

2023 年臺灣國際科學展覽會 優勝作品專輯

作品編號 100018

參展科別 工程學

作品名稱 探討不同載劑對預鋰化過程與結果之影響

得獎獎項

就讀學校 臺北市立第一女子高級中學

指導教師 藍崇文、陳祖望

作者姓名 李幸芸、呂羽涵

關鍵詞 預鋰化、鋰離子電池、載劑

作者簡介



大家好，我們是北一女中數理資優班的高二學生呂羽涵(左)、李幸芸(右)，因為對科學研究感到興趣，我們在高一時投入化學專題研究，並決定參與國際科展，將我們研究的心血分享給大家，希望能一同切磋學習。另外，特別感謝在過程中指導我們的藍崇文教授，總是照顧著我們的郭之穎學姐、王耀賢學長、洪世觀學姐，給予我們很多建議的陳祖望老師，以及指導我們撰寫英文內容的顏如美老師。

摘要

鋰離子電池前幾個迴圈中，庫倫效率低（ $CE < 100\%$ ），表示電池負極中殘留了一些不可逆反應後的產物(Li^+)，鋰離子電池的預鋰化可提高電池的庫倫效率，並降低不可逆產物的比例。本研究目的為探討預鋰化過程中加入的載劑種類對反應速率及活性鋰比例的影響，以找出最佳載劑供日後使用。文獻中提及具有苯環的載劑，其預鋰效果較佳，因此本研究比較 biphenyl (聯苯)、naphthalene (萘)及 benzophenone (二苯基甲酮)三種載劑對預鋰化過程與結果之影響。研究過程的部分，首先藉由實驗探討最佳測量活性鋰比例的方法，其次探討短時間內精準預鋰鋰離子電池陽極材料的方式，最後進行實驗比較不同載劑。實驗結果表示 biphenyl (聯苯)的活性鋰比例最高且反應時間最短，naphthalene (萘)其次，benzophenone (二苯基甲酮)的預鋰效果最差，因此 biphenyl (聯苯)為本研究中最優的載劑。另外，透過實驗探討可得出將預鋰材料在氫氣環境中加水反應為最佳的活性鋰比例測量方式，且減少 tetrahydrofuran(四氫呋喃)含水量及提高載劑濃度有助於短時間內精準預鋰。本研究未來可進一步探討鈍化與燒結對預鋰效果的影響，日後亦可應用於預鋰鋰離子電池的載劑選擇，進而運用在儲能市場及電動車產業。

Abstract

In the first few charge-discharge cycles of the lithium-ion battery, the Coulombic efficiency is low ($CE < 100\%$), indicating that some products (Li^+) are left in the negative electrode of the battery after the irreversible reaction. Prelithiation is a strategy to compensate for the loss of the active Li during the initial cycling and to improve the Coulombic efficiency of the battery by reducing the proportion of irreversible products. The purpose of this study is to explore the effects of the type of carrier added in the prelithiation process on the reaction rate and the ratio of active lithium, and to figure out the best carrier for future use. Literature has shown that carriers with the benzene ring have better effects on prelithiation. Therefore, we choose to compare the effect of three types of carriers with benzene ring, namely biphenyl, naphthalene, and benzophenone, on prelithiation. We discuss the method for accurately prelithiating anode materials for lithium-ion batteries in a short time and the optimal method to measure the ratio of active lithium. We also compare the effects of different carriers on the ratio of active lithium. The finding results of the experiment are as the following. First, biphenyl can dope the most active Li in the Si-based anode and takes the least time to react, so biphenyl is the best carrier in this study. Second, adding water to the prelithium material in an argon atmosphere is the best way to measure the ratio of active lithium. Third, both reducing the water in the aqueous solution of tetrahydrofuran and raising the concentration of the carrier help prelithiate the negative electrode of the battery. In the future, we may further explore the influence of passivation and sintering on the effects of prelithiation. Most important, this study can be applied to the selection of carrier in lithium-ion battery prelithiation, which is helpful to energy conservation or electric vehicle industry.

壹、前言

一、研究動機

隨著全球能源政策及電動車的推廣，鋰離子電池需求量顯著提升，同時近年疫情影響，居家辦公與遠距教學興盛，鋰離子電池在儲能市場中更顯重要，此外作為可重複使用的電池，鋰離子電池更是綠色能源與永續發展的未來趨勢。我們期待以預鋰的方式降低不可逆反應的比例。為使實驗時間降低且提升預鋰效果，本研究欲探討短時間內精準預鋰鋰離子電池陽極材料的方法，再比較不同種類的載劑對預鋰化速率及活性鋰比例的影響，以找出最佳載劑供日後使用。

