

专题: 纳米电介质电-热特性

# 聚醚酰亚胺纳米复合电介质中指数分布陷阱电荷跳跃输运对储能性能的影响\*

宋小凡 闵道敏<sup>†</sup> 高梓巍 王泊心 郝予涛 高景晖<sup>‡</sup> 钟力生

(西安交通大学, 电力设备电气绝缘国家重点实验室, 西安 710049)

(2023年4月8日收到; 2023年7月26日收到修改稿)

目前常见聚合物电介质电容器的储能性能在高温下会急剧劣化, 难以满足航空航天和能源等领域的需求. 为提高介质高温储能性能, 常掺杂纳米填料对电介质改性, 通过改变电介质内部陷阱参数来调控电荷输运过程, 但其内部陷阱的能级和密度与储能性能间的定量关系仍需进一步研究. 本文构建线性聚合物纳米复合电介质中指数分布陷阱电荷跳跃输运的储能与释能模型并进行了仿真. 纯聚醚酰亚胺在 150 °C 的体积电阻率和电位移矢量-电场强度回线的仿真结果与实验符合, 证明了模型的有效性. 不同陷阱参数纳米复合电介质的仿真结果表明, 增大总陷阱密度和最深陷阱能级, 会降低载流子迁移率、电流密度和电导损耗, 提升放电能量密度和充放电效率. 在 150 °C 和 550 kV/mm 外施场强下, 1.0 eV 最深陷阱能级和  $1 \times 10^{27} \text{ m}^{-3}$  总陷阱密度的纳米复合电介质放电能量密度和充放电效率分别为 4.26 J/cm<sup>3</sup> 和 98.93%, 相比纯聚醚酰亚胺提升率分别为 91.09% 和 227.58%, 显著提升了高温储能性能. 本研究为耐高温高储能性能电容器的研发提供了理论和模型支撑.

**关键词:** 陷阱能级和密度, 储能密度, 充放电效率, 纳米复合电介质**PACS:** 73.50.Gr, 82.47.Uv, 88.05.Bc, 81.07.Pr**DOI:** 10.7498/aps.73.20230556

## 1 引言

随着科技的不断发展, 聚合物电介质电容器在能源、电子、运输和航空航天等领域的应用越来越广泛. 在众多应用中, 人们对电能储存和控制的要求也越来越高<sup>[1-3]</sup>, 然而聚合物电介质电容器的性能会随着温度的升高而急剧劣化<sup>[4,5]</sup>. 因此, 开发能够在高温下保持高储能性能的聚合物电介质电容器具有重要意义, 其中能量密度和充放电效率是评价电容器储能性能的重要参数. 电介质的能量密度  $U$  可以用  $U = \int E dD$  表示, 其中  $E$  是外施电场,

$D$  是电位移. 对于线性聚合物电介质,  $U$  可简化为  $U = 1/2 \epsilon_0 \epsilon_r E^2$ , 其中  $\epsilon_0$  为真空介电常数,  $\epsilon_r$  为电介质的相对介电常数. 电介质的充放电效率  $\eta = U_e / (U_e + U_{\text{loss}})$ , 其中  $U_{\text{loss}}$  是损耗能量密度,  $U_e$  是放电能量密度. 而  $U_e$  和  $U_{\text{loss}}$  可以通过计算电介质的电位移矢量-电场强度 ( $D$ - $E$ ) 回线的积分得出. 因此, 提升电容器的能量密度一方面可以通过提高电介质的介电常数或外施电场强度<sup>[6-8]</sup>; 另一方面可以通过降低放电过程中的能量损耗.

目前增强电容器的储能密度和充放电效率成为了领域内的研究热点, 许多学者已做出突出贡献. Chi 等<sup>[9]</sup> 以聚醚酰亚胺 (polyetherimide, PEI) 为基体, 制备了掺杂 BaTiO<sub>3</sub> 纳米纤维 BT NFs-

\* 国家自然科学基金 (批准号: 52077162)、国家自然科学基金委员会与中国工程物理研究院联合基金 (批准号: U1830131) 和电力设备电气绝缘国家重点实验室 (批准号: EIPE22301) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通信作者. E-mail: forrestmin@foxmail.com

