

# 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)

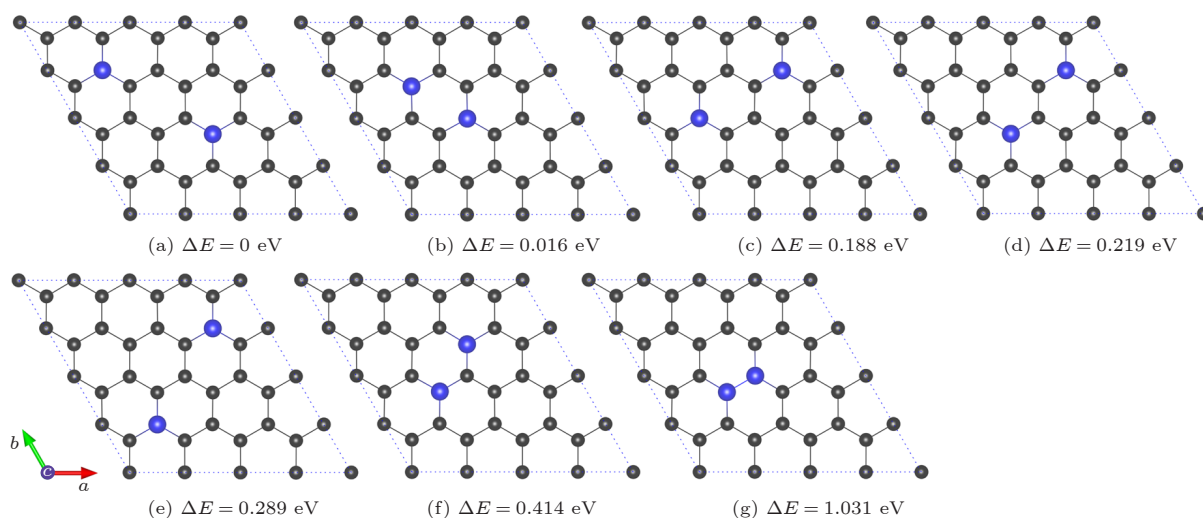


图 S1 二氮掺杂石墨烯 ( $N_2G$ ) 的异构体结构及相对能量

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.

