

# 第一性原理对氮掺杂石墨烯作为锂空电池阴极 材料还原氧分子的机理研究\*

侯滨朋 淦作亮 雷雪玲<sup>†</sup> 钟淑英<sup>‡</sup> 徐波 欧阳楚英

(江西师范大学物理系, 计算材料物理实验室 南昌 330022)

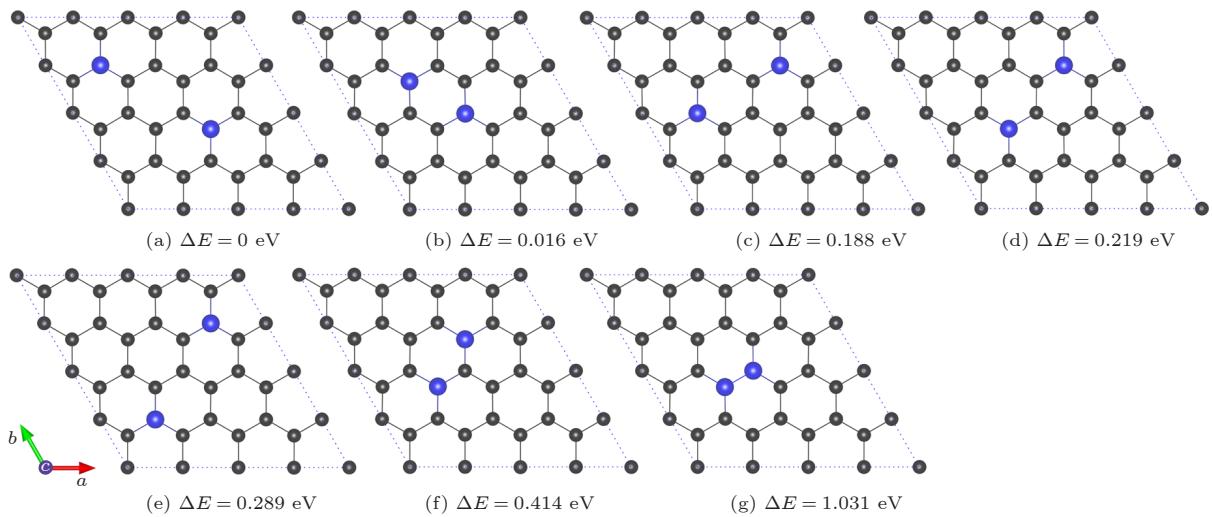


图 S1 二氮掺杂石墨烯 ( $N_2G$ ) 的异构体结构及相对能量  
Fig. S1. The isomer structures and the relative energy of  $N_2G$ .

\* 国家自然科学基金(批准号: 11764019, 11564016, 11664012)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: [xueling@mail.ustc.edu.cn](mailto:xueling@mail.ustc.edu.cn)

‡ 通信作者. E-mail: [syzhong@jxnu.edu.cn](mailto:syzhong@jxnu.edu.cn)

