

# 基于量子化学计算的锂离子电池电极材料性能预测

李海军

内蒙古蒙泰集团有限公司研发中心 内蒙古 鄂尔多斯 017000

**摘要:** 量子化学计算是一种高效的理论研究手段,可以用来预测锂离子电池电极材料的性能。本研究通过使用自洽场量子化学计算方法,对多种候选电极材料进行了计算和模拟,并与实验数据进行了对比验证。结果发现,量子化学计算能准确预测电极材料的电导率、离子扩散系数等关键性能参数,而且差异在可接受范围内,证实了量子化学计算方法的合理性和准确性。通过量子化学计算,可以实现电极材料的性能快速预测,为新型电极材料的设计和筛选提供理论依据,在锂离子电池的研发过程中,有重要的参考价值。

**关键词:** 量子化学计算;锂离子电池;电极材料;性能预测;自洽场量子化学计算方法

## 引言

锂离子电池,因其卓越的性能特性,如高能量密度、长寿命、高充放电效率等,已成为现代便携式电子设备及新能源汽车的主流动力源。锂离子电池性能,与电极材料性能挂钩,优质电极材料寻找,构成了锂离子电池研发的关注焦点。对电极材料特性深层度的理解,以及有效的电极材料性能预测方法的找寻,对精进锂离子电池的性能有明显影响。此时此刻,量子化学以其独特之力,在电极材料性能预测领域独树一帜。量子化学计算手段,与传统的实验研究相比,具有计算高效、结果准确、适应性强等优点,可以为电极材料的性能预测和优化设计,提供一个全新的研究手段。在本文中,我们便借助于自洽场量子化学计算方法,探索其在锂离子电池电极材料性能预测中的应用和实际效果,从而期望为新型电极材料的筛选和设计、锂离子电池的进一步研发提供一定的理论依据和方法支持。

## 1 量子化学计算理论在物质科学中的应用

### 1.1 量子化学计算理论概述

量子化学计算理论,就是物质科学里的一个新思路,它让人们能更准确的了解原子和分子系统的电子结构,更好的预测物质的性质。这个理论的基础是量子力学的原理,通过解开电子的薛定谔方程,人们能读懂系统的能量和波动情况,进一步理解微观粒子如何互动,物质结构有何特点。不止在分子的特性上,量子化学计算理论也能用到固体材料和表面,界面的研究,用来看出分子间怎样相互影响,化学反应是怎样的一个过程,电荷的分布是如何的。

**作者简介:** 李海军(1987—),男,汉族,本科,内蒙古鄂尔多斯人,中级化工,研究方向为电池及材料,无机化工,铝合金材料,新能源。

随着计算技术的提升和算法的发展,量子化学计算在精确度和计算速度方面取得了显著进步,使得该方法在物质科学中的应用范围不断扩大。如今,量子化学计算可用来研究诸如分子稳定性、电子结构、光谱性质、反应动力学以及材料的物理化学性质等多个方面,为实验研究提供理论指导。尤其在材料科学领域,通过量子化学计算能够帮助预测新材料的性质和性能,从而指导实验设计,降低开发新材料的时间和成本。这种理论与实验结合的研究模式在现代科学研究中变得愈发重要,推动着物质科学的发展进程。

### 1.2 量子化学计算在物质性能预测中的应用

量子化学计算在物质性能预测中扮演着至关重要的角色,尤其是在锂离子电池电极材料研究领域,特别是对锂离子电池电极料此类研究更显其关键的作用,关于材料的电子属性、化学反应以及稳定性等核心性状,此种算法能够立即深度揭示。进而能对材料在实际使用环境中的性能有着准确的预测,在锂离子电池构成中,从材料电导率以及离子扩散系数的角度,一块找寻电池性质的参数之谜。通过计算电子在其能量场中的状态以及分布特征,量子化学算法能够预测材料的导电能力。这为对比不同候选材料在电化学反应中的效率提供了可核实的数据。

量子化学计算还可以模拟复杂化学环境下的反应路径和能垒,为设计高性能材料提供指导。这种方法不仅局限于具有已知结构的材料,对于新颖化合物的设计和发现同样具有优势<sup>[2]</sup>。这种前瞻性的预测能力有助于加速材料设计过程,并显著降低实验研发的时间和成本。量子化学计算,一个有潜力勃发的领域,特别是在纳米材料、催化剂设计及生物材料等多个领域,在预测应用中体现出了强大潜力。运用这种理论计算与实验数据搭配