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

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

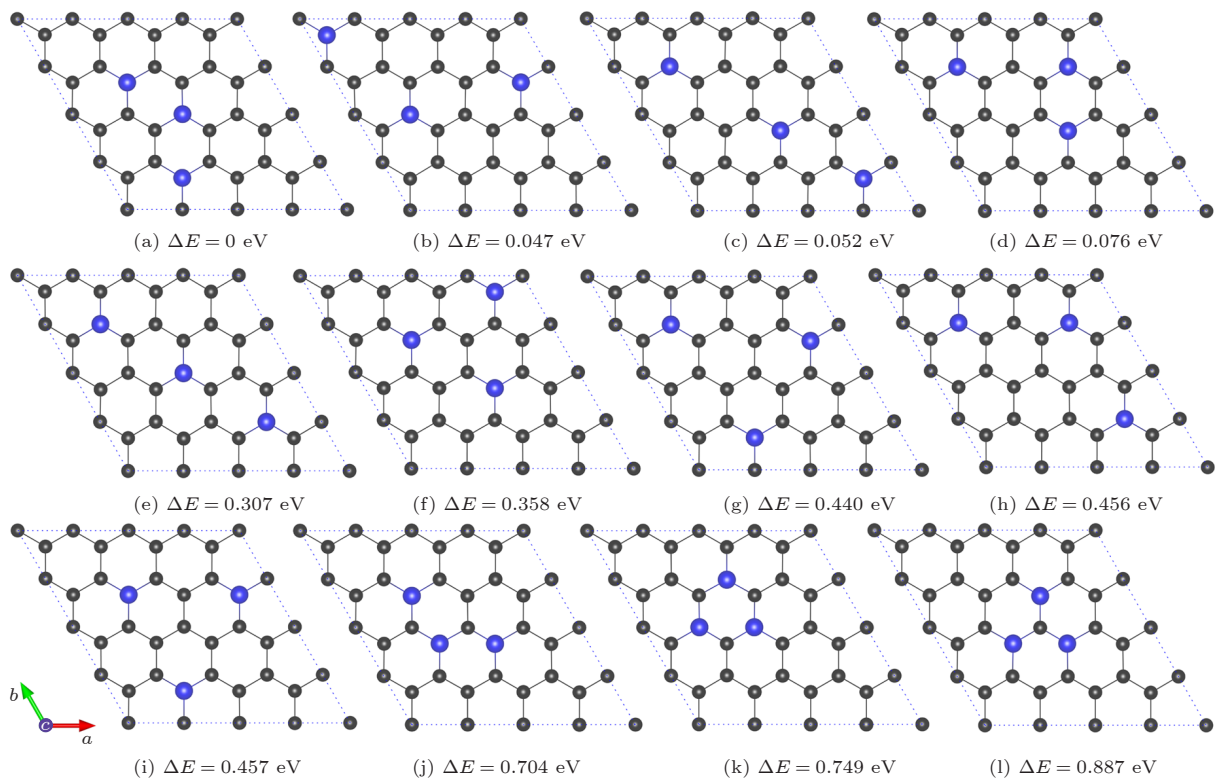


图 S2 三氮掺杂石墨烯 ( $N_3G$ ) 的异构体结构及相对能量  
 Fig. S2. The isomer structures and the relative energy of  $N_3G$ .

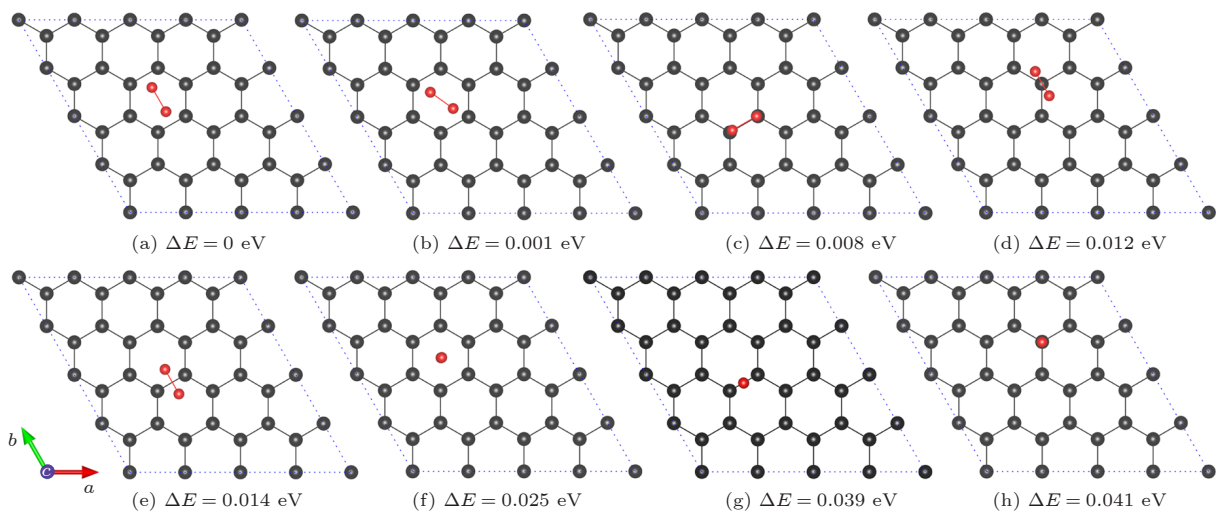


图 S3 本征石墨烯吸附氧分子 ( $G-O_2$ ) 的异构体结构及相对能量  
 Fig. S3. The isomer structures and the relative energy of  $G-O_2$ .