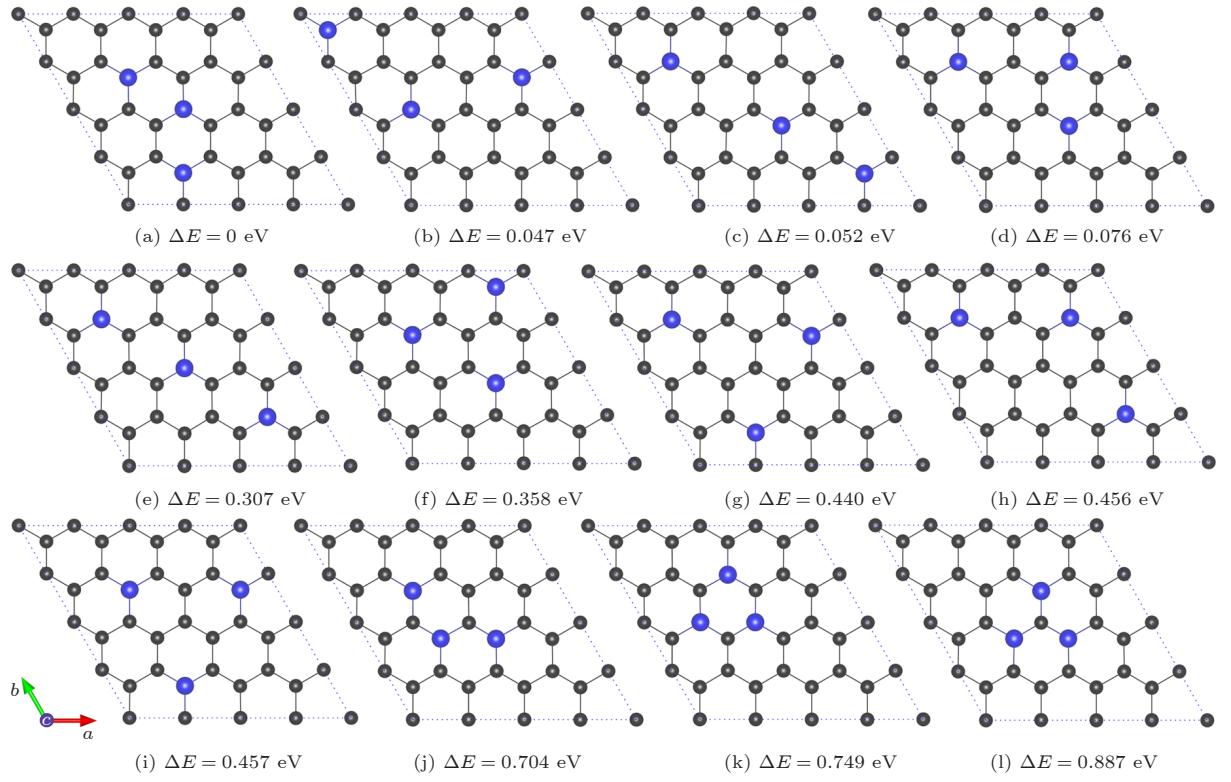


图 S2 三氮掺杂石墨烯 ( $N_3G$ ) 的异构体结构及相对能量  
Fig. S2. The isomer structures and the relative energy of  $N_3G$ .

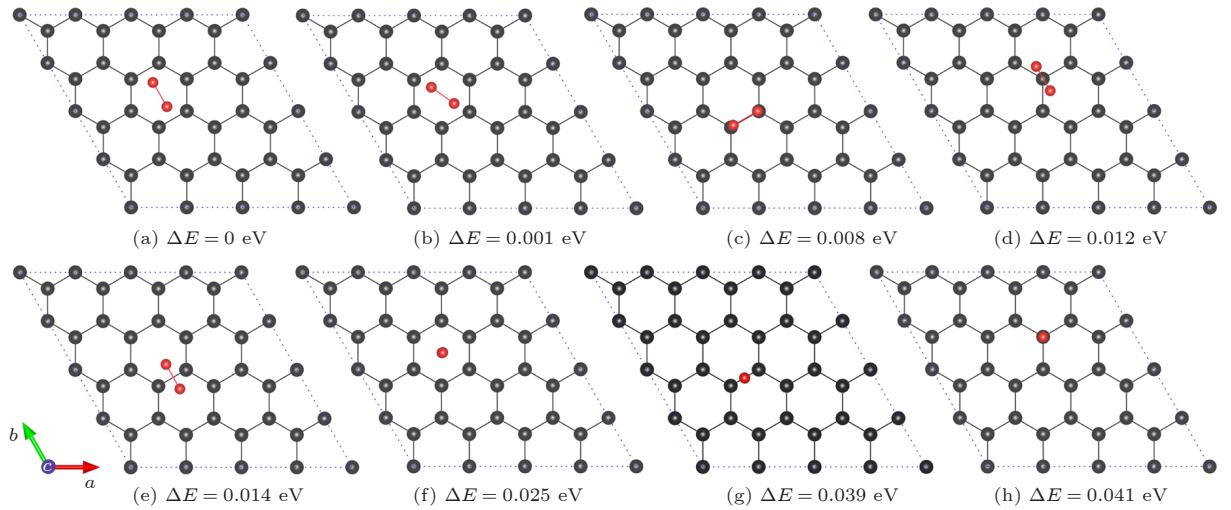


图 S3 本征石墨烯吸附氧分子 ( $G-O_2$ ) 的异构体结构及相对能量  
Fig. S3. The isomer structures and the relative energy of  $G-O_2$ .