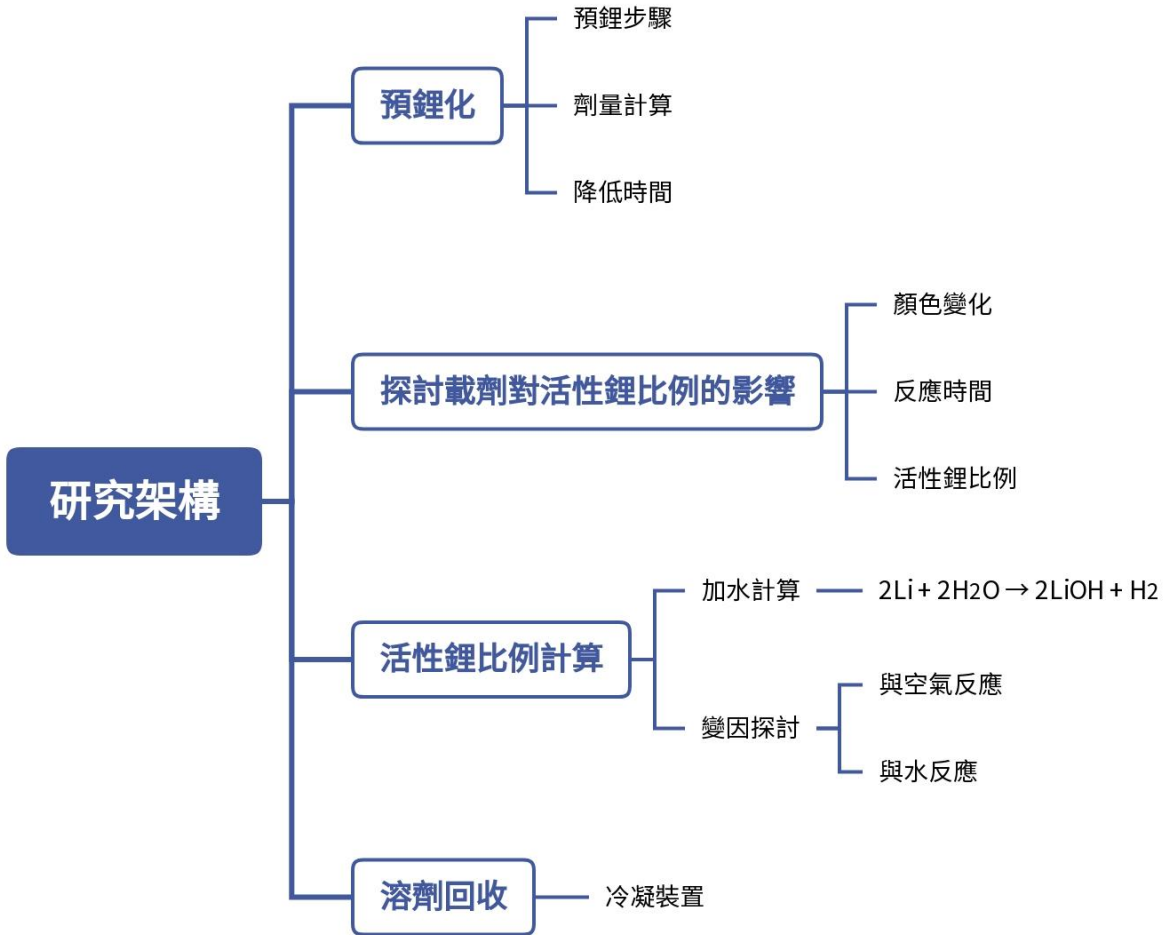
二、研究目的

- (一) 探討短時間內精準預鋰鋰離子電池陽極材料的方法。
- (二) 探討載劑種類對預鋰化過程速率的影響。
- (三) 探討載劑種類對活性鋰比例的影響。
- (四) 結合預鋰化過程速率及活性鋰比例，尋找最佳載劑。
- (五) 探討最佳測量活性鋰比例的方法。

三、文獻回顧

余晨露, 田曉華, 張哲娟, & 孫卓. (2020)指出 SiO_x 首次嵌鋰過程生成的 Li_4SiO_4 和 Li_2O 不可逆，且 Jin, L., Shen, C., Wu, Q., Shellikeri, A., Zheng, J., Zhang, C., & Zheng, J. P. (2021)指出目前鋰離子電池的前幾迴圈正面臨活性鋰流失的問題。因此本研究欲以預鋰化為主題，解決上述困境。

貳、 研究方法或過程



圖一

圖一為此研究的研究架構，本研究分為四個部分，第一部分為預鋰化，進行各材料的劑量計算，並以實驗確定縮短實驗時間且準確預鋰的步驟；第二部分載劑種類，分別探討載劑種類對顏色變化、反應時間及活性鋰比例的影響；第三部分活性鋰比例測量，將預鋰後的材料加水，以其重量變化計算活性鋰比例，並藉由變因探討得出最準確測量活性鋰比例的方法；第四部分溶劑回收，我們以冷凝裝置進行回收，以達到重複使用、永續環保的目標。以下為各部分的詳細內容：

一、預鋰化

(一)預鋰步驟

(以載劑 biphenyl、溶劑 THF 為例)

