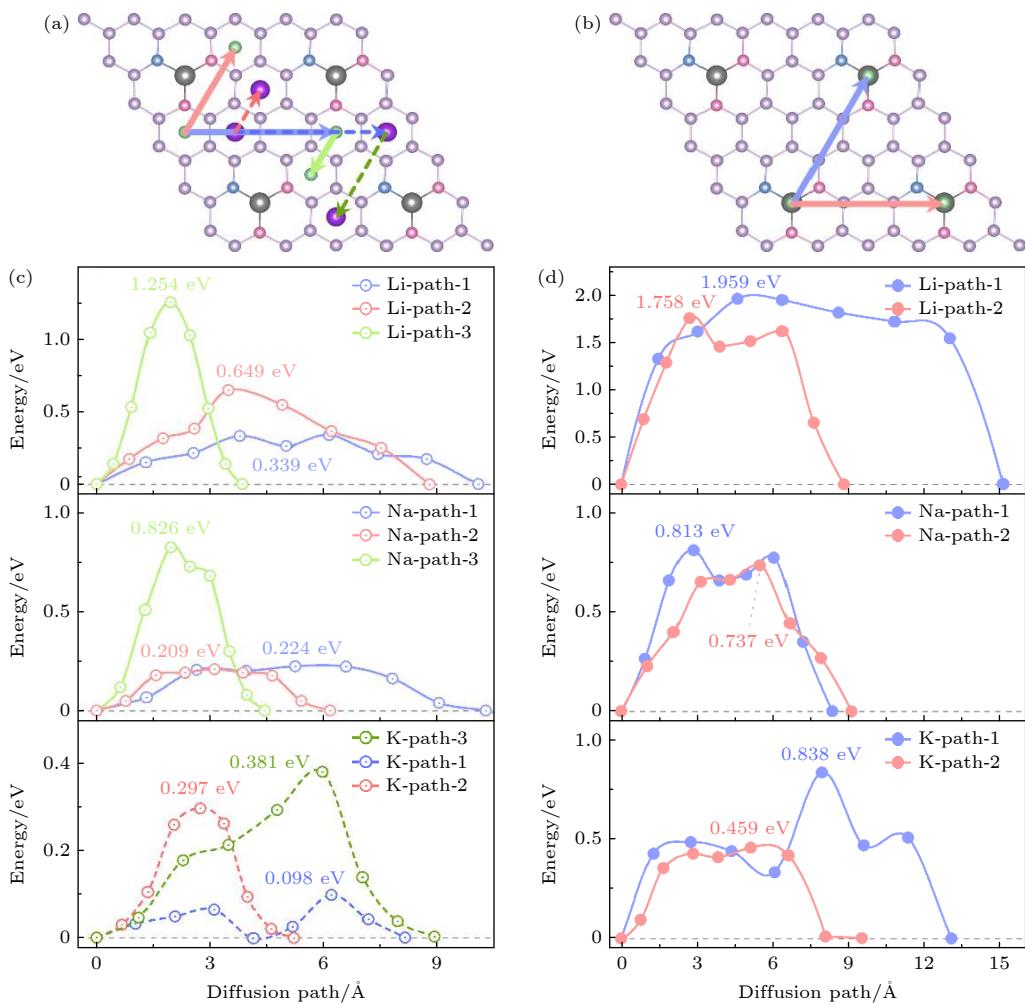


图 7 (a) Li/Na/K 在 Cu/NO₂G 的 A 面迁移路径; (b) Li/Na/K 在 Cu/NO₂G 的 B 面迁移路径; (c) Li/Na/K 在 Cu/NO₂G 的 A 面迁移路径上的扩散势垒; (d) Li/Na/K 在 Cu/NO₂G 的 B 面迁移路径上的扩散势垒

Fig. 7. (a) Migration pathways of Li/Na/K on side A of Cu/NO₂G; (b) migration pathways of Li/Na/K on side B of Cu/NO₂G; (c) diffusion barriers of Li/Na/K for the pathways on side A of Cu/NO₂G; (d) diffusion barriers of Li/Na/K for the pathways on side B of Cu/NO₂G.