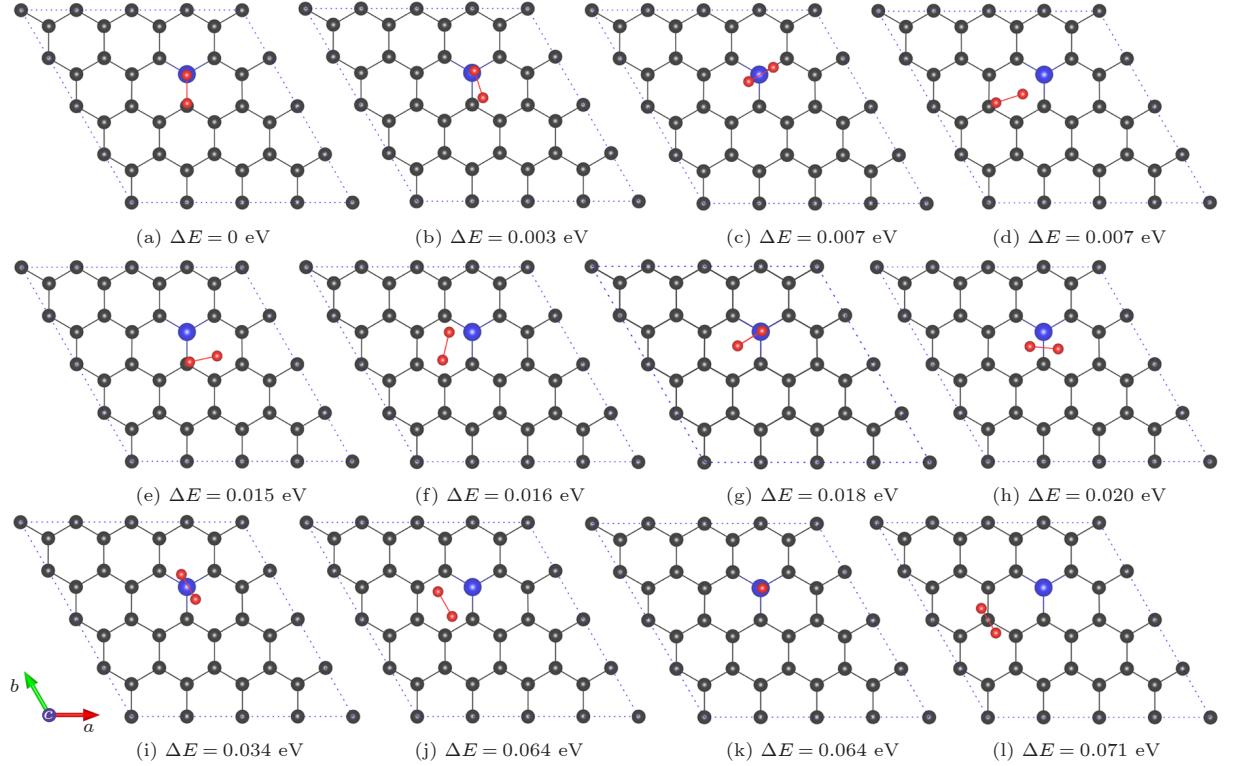


图 S4 一氮掺杂石墨烯吸附氧分子 ( $\text{N}_1\text{G}-\text{O}_2$ ) 的异构体结构及相对能量

Fig. S4. The isomer structures and the relative energy of  $\text{N}_1\text{G}-\text{O}_2$ .