1. 組合矽膠塞、樣品瓶、軟管，並放入攪拌子(如圖二)
2. 在手套箱內，於樣品瓶中依序加入計算而得劑量的鋰粒、SiO 粉末、載劑、溶劑
3. 將樣品瓶置於加熱板上，加熱 60°C，並確定反應發生顏色變化
4. 加熱適當時間後(約 3-4 小時)，觀察樣品瓶內顏色變化
5. 一根軟管通入氫氣，另一根打開，放在 80°C 加熱板上烤乾溶劑



圖二

(二)劑量計算

欲配置 2M 的載劑、預鋰後樣品中含有 10% 鋰且每添加 1g SiO 需要加入 3mL 溶劑：

設加入 1g SiO，

則需加入鋰箔 x g，溶劑 THF(四氫呋喃) y mL、載劑 biphenyl (聯苯) z g

$$(x + 1) \times (100\% - 10\%) = 1$$

$$1 : 3 = 1 : y$$

$$z = y \div 1000 \times 2 \times 154 (\text{聯苯分子量})$$

$$\rightarrow x \doteq 0.11, y = 3, z = 0.924$$

需加入鋰箔約 0.11g、THF 約 3mL、biphenyl 約 0.924g。

另外，naphthalene 的分子量約為 128，由上述算式計算，需加入約 0.768g。

而 benzophenone 的分子量約為 182，同理需加入約 1.092g。

(三)優化預鋰步驟

預鋰過程中的變因不同，其反應時間及活性鋰比例的結果會有影響，因此在「優化預鋰步驟」中，我們將以 biphenyl 做為載劑，分別探討預鋰過程會影響反應時間及活性鋰比例的變因，以完善後續實驗的預鋰步驟，降低實驗誤差並提升實驗效率。

二、探討載劑種類對預鋰化之影響

(一)探討載劑種類對活性鋰比例的影響

載劑在預鋰化過程中扮演運輸工具的角色，透過載劑可將 Li 帶至 SiO/C 中，形成預鋰材料，載劑的沸點會影響預鋰加熱反應的溫度，而不同的載劑對預鋰化材料的活性鋰比例亦有影響，另外文獻中亦提及以有苯環的載劑較佳。本實驗探討不同種類的載劑對活性鋰比例之影響，以不同種載劑同為 2M 的濃度進行實驗，以下為使用之載劑：

1. biphenyl (聯苯)：
兩個苯基相連形成的化合物，沸點 255°C，Ming-Yan Yan, Ge Li, Juan Zhang, Yi-Fan Tian, Ya-Xia Yin, Chuan-Jian Zhang, Ke-Cheng Jiang, Quan Xu, Hong-Liang Li, and Yu-Guo Guo (2020)以聯苯進行預鋰化。
2. naphthalene (萘):
一種多環芳香烴，沸點 218°C，Jang, J., Kang, I., Choi, J., Jeong, H., Yi, K. W., Hong, J., & Lee, M. (2020)以萘進行預鋰化。
3. benzophenone (二苯基甲酮):
一種含有兩個苯環的酮類，沸點 305.4°C。

(二)探討載劑種類對預鋰化時間的影響

以不同載劑進行預鋰化，其反應時間有所差異，反應時間對於實驗所需時間有所影響，因此本實驗欲探討不同載劑對預鋰化時間的影響。先將各載劑隔夜反應，以確保其反應完全，並記錄反應前後樣品顏色變化，做為日後實驗確認反應完全的依據，實驗進行時將樣品顏色變化完全的時間視為預鋰化時間，以此探討載劑種類對預鋰化時間的影響。

(三)探討載劑種類對反應顏色的影響

不同載劑預鋰過程顏色變化有所差異，本實驗欲探討不同載劑在不同反應時間及反應後顏色差異。

三、活性鋰比例測量

(一)預鋰材料與空氣反應

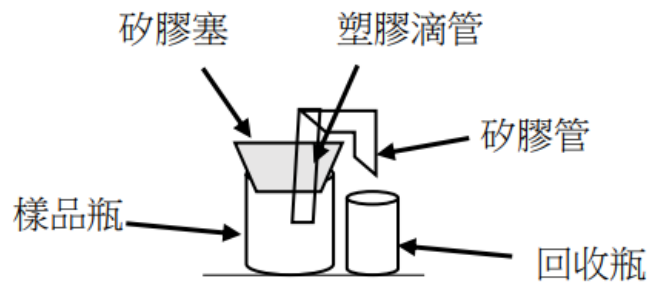
將裝有預鋰材料的樣品瓶矽膠塞拔開，使預鋰材料與空氣反應。此外，實驗前推估預鋰材料與空氣反應時主要與氧氣反應，因此將與空氣反應視為與氧氣反應，反應式如下： $4\text{Li} + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{Li}_2\text{O}$ 。以上列反應式得出計算算式：反應後活性鋰比例 = 反應前後重量變化 \div (60-28) \times 28 \div 原材料重。