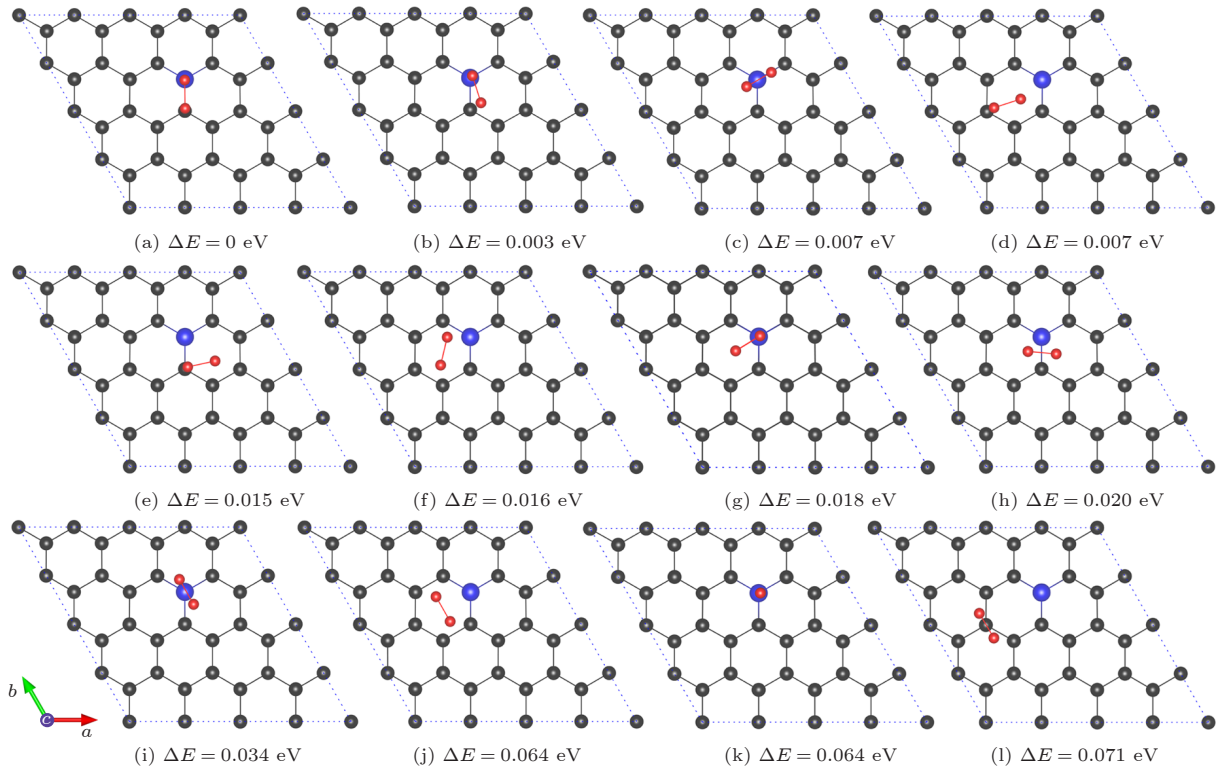


图 S4 一氮掺杂石墨烯吸附氧分子 ( $N_1G-O_2$ ) 的异构体结构及相对能量

Fig. S4. The isomer structures and the relative energy of  $N_1G-O_2$ .