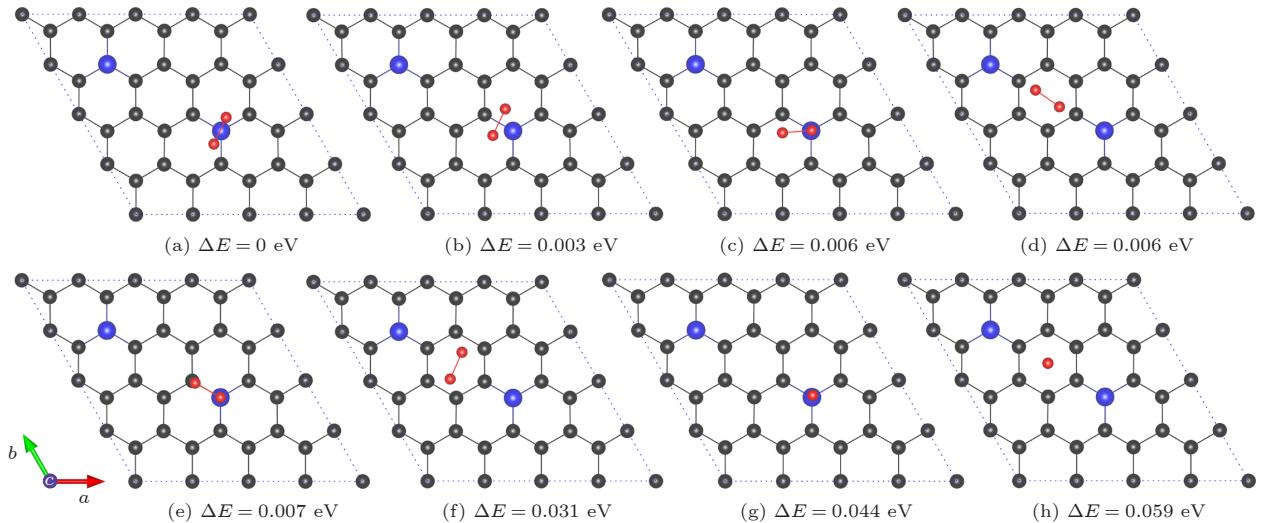


图 S5 二氮掺杂石墨烯吸附氧分子 ( $\text{N}_2\text{G}-\text{O}_2$ ) 的异构体结构及相对能量

Fig. S5. The isomer structures and the relative energy of  $\text{N}_2\text{G}-\text{O}_2$ .

