

리튬 친화성 인 도핑 $g-C_3N_4$ 계면층에 의한 균일한 리튬 핵 생성 및 성장 거동노영일, 김희탁[†]

한국과학기술원

(heetak.kim@kaist.ac.kr[†])

리튬 금속은 낮은 환원 전위와 (-3.04 V vs SHE) 높은 이론용량 (3,860mAh/g)으로 인해 고에너지 밀도 차세대 배터리 음극 후보로 각광받고 있습니다. 하지만 리튬 금속의 불균일한 성장 및 전해질과의 지속적인 부반응은 리튬의 가역성을 떨어뜨리는 문제점을 가지고 있습니다. 리튬금속의 가역성은 리튬 핵 생성 및 성장 과정에 크게 의존하므로 이를 제어하는 것은 실용적인 리튬 금속 배터리 개발을 위한 중요한 과제 중 하나입니다. 이 연구에서는 리튬 이온과 리튬 원자 모두에 친화성을 갖는 인 도핑 $g-C_3N_4$ (PCN) 계면층을 개발하였으며 분광 및 전기화학적 분석을 통해 리튬이온과 PCN 사이의 강한 상호작용이 전자 전달 반응을 촉진한다는 것을 확인하였습니다. 또한 PCN 계면층 아래에서 일어나는 리튬전착은 평면 형태로 점진적으로 성장함으로써 전해질 분해를 완화시킬 수 있습니다. 전산모사를 통해 리튬이 삽입된 PCN의 인과 리튬 원자간의 궤도 혼성화는 리튬 원자와의 친화성을, 인과 연결된 질소의 강화된 루이스 염기성은 리튬 이온과의 친화성을 극대화시킬 수 있습니다. PCN 계면층을 사용한 리튬 대칭 셀은 2mA cm^{-2} 및 2mAh cm^{-2} 에서 400회 이상 안정하게 구동하였습니다. 그리고 PCN 계면층을 도입한 Li/NCMB11 파우치 셀은 희박 전해질 조건 (3g/Ah) 및 낮은 N/P 비율(2.8)에서도 330 사이클동안 70% 이상의 용량을 유지하며 안정적으로 작동하였습니다.