(二)預鋰材料與水反應

考慮預鋰材料與水反應其反應物較為單一，因此將預鋰材料加水反應，以蠕動幫浦使樣品在氬氣的環境與水反應，反應式如下： $2\text{Li} + 2\text{H}_2\text{O} \rightarrow 2\text{LiOH} + \text{H}_2$ 。以上列反應式得出計算算式：反應後活性鋰比例 = 反應前後重量變化 \div (48-14) \times 14 \div 原材料重。

四、溶劑回收

圖三為溶劑回收裝置，將此樣品瓶放於加熱板上加熱，溶劑因此可蒸發形成水蒸氣，當接觸到空氣後即冷凝形成水蒸氣，並隨矽膠管流入回收瓶，以做到重複利用及永續環保的目標。



圖三

參、研究結果與討論

本研究的實驗結果可分成三個階段，首先是「探討如何計算活性鋰比例」及「探討如何在短時間內預鋰」的實驗設計，其次是「探討載劑種類對活性鋰比例的影響」的變因研究。

在「探討如何計算活性鋰比例」的實驗設計階段中，我們將實驗分成三個部分。

一、樣品與氧氣反應形成氧化鋰，計算活性鋰比例

(一) 計算原理

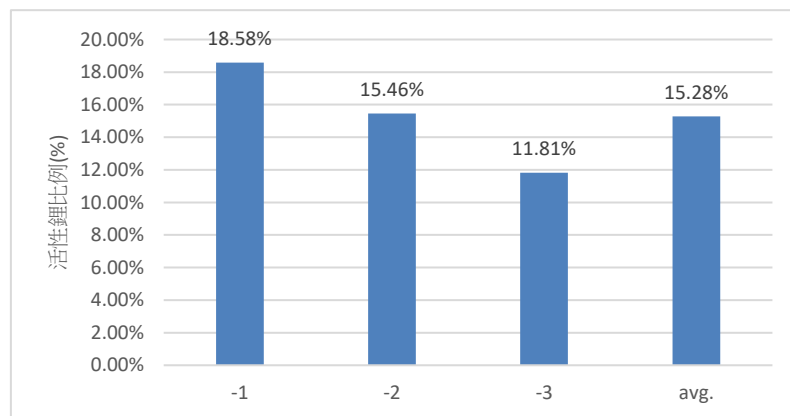
含鋰材料置於空氣中，與氧氣反應後可形成氧化鋰（反應式 $4\text{Li} + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{Li}_2\text{O}$ ）。由反應式可知，若生成 2 莫耳的氧化鋰，會消耗 4 莫耳鋰，相當於材料每生成 60 克氧化鋰，就消耗 28 克的金屬鋰。因此，在假設材料完全與氧氣反應形成氧化鋰的條件下，由上述可得以下算式：

反應後活性鋰比例 = 反應前後重量變化 ÷ (60-28) × 28 ÷ 原材料重

(二) 實驗步驟

1. 準備三個樣品瓶，做三份 10% 活性鋰的含鋰樣品與氧氣反應的實驗
2. 在手套箱內分別於各個樣品瓶裝入含 10%活性鋰的樣品約 0.6g
3. 將樣品瓶旋開瓶蓋置於 200°C 的加熱板上加熱
4. 隔夜烤乾後每兩小時秤量一次重量，待重量停止變動後即結束實驗
5. 從重量變化反推原樣品所含活性鋰比例
(本次樣品理想結果為 10%)

(三) 實驗結果



由上圖可見，以氧氣與鋰反應形成氧化鋰的反應推測活性鋰比例所得結果誤差較大，且反應時間也較長，不適合作為後續實驗計算活性鋰比例的方式。因此，我們在後續的實驗設計中，嘗試以水與鋰反應形成氫氧化鋰的反應計算樣品的活性鋰比例。

二、樣品在空氣下與水反應，計算活性鋰比例

(一) 計算原理

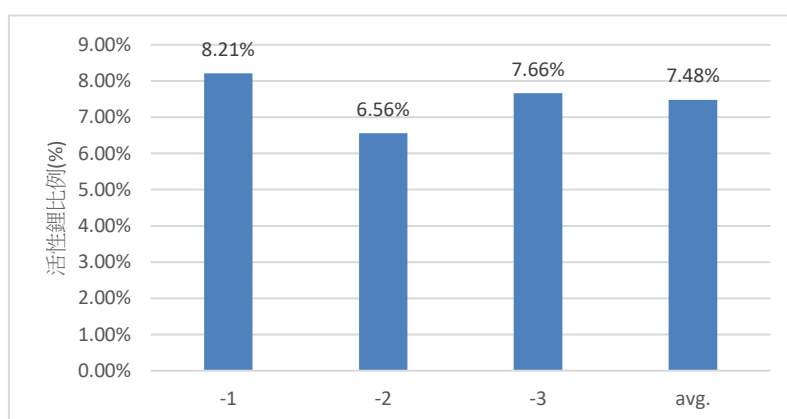
含鋰材料置於空氣中，與氧氣和水氣反應後可形成氧化鋰及氫氧化鋰（反應式 $2\text{Li} + 2\text{H}_2\text{O} \rightarrow 2\text{LiOH} + \text{H}_2$ ）。由反應式可知，若生成 2 莫耳的氫氧化鋰，會消耗 2 莫耳鋰，相當於材料每生成 48 克氫氧化鋰，就消耗 14 克的金屬鋰。因此，在假設材料完全與水氣反應形成氫氧化鋰的條件下，由上述可得以下算式：