NO₂G 的 B 侧, 如图 7(b) 所示, Li/Na/K 选择迁移路径相同, 对于 Path-1 和 Path-2 两种迁移路径, Li 原子扩散势垒分别为 1.959 eV 和 1.758 eV, Na 原子的扩散势垒分别为 0.813 eV 和 0.737 eV, K 原子的扩散势垒分别为 0.838 eV 和 0.459 eV. 总之, 在 Cu/NO₂G 单层的 A 侧, K 原子的迁移最容易, 特别是在 Path-1 上, 扩散势垒仅为 0.098 eV, 而 Li 原子的扩散势垒较高, 特别 Path-3 达 1.254 eV. 在 B 侧, Li 的迁移势垒最高 (Path-1 为 1.959 eV), Na 和 K 的势垒较低, 其中 K 在 Path-2 上的势垒最低, 仅为 0.459 eV. 总体来看, 金属离子在 Cu/NO₂G 不同侧面和迁移路径上的扩散势垒存在显著差异. 而 Li 和 Na 原子均是在 Cu/NO₂G 的 A 侧迁移势垒最低, Li 和 Na 在 A 侧的最低迁移势垒分别为 0.339 eV 和 0.224 eV, K 原子在 A 侧的

Path-1 的迁移势垒仅为 0.098 eV. 而相较 A 侧, B 侧的迁移势垒总体较高, 但 K 原子在 Cu/NO₂G 的 B 侧的迁移势垒也低于 Na 和 Li, 在 B 侧的 Path-2 的迁移势垒为 0.459 eV, 这展示出 Cu/NO₂G 作为 KIBs 电池负极材料, 具有较高性能的倍率性能. 这里可以发现, 随着碱性金属原子序数的增加, 扩散势垒呈现降低趋势, 这与 Li < Na < K 的原子半径增大基本一致. 碱性金属的这种行为与之前的报道一致 [52,55–61].

4 结 论

综上所述, 本研究基于第一性原理计算探讨了 N, O 双掺杂石墨烯负载 Cu 原子的二维材料 (Cu/NO₂G) 作为锂离子电池、钠离子电池和钾离子电

池负极材料的应用潜力。研究结果揭示, Cu/NO₂G 满足良好的电极材料的必要要求: 1) Cu/NO₂G 吸附 Li/Na/K 前后均保持金属性; 2) Cu/NO₂G 展现出迄今所研究的绝大部分 2D 负极材料的优异金属离子存储能力, Li/Na/K 的理论比容量分别达到 1639.9 mAh/g, 2025.8 mAh/g, 1157.6 mAh/g; 3) 更为关键的是, 在 Li/Na/K 原子嵌入过程中晶格变化很小 (<1%) 变形, 这有利于保持良好的循环稳定性能; 4) 此外, Li 原子在 Cu/NO₂G 单层扩散势垒仅为 0.339 eV, Na 原子为 0.209 eV, 而 K 原子的扩散势垒更是低至 0.098 eV, 确保了 Cu/NO₂G 作为负极材料的倍率性能。总体而言, Cu/NO₂G 显示出作为 LIBs, SIBs 和 KIBs 负极材料的巨大潜力, 这为未来的理论研究和实验开发提供了坚实的基础。