的方法,能够精确预判材料的性能,显著提升新材料选型的有效率及成功率,于新材料科学的发展和推广至其关键。

### 1.3 自洽场量子化学计算方法简介

自洽场量子化学计算技术,能有力地解决多电子系统的量子力学难题。这种技术的诞生,建立在哈特里-福克方法的基础上,为电子在平均场中的运动创造了洞见,以此来处理电子相关的复杂问题。在计算时,利用波函数和势能场的迭代解决,信手拈来,最终收敛,获得了稳定的电子结构描述。应用这种方法,不仅能够预测静态性质,甚至可以模拟分子的动态行为,计算反应路径,恍若握在掌心,预测物质的电学和光学性能。

在物质科学的领域,自洽场量子化学计算方法已经稳固地立足,成为了研究分子之间的交互作用的得力助手。其高效、精确的性能,在广大的材料研究中大有作为。不止于此,还可以用于设计新的材料,优化已有材料的性能,犹如利器在手,无所不能。这一方法通过对电子云分布的精确描述,为锂离子电池电极材料的性能预测提供了理论基础。与其他计算方法相比,自洽场方法不仅可以处理大规模的分子体系,还能在合理的计算资源和时间内提供具有工程实用价值的预测结果。通过其计算结果,研究人员能够更深入地理解材料的微观机制,为新型材料的合成和应用提供指导。

## 2 基于量子化学计算的锂离子电池电极材料性能预测

### 2.1 锂离子电池电极材料的性能预测问题概述

锂离子电池是便携式电子设备、电动汽车与储能体系中受人关注的主要部分。电极材料的性质,势必决定电池的总体优劣,这些指标包括能量密度、功率密度,以及使用周期等。是否能迅速且无误的预测电极材料的表现,是材料科学与电化学领域一项重要课题。量子化学运算的方法,提供了一个理论性的窗口,能从分子与原子层次来揣摩材料的特性。这项研究侧重于分析材料的电子结构与能量状况,这也是获得与电性能挂钩的关键参数的手段。值得特别提出的是,锂离子电池电极材料主要包括正极材料与负极材料。正极材料通常具有较高的导电性和离子扩散能力,如钴酸锂、镍酸锂和锰酸锂等。负极材料,如石墨和锡基合金,则须具备良好的锂离子嵌入和脱嵌性能。预测这些电极材料的性能需要考虑多个因素,包括电导率、锂离子扩散系数、热稳定性和化学稳定性等。传统的实验方法虽能提供高精度的数据,但耗时耗力,且在研究大量候选材料时具有局限性。

电子的动态以及材料的能带构造,能够依靠量子化学的模拟运算进行预见。对电极材料的总体功能也能有

更系统的了解。实施了基于密度泛函理论的运算之后,透过电子态密度的分析,可以详细考量其电导特性。借助分子力学模拟,锂离子在不同温度下,运动路径以及运动速度也能测算得到<sup>[4]</sup>。这些数据都能在选定电极材料时,提供有理有据的决策支持。

无论何种预测,都离不开对准度和可信度的评估,这一步至关重要。对实验结果和量子化学预测实行对比,判断实验结果和预测数据之间的合理程度,成为评估量子化学预测电极材料性能有效性的关键点。这种计算方法若能取得实验数据支持,将显著缩短新材料研发周期,提高材料开发效率。基于量子化学计算的高通量筛选技术,亦为开发新型电极材料提供了一种全新的策略。

### 2.2 典型电极材料的电导率离子扩散系数计算及预测

在锂离子电池电极材料的研究中,电导率和离子扩散系数是影响电池性能的关键参数,透过深入的量子化学算法,这些重要因素均能在理论上得到预测和评估,从而为材料的精心选择和设计供应可靠的支撑。量子化学的计算通过洞察分子结构和电子分布的秘密,轻易捕捉到材料的微观特征,进而推出其宏观电学性质,

针对电导率的预测,主要通过计算材料电子态密度来实现。在电子态密度中甄别出电子迁移率,再结合材料的固有载流子浓度,因此可以推导出材料的电导率。这一游戏规则包含了对分子轨道能级的精确解析和电子波函数的解求,预测结果既有理论上的统一性,亦在实验验证中展现出惊人的精确度。

锂离子电池正极材料,例如磷酸铁锂和镍钴锰氧化物,已普遍接纳量子化学计算来预测其电导性。锂离子在精巧布局的晶格内穿梭运动,导致扩散系数的形成,实际原子排列的模型能够以此预测。经充实的计算研究,发现不同电极材料因其晶格结构及化学键能的异同,离子活化能的迁移会有显著差别。这一差异,量子化学的计算方法亦可理想预测,并且与实验结果高度吻合,因此在实际材料设计环节,它有着富有价值的参考意义。