反應後活性鋰比例 = 反應前後重量變化 ÷ (48-14) × 14 ÷ 原材料重

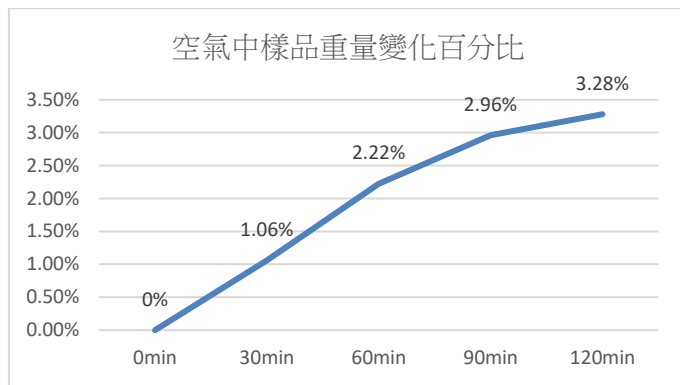
(二) 實驗步驟

1. 準備三個樣品瓶，做三份 10% 活性鋰的含鋰樣品加水的實驗
2. 從手套箱內拿出含 10% 活性鋰的樣品約 0.7g
3. 分裝每瓶樣品瓶約 0.15g 材料(計時分裝時間，需在 10 分鐘以內)
4. 在每個樣品瓶內分別用 pipette 滴入 500uL 純水
5. 等待約 10 分鐘
6. 將鋰箔放置於加熱板上，120°C 將其烤乾，每 15 分鐘秤量一次重量
7. 待重量停止變動後即結束實驗，並從重量變化反推原樣品所含活性鋰比例 (本次樣品理想結果為 10%)

(三) 實驗結果



從上圖可見，以水與鋰反應形成氫氧化鋰的比例推測活性鋰比例所得結果誤差已較與氧氣反應計算所得的結果小，相較之下較適合作為後續實驗計算活性鋰比例的方式。



但是又如上圖表所示，含 10% 活性鋰的樣品置於空氣中時，兩個小時內中重量就增加了約 3.3%。因此，為避免在空氣中反應時，以及烤乾多餘的水的過程中，仍有樣品中的鋰與氧氣、二氧化碳或空氣中其他氣體反應而造成重量變化，我們再次改良實驗設計，決定自製通氫氣的裝置(示意圖詳見 p.8 圖二)，並在其中進行實驗。

三、樣品在自製通氫氣的裝置下與水反應，計算活性鋰比例

(一) 計算原理

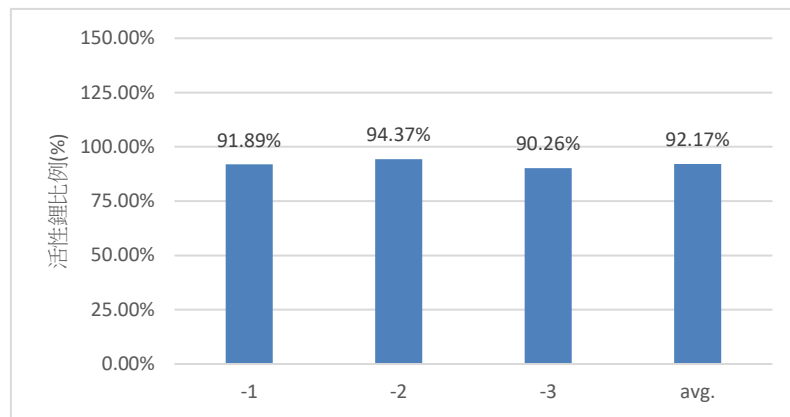
含鋰材料置於空氣中，與氧氣和水氣反應後可形成氧化鋰及氫氧化鋰（反應式 $2\text{Li} + 2\text{H}_2\text{O} \rightarrow 2\text{LiOH} + \text{H}_2$ ）。由反應式可知，若生成 2 莫耳的氫氧化鋰，會消耗 2 莫耳鋰，相當於材料每生成 48 克氫氧化鋰，就消耗 14 克的金屬鋰。因此，在假設材料完全與水氣反應形成氫氧化鋰的條件下，由上述可得以下算式：

$$\text{反應後活性鋰比例} = \text{反應前後重量變化} \div (48-14) \times 14 \div \text{原材料重}$$

(二) 實驗步驟

1. 準備三個樣品瓶，做三份鋰箔加水的實驗
2. 在手套箱內分別在三個樣品瓶內置入約 0.05g 的鋰箔
3. 在每個樣品瓶內分別用 pipette 滴入 500uL 水(須確定有滴在鋰箔上)
4. 將樣品瓶置於通了氫氣的環境中，確保鋰箔不跟氧氣或二氧化碳結合
5. 將樣品瓶置於加熱板上加熱烤乾，每 30min 秤量一次重量(半小時內以 70-80°C 加熱，接著以 100-105°C 加熱)
6. 待重量停止變動後即結束實驗，並從重量變化反推鋰箔所含活性鋰比例(理想結果為 100%，即可知本實驗方式正確，能有效測得樣品活性鋰比例)