数据可用性声明

支撑本研究成果的数据集可在科学数据银行 <https://www.doi.org/10.57760/sciedb.j00213.00063> 中访问获取。

参考文献

- [1] Liu A, Chen Y T, Cheng X 2022 *Environ. Res. Lett.* **17** 054031
- [2] Chen H S, Liu C, Xu Y J, Yue F, Liu W, Yu Z H 2021 *Energy Storage Sci. Technol.* **10** 1477 (in Chinese) [陈海生, 刘畅, 徐玉杰, 岳芬, 刘为, 俞振华 2021 储能科学与技术 **10** 1477]
- [3] Nzereogu P U, Omah A D, Ezema F I, Iwuoha E I, Nwanya A C 2022 *Appl. Surf. Sci. Adv.* **9** 100233
- [4] Hossain M H, Chowdhury M A, Hossain N, Islam M A, Mobarak M H 2023 *Chem. Eng. J. Adv.* **16** 100569
- [5] Guo Q B, Han S, Lu Y X, Chen L Q, Hu Y S 2023 *Chin. Phys. Lett.* **40** 028801
- [6] Jian Z L, Luo W, Ji X L 2015 *J. Am. Chem. Soc.* **137** 11566
- [7] Perveen T, Siddiq M, Shahzad N, Ihsan R, Ahmad A, Shahzad M I 2020 *Renew. Sustain. Energy Rev.* **119** 109549
- [8] Sha M, Liu L, Zhao H P, Lei Y 2020 *Carbon Energy* **2** 350
- [9] Aslam M K, Niu Y, Xu M 2021 *Adv. Energy Mater.* **11** 2000681
- [10] Wen Y, He K, Zhu Y J, Han F D, Xu Y H, Matsuda I, Ishii Y, Cumings J, Wang C S 2014 *Nat. Commun.* **5** 4033
- [11] Tan S H, Yang H, Zhang Z, Xu X Y, Xu Y Y, Zhou J, Zhou X C, Pan Z D, Rao X Y, Gu Y D, Wang Z L, Wu Y T, Liu X, Zhang Y 2023 *Molecules* **28** 3134
- [12] Lu X Y, Peng H D, Liu G P, Qi F Y, Shi C L, Wu S, Wu Y X, Yang H P, Shan J, Sun Z P 2023 *Energy Adv.* **2** 1294
- [13] Kuai J, Xie J, Wang J D, Chen J Y, Liu F, Xu X W, Tu J, Cheng J P 2024 *Chem. Phys. Lett.* **842** 141214
- [14] Zhang K, He Q, Xiong F Y, Zhou J P, Zhao Y, Mai L Q, Zhang L N 2020 *Nano Energy* **77** 105018
- [15] Lei K X, Wang J, Chen C, Li S Y, Wang S W, Zheng S J, Li F J 2020 *Rare Met.* **39** 989
- [16] Feng Z Y, Peng W J, Wang Z X, Guo H J, Li X H, Yan G C, Wang J X 2021 *Int. J. Miner. Metall. Mater.* **28** 1549
- [17] Garayt M D L, Zhang L B, Zhang Y X, Obialor M C, Deshmukh J, Xing Y J, Yang C Y, Metzger M, Dahn J R 2024 *J. Electrochem. Soc.* **171** 070523
- [18] Lin J Y, Yu T, Han F J J, Yang G C 2020 *Wires Comput. Mol. Sci.* **10** e1473
- [19] Kulish V V, Malyi O I, Persson C, Wu P 2015 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** 13921
- [20] Hu J P, Xu B, Ouyang C Y, Yang S Y A, Yao Y G 2014 *J. Phys. Chem. C* **118** 24274
- [21] Xu Z M, Lv X J, Chen J G, Jiang L X, Lai Y Q, Li J 2017 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19** 7807
- [22] Yu Y D, Guo Z L, Peng Q, Zhou J, Sun Z M 2019 *J. Mater. Chem. A* **7** 12145
