

在线电化学质谱仪在锂离子电池研究中的应用

能源储存和转换技术是当今社会可持续发展的一种重要的技术，由于电化学储能系统具有各种优势，如污染少、循环效率高、寿命长以及成本低等，而备受关注。锂离子电池储能技术由于其能量密度高、循环寿命长等优点，具有广阔的应用前景。

在线电化学质谱可以准确定量锂离子电池反应过程中消耗和生成气体的量，通过结合电池反应时通过的电量 Q ，研究锂离子电池的可逆主反应和不可逆副反应；锂离子电池发生副反应时通常伴随着气体的产生，如 H_2 、 CO 、 CO_2 等，所以测定气体种类和含量，并结合电量计算和同位素跟踪，可以进一步明确正、负极材料、电解液或 SEI 膜在锂离子电池运行中时的变化。

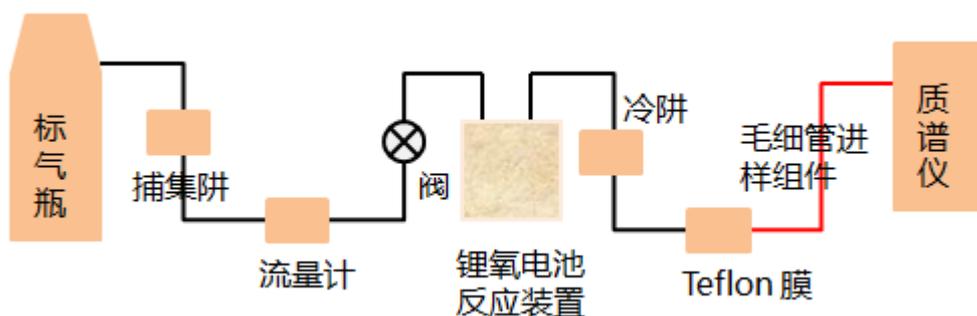


图 1 在线电化学质谱的结构示意图

在线电化学质谱系统主要包括三大部分：载气传输调节系统、电化学反应装置和质谱仪。载气首先由气体钢瓶进入捕集阱，排除杂质气体（主要是 H_2O 和 CO_2 等）对实验的干扰，然后进入流量控制器。流量控制器对实验测定至关重要，流速太慢容易降低气相产物的转移效率，流速太快使得电解液挥发加剧，所以用户可以根据实验体系的不同，对流量进行调节。阀可以控制载气的开关。锂离子电池反应装置内可形成螺旋梯度气体流场，使得气流更加稳定，大大减小涡流情况的发生概率，也可提高气体传输效率。冷阱和 Teflon 膜可除去样气中的有机电解液，保证数据的准确性。最后，待测气体进入采样毛细管进样组件，经加热恒温后进入在线质谱仪中。电子轰击型离子源（EI）可产生一定能量的电子，并在电离室中将待检测化合物电离形成分子离子碎片及碎片离子，由质量分析器筛

选所需离子后按质荷比大小依次抵达检测器，信号经过放大、记录得到气体变化趋势图。

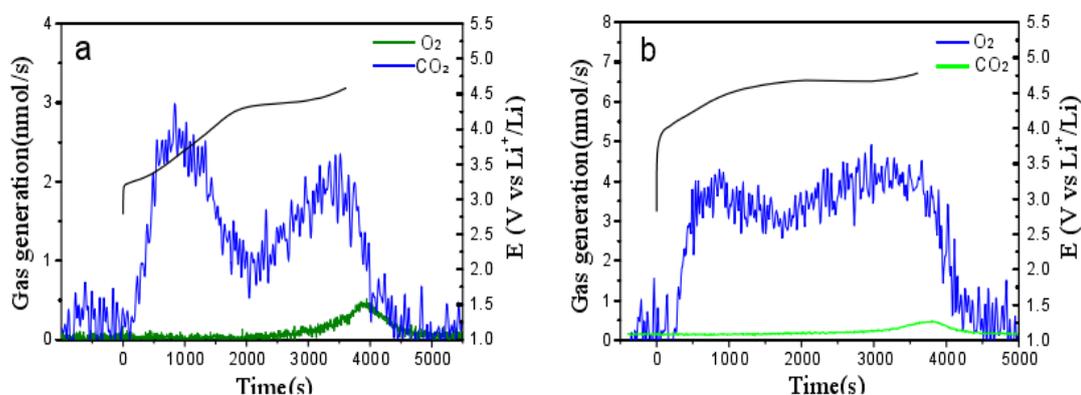


图 2 锂氧电池的 MSCV 图

由上图可见，在线电化学质谱可测定锂氧电池中反应物 O_2 和副产物 CO_2 随电极电位和时间的变化。在线电化学质谱技术可同时确定每种产物的法拉第电流随电极电位或时间的变化，通过时间轴向电势轴变换而获得质谱伏安图 (Mass Spectrometric Voltammograms, MSCV)，结合电化学反应循环伏安，得到相关反应机理和定量信息。

综上所述，在线电化学质谱作为一个非常重要的分析手段，可以对锂离子电池系统储能器件的安全性和性能研究起到至关重要的气体进行检测，因此电化学在线质谱技术对于深入研究锂离子电池储能器件中存在的重大科学问题和提高储能器件的产品质量方面展现了广阔的应用前景。

关于舜宇恒平过程质谱仪器

上海舜宇恒平科学仪器有限公司自 2009 年推出过程质谱仪以来，以多年的研发和生产实力为基础，依托超过 10 年的市场应用经验，针对生物、化工催化、新能源等领域的客户需求，提供多样化的在线质谱解决方案。

服务电话：021-64959872