(三) 實驗結果



從上圖可見，在自製通氫氣的裝置中使樣品中的鋰和水反應生成氫氧化鋰推知活性鋰比例的實驗結果相較與以前有顯著進步，且計算所得結果與理論值相差僅約 8% (可能更少，因為鋰箔儲存時原本可能就已經有少部分被氧化)，所以我們目前暫定會使用次此方式計算我們後續進行載劑實驗時需測量的活性鋰比例。

(四) 實驗裝置改良

經過數次實驗後，我們將實驗裝置進行改良，改以樣品瓶、矽膠塞及軟管組合，將樣品在手套箱內配製，而後續樣品反應時將軟管以止水夾夾住避免瓶內樣品與空氣反應。另外，在樣品加水進行活性鋰比例測量時，將軟管一邊夾住，另一邊以蠕動幫浦加水，以使樣品瓶內維持氫氣環境。詳細活性鋰比例測量步驟如下：

1. 將兩邊軟管以止水夾夾住，其中一邊連接雙 T 接管
2. 將雙 T 接管其餘接頭連接水、真空機、氫氣
3. 打開真空機將軟管抽真空並打開氫氣保持氫氣環境
4. 打開連接 T 字頭的止水夾
5. 以 5rpm(3.96mL/min)的蠕動幫浦加水 46 秒(3mL)
6. 以止水夾夾住兩邊軟管
7. 在加熱板上以 80°C 加熱反應 1 小時
8. 將矽膠塞移除，加熱烤乾預鋰材料(將溫度緩慢上升至 100°C)
9. 計算活性鋰比例

在「探討如何在短時間內預鋰」的實驗設計階段中，我們知道預鋰過程主要還蓋涵蓋四種角色，鋰源、矽基、載劑與溶劑。其中，鋰源、載劑及溶劑反應後形成鋰劑，能預鋰氧化還原電位比其高的陽極材料。

在改變變因進行探究前，為簡化實驗步驟並加快反應速率，經過屢次實驗後我們選擇使用鋰粒作為鋰源以取代鋰箔以加快反應速率。又因預鋰過程全程均須在氬氣環境下進行，但若在手套箱內進行恐提高實驗難度使得實驗更繁複，因此我們選擇在預鋰過程中以軟管、止水夾、蠕動幫浦及真空抽氣閥形成一個模擬手套箱內的氬氣環境，用以導入水進行後續活性鋰比例測定的實驗。

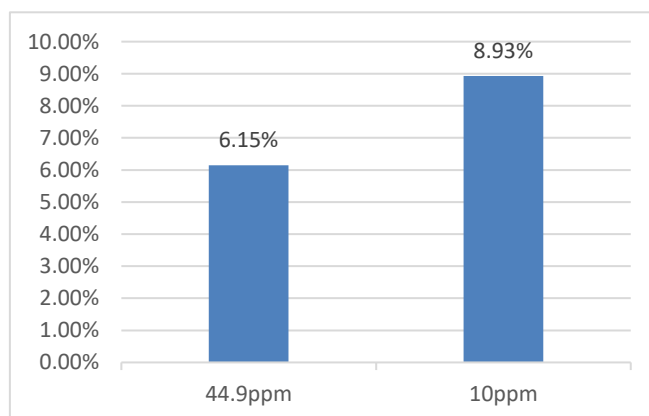
經過多次設計與實驗後，我們得出反應最快且合理的實驗步驟如下：

1. 將樣品瓶、矽膠塞、攪拌子組合好並秤重，再分別送進手套箱
2. 在樣品瓶內裝入鋰粒、SiO/C、載劑、THF，並送出手套箱
3. 以蠕動幫浦導入 THF(45s, 5rpm, 約 3mL)
4. 在加熱板上使之反應(約 60°C, 180min)
5. 在加熱板上烤乾 THF(約 80°C, 90min)

而在「探討如何在短時間內預鋰」的實驗設計階段中，我們發現以下前兩個變因對預鋰後陽極材料的活性鋰比例有顯著影響，而最後一個變因則與提升預鋰過程的反應速率相關，故對其進行個別說明。