- [23] Yu T, Zhang S T, Li F, Zhao Z Y, Liu L L, Xu H Y, Yang G C 2017 *J. Mater. Chem. A* **5** 18698
- [24] Zhang G, Xie H M, Song H B, Li X F, Zhang Q, Kang Y L 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 066501 (in Chinese) [张改, 谢海妹, 宋海滨, 李晓菲, 张茜, 亢一澜 2022 物理学报 **71** 066501]
- [25] Lei X L, Zhu J Y, Ke Q, Ouyang C Y 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 098804 (in Chinese) [雷雪玲, 朱巨湧, 柯强, 欧阳楚英 2024 物理学报 **73** 098804]
- [26] Liang Y B, Liu Z, Wang J, Liu Y 2022 *Chin. Phys. B* **31** 116302
- [27] Aghamohammadi H, Hassanzadeh N, Eslami-Farsani R 2021 *Ceram. Int.* **47** 22269
- [28] Mahmood N, Tang T, Hou Y 2016 *Adv. Energy Mater.* **6** 1600374
- [29] Bi J X, Du Z Z, Sun J M, Liu Y H, Wang K, Du H F, Ai W, Huang W 2023 *Adv. Mater.* **35** 2210734
- [30] Fan X, Zheng W T, Kuo J L, Singh D J 2013 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **5** 7793
- [31] Liu M, Kutana A, Liu Y, Yakobson B I 2014 *J. Phys. Chem. Lett.* **5** 1225
- [32] Pollak E, Geng B, Jeon K J, Lucas I T, Richardson T J, Wang F, Kostecki R 2010 *Nano Lett.* **10** 3386
- [33] Ferrighi L, Trioni M I, Di Valentin C D 2015 *J. Phys. Chem. C* **119** 6056
- [34] Lee H, Paeng K, Kim I S 2018 *Synth. Met.* **244** 36
- [35] Datta D, Li J, Shenoy V B 2014 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **6** 1788
- [36] Ma L B, Lv Y H, Wu J X, Xia C, Kang Q, Zhang Y Z, Liang H F, Jin Z 2021 *Nano Res.* **14** 4442
- [37] Sharek K, Cohn A P, Carter R, Rogers B, Pint C L 2016 *ACS Nano* **10** 9738
- [38] Ma C C, Shao X H, Cao D P 2012 *J. Mater. Chem.* **22** 8911
- [39] Cai D D, Wang C S, Shi C Y, Tan N 2018 *J. Alloys Compd.* **731** 235
- [40] Denis P A 2024 *J. Mol. Model.* **30** 96
- [41] Fei H L, Dong J C, Chen D L, Hu T D, Duan X D, Shakir I, Huang Y, Duan X F 2019 *Chem. Soc. Rev.* **48** 5207
- [42] Xiao R, Yu T, Yang S, Chen K, Li Z N, Liu Z B, Hu T Z, Hu G J, Li J, Cheng H M, Sun Z H, Li F 2022 *Energy Storage Mater.* **51** 890
- [43] Kresse G 1995 *J. Non-Cryst. Solids* **192–193** 222
- [44] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [45] Kresse G, Joubert D 1999 *Phys. Rev. B* **59** 1758
- [46] Blöchl P E 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17953
- [47] Perdew J P, Zunger A 1981 *Phys. Rev. B* **23** 5048
- [48] Ceperley D M, Alder B J 1980 *Phys. Rev. Lett.* **45** 566
- [49] Chadi D J 1977 *Phys. Rev. B* **16** 1746
- [50] Togo A, Tanaka I 2015 *Scr. Mater.* **108** 1