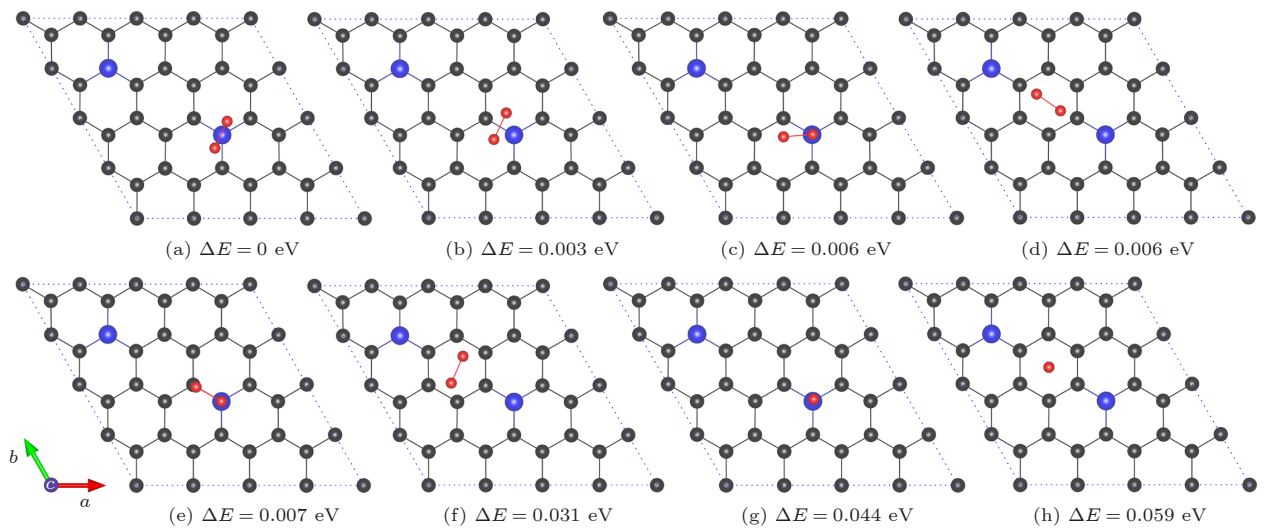


图 S5 二氮掺杂石墨烯吸附氧分子 ( $N_2G-O_2$ ) 的异构体结构及相对能量

Fig. S5. The isomer structures and the relative energy of  $N_2G-O_2$ .