一、THF 含水量多寡對預鋰後樣品活性鋰比例有顯著影響

本實驗分別以含 10ppm、44.9ppm 水的 THF 為載劑探討含水量多寡是否對預鋰後樣品活性鋰比例有顯著影響。



由上圖可知，含水量高的 THF 將導致部分鋰源直接與其中的水反應，間接影響預鋰效果，故最後材料預鋰後所測得的活性鋰比例較含水量低者低了許多。因此，後

續實驗中我們都將先測量 THF 含水量，若在 10ppm 上下，方可以其進行實驗。

二、載劑劑量對樣品反應時間的影響

本實驗分別以 0.1M、2M naphthalene(萘)為載劑探討載劑劑量對樣品反應時間的影響。

觀察實驗過程的顏色變化，0.1M naphthalene(萘)與鋰完全反應，需經過隔夜的反應過程，大約耗時 12 小時以上；而 2M naphthalene(萘)與鋰完全反應，則大約僅需耗時 4 小時。







由上述可知，載劑劑量對樣品反應時間有顯著影響，濃度越高反應越快，故後續實驗將以 2M 濃度的載劑進行預鋰。

在「探討載劑種類對活性鋰比例的影響」的變因研究中，我們目前以 biphenyl(聯苯)、naphthalene(萘)、benzophenone(二苯基甲酮)作為載劑，觀察樣品預鋰過程中的各種現象與預鋰後的活性鋰比例。

一、不同載劑遇到鋰源，反應會呈現不同顏色

反應成鋰劑的過程中，當載劑與鋰反應時，溶液將會由黑色變成其他不同顏色。而在載劑與鋰反應結束，鋰完全嵌入材料中(本實驗以鍍碳氧化矽為例)，便不再呈現反應時的顏色，而呈現無色，但因為鍍碳氧化矽本身為黑色，故即可觀察到溶液顏色重新變回黑色。

以下是不同載劑形成鋰劑的反應前後，所呈現的溶液顏色：

Biphenyl	Naphthalene	Benzophenone
反應時		
 深藍綠色	 深綠色	 深藍色
反應後		
 黑色	 黑色	 黑色

由上圖表可知，biphenyl(聯苯)與鋰反應為深藍綠色，naphthalene(萘)與鋰反應為深綠色，而 benzophenone(二苯基甲酮)與鋰反應為深藍色。我們可以藉由觀察溶液的顏

色變化判斷載劑與鋰源是否進行反應，又鋰劑與陽極材料是否完全反應。

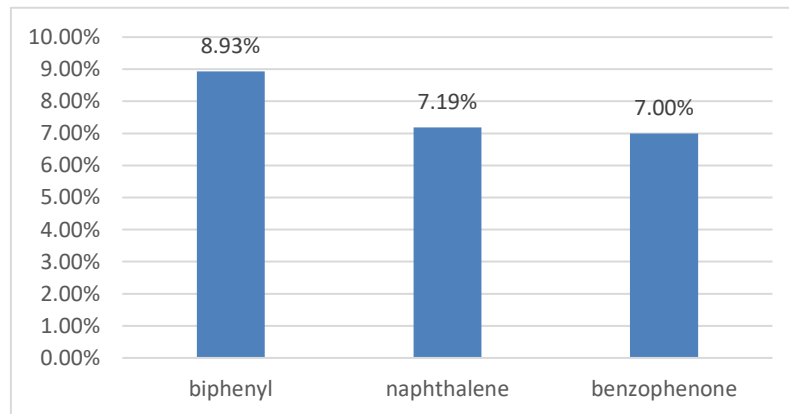
二、不同載劑遇到鋰源，反應快慢有顯著差異

本實驗探討 biphenyl(聯苯)、naphthalene(萘)和 benzophenone(二苯基甲酮)三種載劑和鋰反應的速率。

觀察實驗過程的顏色變化，2M biphenyl(聯苯)與鋰(劑量詳見研究設計)完全反應，大約需耗時 3 小時；2M naphthalene(萘)與鋰(劑量詳見研究設計)完全反應，大約需耗時 4 小時；2M benzophenone(二苯基甲酮)與鋰(劑量詳見研究設計)完全反應，大約需耗時 4.5 小時。

由上述可知，以 biphenyl(聯苯)作為載劑形成鋰劑的反應最快。

三、由不同載劑組成的鋰劑，對陽極材料的預鋰效果不同，測得的活性鋰比例高低不同



從上圖可見，以 biphenyl(聯苯)作為載劑所形成的鋰劑，對陽極材料的預鋰效果最佳，材料預鋰後測得的活性鋰比例最高。

綜合載劑與鋰源完全反應所需時間的實驗，比較載劑種類可整理成以下圖表：

	Biphenyl	Naphthalene	Benzophenone
反應速率	最快	中等	最慢
預鋰效果 (活性鋰比例)	最佳 (最高)	中等	最差 (最低)

由上圖表可知，biphenyl(聯苯)不只反應最快，預鋰效果也最佳，是三種藥品中預鋰效率最高者，最適合作為預鋰過程中的載劑。

由上述實驗結果中，可統整出三個面向進行討論：

一、載劑種類選擇

文獻中提及載劑中若含有苯環，其預鋰效果較佳，因此本次實驗選擇各種有苯環的載劑進行實驗比較。另外，苯環若連結官能基，預鋰效果可更為提升，惟價格較為昂貴，因此未來可再探討其餘載劑的預鋰效果及其經濟價值，以符合產業使用需求。