- [51] Henkelman G, Uberuaga B P, Jónsson H 2000 *J. Chem. Phys.* **113** 9901
- [52] Khan M I, Nadeem G, Majid A, Shakil M 2021 *Mater. Sci. Eng. B* **266** 115061
- [53] Li Y F, Jiang J Z, Li X F, Li M, Zheng Y J, Sun K 2024 *Phys. Rev. B* **110** 155401
- [54] Tarascon J M, Armand M 2001 *Nature* **414** 359
- [55] Li P, Li Z Y, Yang J L 2018 *J. Phys. Chem. Lett.* **9** 4852
- [56] Lei S F, Chen X F, Xiao B B, Zhang W T, Liu J 2019 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **11** 28830
- [57] Yang M R, Kong F, Chen L, Tian B W, Guo J 2023 *Thin Solid Films* **769** 139734
- [58] Jiang H R, Shyy W, Liu M, Wei L, Wu M C, Zhao T S 2017 *J. Mater. Chem. A* **5** 672
- [59] Lin H, Liu G J, Zhu L L, Zhang Z J, Jin R C, Huang Y, Gao S M 2021 *Appl. Surf. Sci.* **544** 148895
- [60] Wang Y N, Li Y S 2020 *J. Mater. Chem. A* **8** 4274
- [61] Wang Y T, Zhou M, Xu L C, Zhao W T, Li R, Yang Z, Liu R P, Li X Y 2020 *J. Power Sources* **451** 227791
- [62] Li Q F, Duan C G, Wan X G, Kuo J L 2015 *J. Phys. Chem. C* **119** 8662
- [63] Mukherjee S, Kavalsky L, Singh C V 2018 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **10** 8630
- [64] Zhang X, Yu Z, Wang S S, Guan S, Yang H Y, Yao Y, Yang S A 2016 *J. Mater. Chem. A* **4** 15224
- [65] Ahmad S, Din H U, Nguyen C Q, Nguyen S T, Nguyen C 2024 *Dalton. Trans.* **53** 3785
- [66] Sannyal A, Zhang Z Q, Gao X F, Jang J 2018 *Comput. Mater. Sci.* **154** 204
- [67] Liu M, Cheng Z S, Zhang X M, Li Y F, Jin L, Liu C, Dai X F, Liu Y, Wang X T, Liu G D 2023 *Chin. Phys. B* **32** 096303
- [68] Fan K, Ying Y R, Li X, Luo X Y, Huang H T 2019 *J. Phys. Chem. C* **123** 18207
- [69] Wang Y, Liang S S, Tian J C, Duan H X, Lv Y, Wan L J, Huang C L, Wu M S, Ouyang C Y, Hu J P 2024 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **26** 4455
- [70] Li F, Qu Y Y, Zhao M W 2016 *J. Mater. Chem. A* **4** 8905
- [71] Samad A, Shafique A, Shin Y H 2017 *Nanotechnology* **28** 175401
- [72] Yang Z F, Zheng Y P, Li W L, Zhang J P 2021 *Nanoscale* **13** 11534
- [73] Er D, Li J, Naguib M, Gogotsi Y, Shenoy V B 2014 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **6** 11173
- [74] Jing Y, Liu J, Zhou Z P, Zhang J, Li Y 2019 *J. Phys. Chem. C* **123** 26803
- [75] Hu J P, Xu B, Ouyang C Y, Zhang Y, Yang S A 2016 *RSC Adv.* **6** 27467
- [76] Wang D S, Liu Y H, Meng X, Wei Y J, Zhao Y Y, Pang Q, Chen G 2017 *J. Mater. Chem. A* **5** 21370
- [77] Putungan D B, Lin S H, Kuo J L 2016 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **8** 18754