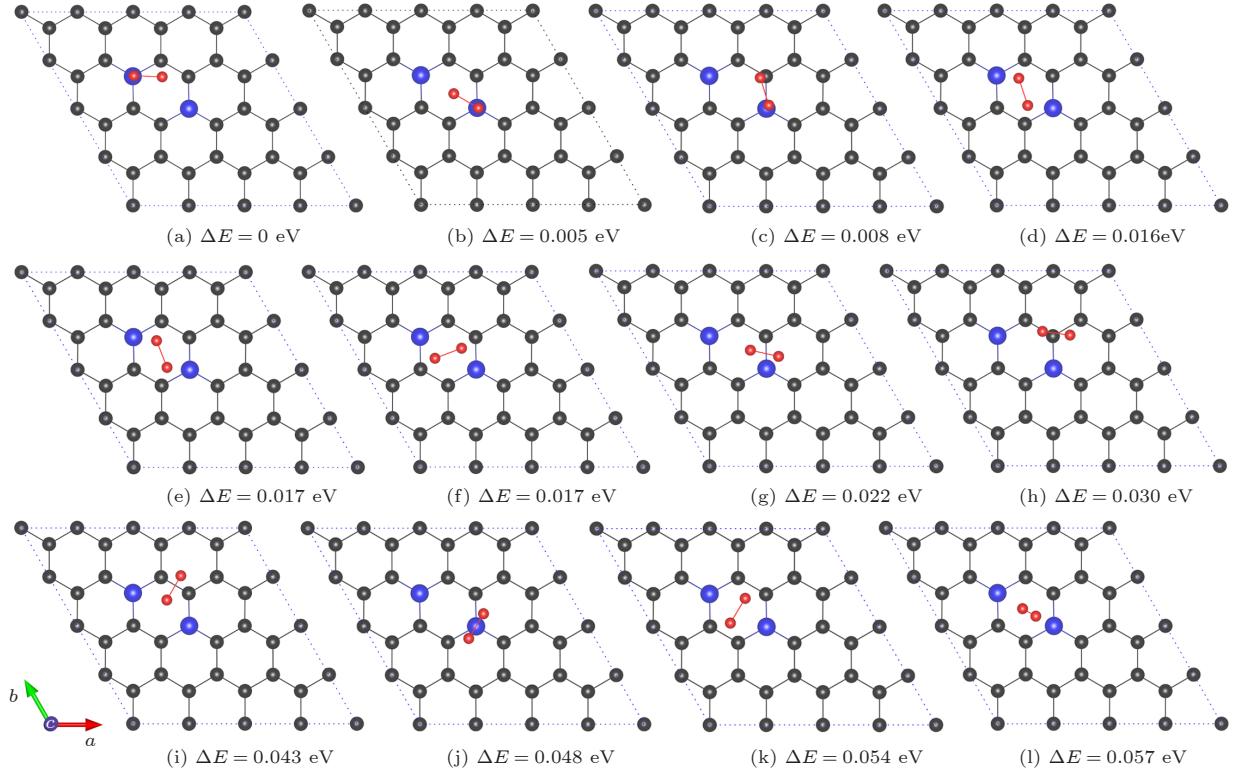


图 S6 二氮掺杂石墨烯(亚稳态)吸附氧分子( $N_2G-O_2-2$ )的异构体结构及相对能量

Fig. S6. The isomer structures and the relative energy of  $N_2G-O_2-2$  (metastable states).

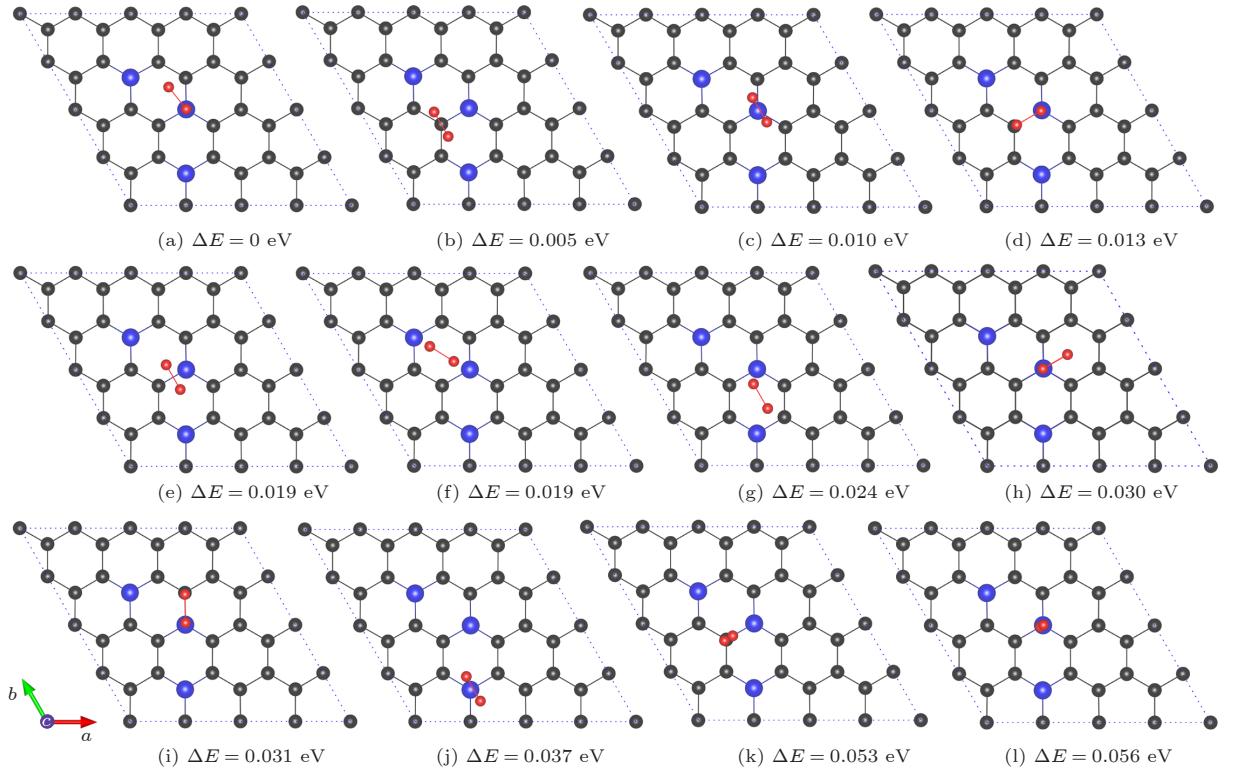


图 S7 三氮掺杂石墨烯吸附氧分子( $N_3G-O_2$ )的异构体结构及相对能量

Fig. S7. The isomer structures and the relative energy of  $N_3G-O_2$ .