二、均勻化

均勻化的過程大致可以分成鈍化與燒結兩個步驟，鈍化能幫助預鋰後的材料不易被氧化，而燒結能幫助材料表面的鋰混入材料的結構當中。其中，燒結溫度與鈍化劑量均會影響均勻化的效果，進而影響預鋰後陽極材料在電池中的表現。

三、未來展望

目前從實驗結果已經得到鈍化後材料活性鋰比例較低，但若想將實驗結果整理成準確數字，提供工業製程對鈍化劑量及鈍化層厚度的參考，則未來需再進行鈍化劑量及所形成的鈍化層厚度對活性鋰比例的測定，盼能從其中找到最薄卻包含最多活性鋰的製成方式。

肆、 結論與應用

一、 結論

- (一) THF 含水量越少其活性鋰比例越高，需確認 THF 含水量再進行實驗。
- (二) 載劑劑量越高其反應時間越快，可降低實驗時間。
- (三) 載劑與鋰反應後所形成的鋰劑，biphenyl(聯苯)為深藍綠色，naphthalene(萘)為深綠色，而 benzophenone(二苯基甲酮)為深藍色。
- (四) biphenyl(聯苯)作為載劑形成鋰劑的反應最快，其次為 naphthalene(萘)，而 benzophenone(二苯基甲酮)反應最慢。
- (五) 以 biphenyl(聯苯)作為載劑所形成的鋰劑，對陽極材料的預鋰效果最佳，材料預鋰後測得的活性鋰比例最高。
- (六) 將預鋰材料再氫氣環境加水反應為最佳活性鋰測量方法。

二、 應用

- (一) 以 biphenyl(聯苯)預鋰可縮短反應時間並提高活性鋰比例。
- (二) 以更準確且省時的方法進行預鋰。
- (三) 預鋰化使鋰離子電池首次庫倫效率提升。
- (四) 預鋰化以減少充放電鋰離子電池產生不可逆反應物的比例。

伍、 參考文獻

1. 余晨露, 田晓华, 张哲娟, & 孙卓 (2020) 锂离子电池 硅基负极比容量提升的研究进展. 储能科学与技术
2. Jin, L., Shen, C., Wu, Q., Shellikeri, A., Zheng, J., Zhang, C., & Zheng, J. P. (2021). Pre-Lithiation Strategies for Next-Generation Practical Lithium-Ion Batteries. *Advanced Science*, 8(12), 2005031.
3. 李辉阳, 朱思颖, 李莎, 张桥保, 赵金保, 张力 (2021) 锂离子电池硅氧化物负极首次库伦效率的影响因素与提升策略
4. Juyoung Jang, Inyeong Kang, Jinkwan Choi, Hyangsoo Jeong, Kyung-Woo Yi, Jihyun Hong, and Minah Lee (2020) Molecularly Tailored Lithium – Arene Complex Enables Chemical Prelithiation of High-Capacity Lithium-Ion Battery Anodes
5. Ming-Yan Yan, Ge Li, Juan Zhang, Yi-Fan Tian, Ya-Xia Yin, Chuan-Jian Zhang, Ke-Cheng Jiang, Quan Xu, Hong-Liang Li, and Yu-Guo Guo (2020) Enabling SiO_x/C Anode with High Initial Coulombic Efficiency through a Chemical Pre-Lithiation Strategy for High-Energy-Density Lithium-Ion Batteries
6. Bao, J., Li, C., Zhang, F., Wang, P., Zhang, X., He, P., & Zhou, H. (2020). A Liquid Anode of Lithium Biphenyl for Highly Safe Lithium-Air Battery with Hybrid Electrolyte. *Batteries & Supercaps*, 3(8), 708-712.
7. Jarvis, C. R., Lain, M. J., Yakovleva, M. V., & Gao, Y. (2006). A prelithiated carbon anode for lithium-ion battery applications. *Journal of power sources*, 162(2), 800-802.
8. Hill, R. R., & Rychnovsky, S. D. (2016). Generation, stability, and utility of lithium 4, 4'-di-tert-butylbiphenylide (LiDBB). *The Journal of Organic Chemistry*, 81(22), 10707-10714.

【評語】 100018

針對鋰離子電池之開發研究該探討不同載劑對預鋰化過程以其應用於鋰離子電池使用。有以下幾點建議:

1. 現今此預鋰化研究主題多為開發新式載劑以期提升電池庫倫效率，此研究發現使用不同載劑中 biphenyl (聯苯) 為本研究中最優的載劑，此部分在文獻中已有許多報導，建議可加以閱讀相關文獻了解其化學學理機制，將可有利未來研究發想在開發其他載劑之使用。
2. 預鋰化過程所衍生之 solid electrolyte interface (SEI) 性質在研究內容需多探討生成機制，方更能了解與電池庫倫效率之相互關係。
3. 活性鋰(active Li)之實驗結果發現預鋰材料在氫氣環境中加水反應為最佳的活性鋰比例測量方式，此點建議可透過基礎化學說明。