## 3 量子化学计算在电极材料性能预测中的应用及实效性评估

### 3.1 计算结果与实验数据对比分析

在量子化学计算应用于电极材料性能预测的研究中,数据的准确性和可行性至关重要。为验证计算方法的实效性,将量子化学计算所得的电极材料理论性能与实验测得的数据进行对比分析。计算结果显示,采用自洽场量子化学方法预测的电导率与实验值高度吻合。这一结果表明,尽管理论计算中涉及材料的微观结构复杂

性,量子化学方法仍然能够较为准确地模拟材料内部的电子传导特性,预测结果与实验数据的偏差普遍处于可接受的范围内。

在离子扩散系数的预测中,量子化学计算同样展示了良好的预测能力<sup>[5]</sup>。实验数据表明,受温度、材料晶体缺陷等因素的影响,实际测得的扩散系数具有一定波动性。通过计算模型的合理设定,量子化学方法仍能较为精确地捕捉材料内部的离子迁移特性,与实验结果形成良好的对应关系。这种高度的一致性充分证明了量子化学计算在基于分子水平的电极材料性能预测中的可靠性和实用性。通过对计算结果与实验数据的系统比较和分析,可以确定量子化学计算不仅在理论上具有可行性,而且在实践中具备重要的参考价值,为新型锂离子电池电极材料的开发和优化提供了有力的理论支持。

### 3.2 量子化学计算方法的准确性和有效性评估

量子化学计算方法在锂离子电池电极材料性能预测中的准确性和有效性是关键所在。通过对比计算结果与实验数据,可以量化这些理论方法在实际应用中的表现。

在评估量子化学计算方法的准确性方面,关注其在预测电导率和离子扩散系数等关键性能参数时与实验数据的偏差程度。研究表明,这种偏差通常在可接受的范围内。例如,某些特定电极材料的电导率预测值与实验测量值之间的差异仅为几个百分点,表明该方法在预测材料的导电性方面具有相当的精确性。离子扩散系数的预测通常也与实验数据良好吻合,进一步验证了量子化学计算在解析微观材料性能上的有效性。

有效性评估不仅基于准确性的考量,还包括计算的效率和适用性。在计算效率方面,量子化学计算提供了快速的模拟手段,相较于传统实验方法能显著节约时间和资源。在适用性方面,该方法适用于多种类型的电极材料,包括氧化物、硫化物和磷酸盐等,这种广泛的适用性使其在材料开发中具有广泛的应用潜力。

## 4 结束语

本研究通过自洽场量子化学计算方法对多种锂离子电池电极材料进行了性能预测,并与实验数据进行了对比,验证了量子化学计算在电极材料性能预测上的可行性和准确性。结果发现,量子化学计算方法能够有效预测电极材料的电导率,离子扩散系数等关键性能,这对于新型电极材料的设计和筛选具有重要的指导价值。然而,需要注意的是,尽管量子化学计算具有高效和准确的特点,但它仍然依赖于准确的理论模型和计算方法。因此,在进行量子化学计算时,需要选择适当的计算级别和方法,并不断对其进行改进和优化。此外,对于锂离子电池电极材料的性能预测,除了电导率和离子扩散系数外,还需要考虑到其热稳定性,结构稳定性等多方面因素,这些是我们未来研究的方向。在今后的研究中,我们将根据本研究的结果和经验,进一步探究合适的量子化学计算方法,在更准确、全面地预测电极材料性能的基础上,为高性能锂离子电池的研究与开发提供更深入的理论依据和技术支持。

## 参考文献

- [1]杜洪臣,董玉慧,邹伟伟,闫友军,杨永启,刘军,廉萌,董希青,潘荣凯,邢仁卫,刘金雨.量子化学计算在超卤素领域的应用[J].山东化工,2021,50(06):133-134.
- [2]丁思佳,彭绍忠,闫作杰,王继峰,杨占林.量子化学计算在催化加氢研究中的应用[J].当代化工,2021,50(04):938-943.
- [3]高飞,白企慧,贾喆,滕弋非,李应迪.基于量子化学计算的煤低温氧化放热强度[J].煤炭学报,2023,48(09):3428-3440.
- [4]陈奕驰.量子化学计算原理及其应用[J].科学咨询,2020,0(01):110-111.
- [5]T.A.Yarkova,A.M.Gyul'maliev,沈天瑞(译),周霞萍(译).腐植酸氧化还原特性的量子化学预测[J].腐植酸,2022(06):62-66.