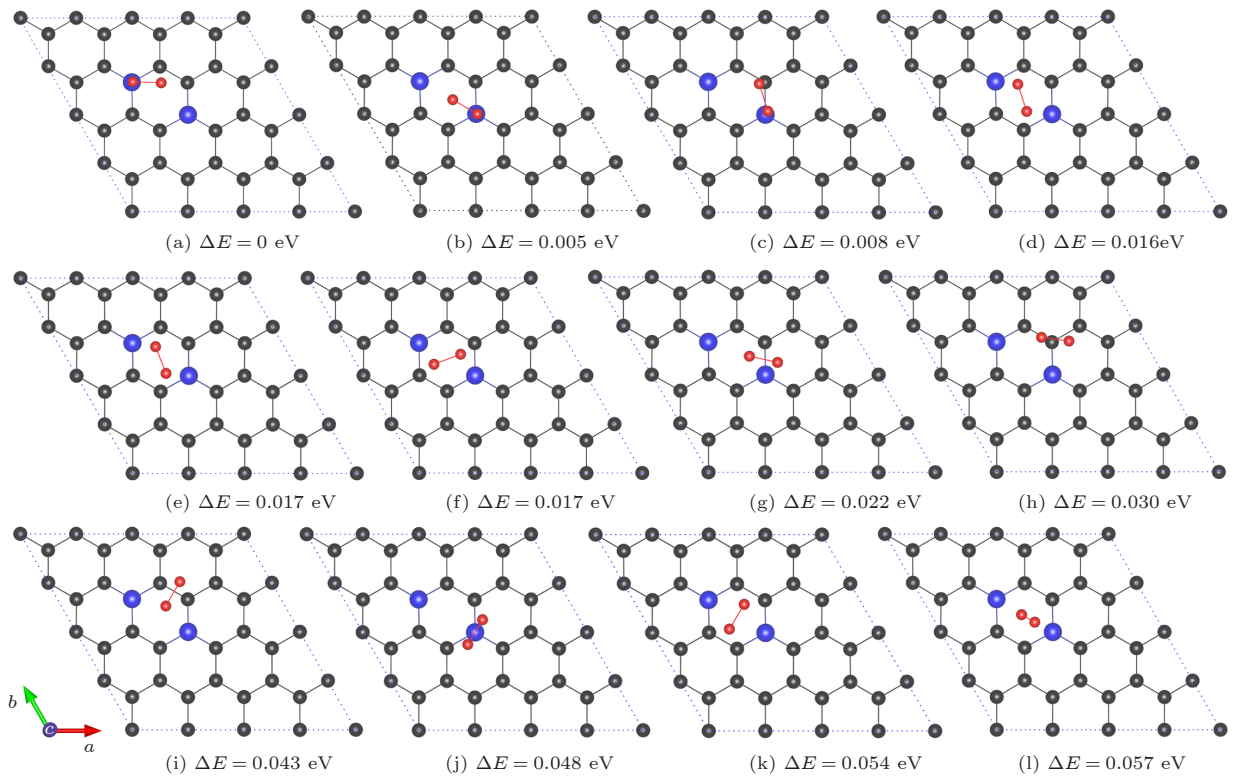


图 S6 二氮掺杂石墨烯(亚稳态) 吸附氧分子 ( $N_2G-O_2-2$ ) 的异构体结构及相对能量

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

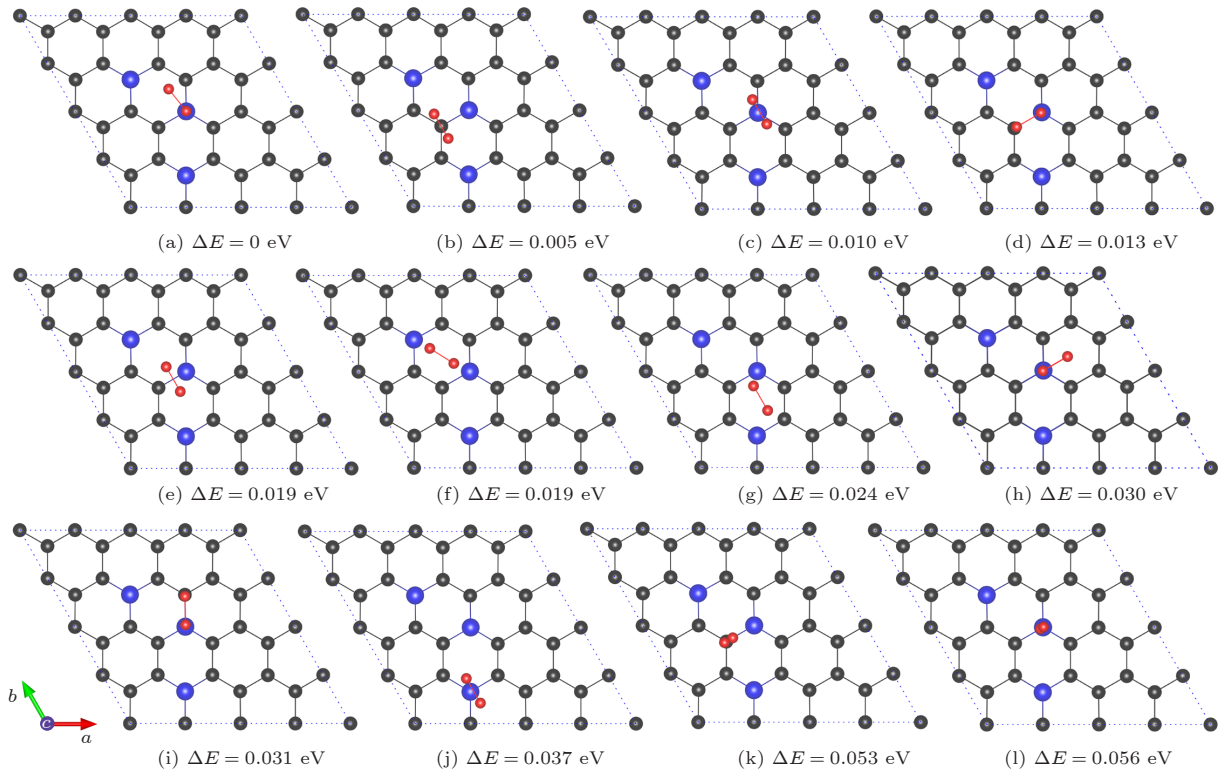


图 S7 三氮掺杂石墨烯吸附氧分子 ( $N_3G-O_2$ ) 的异构体结构及相对能量

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