DATA PAPER

Theoretical prediction of nitrogen-oxygen-anchored monatomic copper-doped graphene as an anode for alkaline ion batteries*

HU Junping^{1)2)†} LIANG Sisi¹⁾²⁾ DUAN Huixian¹⁾²⁾ TIAN Juncheng¹⁾²⁾
CHEN Shuo¹⁾²⁾ DAI Boyang¹⁾²⁾ HUANG Chunlai¹⁾²⁾ LIU Yu¹⁾²⁾
LYU Ying¹⁾²⁾ WAN Lijia¹⁾²⁾ OUYANG Chuying^{3)‡}

1) (*Nanchang Key Laboratory of Photoelectric Conversion and Energy Storage Materials, Nanchang Institute of Technology, Nanchang 330099, China*)

2) (*School of Science, Nanchang Institute of Technology, Nanchang 330099, China*)

3) (*Laboratory of Computational Materials Physics, Department of Physics, Jiangxi Normal University, Nanchang 330022, China*)

(Received 18 October 2024; revised manuscript received 5 December 2024)

Abstract

Reasonably designing high-capacity novel electrode materials is key to further enhancing the energy density of ion batteries. Graphene has been considered one of the most promising candidates for anodes in ion batteries. However, the weak interaction between pure graphene and the corresponding ions results in a low theoretical capacity. Based on this, in this work the first-principles calculation is used to assess the viability of two-dimensional Cu/NO₂G, a single-atom copper-doped graphene anchored by nitrogen and oxygen, as an anode material for Li/Na/K-ion batteries. The results show that Cu/NO₂G is stable in terms of thermodynamics and kinetics. It maintains good conductivity before and after the adsorption of Li/Na/K, with theoretical capacities of 1639.9 mAh/g for lithium, 2025.8 mAh/g for sodium, and 1157.6 mAh/g for potassium. In the embedding process of Li/Na/K, the lattice constant changes minimally (less than 1%), indicating excellent cycling stability. Additionally, the migration energy barriers for Li, Na, and K on the surface of Cu/NO₂G are 0.339 eV, 0.209 eV, and 0.098 eV, respectively, demonstrating its superior rate performance. In summary, these results provide a solid theoretical foundation for rationally designing metal single-atom doped graphene as a novel anode material for alkali metal ion batteries. All the data presented in this paper are openly available at <https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00063>.

Keywords: first-principles, ion batteries, graphene, doping

PACS: 31.15.A-, 82.47.Aa, 81.05.ue, 74.62.Dh

DOI: [10.7498/aps.74.20241461](https://doi.org/10.7498/aps.74.20241461)

CSTR: [32037.14.aps.74.20241461](https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00063)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12264029) and the Natural Science Foundation of Jiangxi Province, China (Grant No. 20242BAB25033).

† Corresponding author. E-mail: jphu@nit.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: cyouyang@hotmail.com



氮氧锚定的单原子铜掺杂石墨烯作为碱离子电池负极的理论预测研究

胡军平 梁丝思 段惠贤 田俊程 陈硕 戴柏杨 黄春来 刘宇 吕营 万利佳 欧阳楚英

Theoretical prediction of nitrogen–oxygen–anchored monatomic copper–doped graphene as an anode for alkaline ion batteries

HU Junping LIANG Sisi DUAN Huixian TIAN Juncheng CHEN Shuo DAI Boyang HUANG Chunlai
LIU Yu LYU Ying WAN Lijia OUYANG Chuying

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 74, 033101 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20241461

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241461>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

等离子体对石墨烯的功能化改性

Graphene modification based on plasma technologies

物理学报. 2021, 70(9): 095208 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202078>

第一性原理研究硼掺杂氧化石墨烯对过氧化锂氧化反应的催化机理

First-principles study of catalytic mechanism of boron-doped graphene oxide on oxygen evolution reaction of lithium peroxide

物理学报. 2024, 73(9): 098804 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240197>

VS₂作为锂离子电池负极材料的第一性原理研究

First-principles study of VS₂ as anode material for Li-ion batteries

物理学报. 2024, 73(11): 113101 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231681>

Be掺杂石墨双炔作为锂离子电池负极材料的第一性原理研究

First principles study of Be-doped graphdiyne as anode material for lithium-ion batteries

物理学报. 2024, 73(21): 217301 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240996>

Si_n团簇/石墨烯($n \leq 6$)结构稳定性和储锂性能的第一性原理计算

First-principles study of structural stability and lithium storage property of Si_n clusters ($n \leq 6$) adsorbed on graphene

物理学报. 2021, 70(19): 198101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210521>

In掺杂h-LuFeO₃光吸收及极化性能的第一性原理计算

First principles calculation of optical absorption and polarization properties of In doped h-LuFeO₃

物理学报. 2021, 70(3): 037101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201287>