<sup>‡</sup> 通信作者. E-mail: gaojinghui@xjtu.edu.cn

SiO<sub>2</sub> 核壳结构的 BT-2@SiO<sub>2</sub>/PEI 纳米复合电介质. 当 BT NFs 的直径为 500 nm 左右时, BT-2@SiO<sub>2</sub>/PEI 复合材料的击穿场强为 629 kV/mm, 放电能量密度为 15.4 J/cm<sup>3</sup>, 充放电效率为 86.1%, 展现出优异的储能性能. Yuan 等<sup>[10]</sup> 在聚合物中混合具有高电子亲和力的分子半导体制备出 PEI 复合电介质, 其中高电子亲和力的分子半导体会通过强静电吸引力俘获载流子. 这将在复合电介质中形成较大的陷阱能级 (约 1.5 eV), 可以有效提升复合电介质的储能性能. 在 150 °C,  $\eta$  大于 90% 时, 其  $U_e$  在 3.4—4.5 J/cm<sup>3</sup> 之间, 在 200 °C,  $\eta$  大于 90% 时, 复合电介质的  $U_e$  仍然高达 3.0 J/cm<sup>3</sup>. 并且这些分子半导体具有热稳定性, 通过调整分子半导体和聚合物之间的组合, 可以进一步提高复合电介质在高温下的储能性能. Ren 等<sup>[11]</sup> 通过溶液铸造法制备了不同纳米填料掺杂的 PEI 复合材料. 研究发现, 基于 PEI 纳米复合材料的储能特性取决于纳米填料的带隙和介电常数. 具有较高介电常数的纳米填料往往具有较窄的带隙, 而窄带隙会产生较大的电导损耗, 使得纳米复合电介质的  $\eta$  在高电场迅速下降. 但是具有较低介电常数的纳米填料会限制纳米复合材料获得较高  $U_e$  的能力. 因此, 具有中等介电常数和宽带隙的 ZrO<sub>2</sub> 纳米复合材料显示出较高的  $U_e$ , 掺杂有体积分数为 3% 的 ZrO<sub>2</sub>/PEI 纳米复合材料表现出 6.15 J/cm<sup>3</sup> 的最大放电能量密度, 比纯 PEI 高 57.7%. 由于 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 纳米粒子 (nanoparticles, NPs) 具有良好的导热性和热稳定性, Fan 等<sup>[12]</sup> 通过溶液铸造法制备了 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> NPs/PEI 纳米复合材料. 掺杂了质量分数为 3% Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> NPs 的 PEI 纳米复合材料表现出 6.68 J/cm<sup>3</sup> 的超高  $U_e$ , 并且在 150 °C 时, 仍有 84.77% 的高充放电效率. Chen 等<sup>[13]</sup> 将二维氮化硼纳米片 (*h*-BNNS) 化学气相沉积到 PEI 上. *h*-BNNS 具有较宽的带隙, 可以有效形成势垒, 抑制来自电极/电介质界面的电荷注入, 降低纳米复合膜的泄漏电流密度, 从而降低电导损耗. 而且还具有优异的导热性, 可以有效促进电容其内部的热耗散. 因此 *h*-BNNS/PEI 纳米复合材料表现出卓越的储能性能和热稳定性. 在 500 kV/mm 和 150 °C 下, 放电能量密度为 3.43 J/cm<sup>3</sup>, 而  $\eta$  为 90.1%.

本文以成熟的商用耐高温 PEI 纳米复合电介质为仿真对象, 以双极性电荷运输 (bipolar charge transport, BCT)<sup>[14]</sup> 为基础, 综合考虑电荷俘获-脱

陷-复合动力学过程<sup>[15]</sup>, 建立线性聚合物纳米复合电介质中指数分布陷阱电荷跳跃运输的储能与释能模型. 仿真分析总陷阱密度和最深陷阱能级对纳米复合电介质中电荷运输、放电能量密度和充放电效率的影响机理, 为耐高温高储能性能电容器的研发提供了理论和模型的支撑.

## 2 考虑指数分布陷阱电荷跳跃运输的储能与释能模型

图 1 给出了考虑指数分布陷阱电荷跳跃运输的纳米复合电介质的储能与释能模型示意图. 在外施电场的作用下, 肖特基效应会在电极处激发电荷, 所产生的电荷迅速移动并注入电极/电介质界面, 导致电介质内部空间电荷密度发生改变, 使得电介质内部的电流密度和电导损耗增大. 当电介质的工作温度过高时, 肖特基效应所激发的电荷会显著增加, 导致更多电荷注入到电极/电介质界面, 此时电介质内部的电导损耗会大幅增大, 电容器的储能性能明显下降. 而载流子在电介质内部的运输过程中会受到陷阱的束缚, 当陷阱能级较深时, 载流子不能很轻易脱陷, 此时电介质内部的载流子迁移率会下降. 并且当被俘获的载流子达到一定数量时, 会在电介质内部形成一个与外施电场方向相反的电场, 该反电场会有效抑制电极激发的电荷注入, 从而减小电介质的电导损耗. 因此可以通过增大电介质内部的总陷阱密度和最深陷阱能级来提升高温下电容器的储能性能<sup>[16,17]</sup>. 本文以 BCT 模型为基础, 在考虑指数分布陷阱电荷跳跃运输

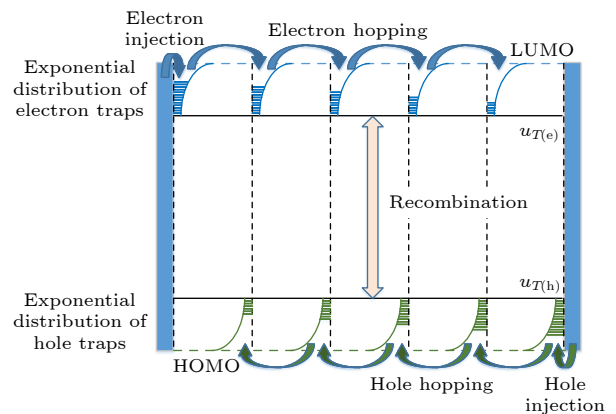


图 1 指数分布陷阱电荷跳跃运输过程的储能与释能模型示意图

Fig. 1. Schematic diagram of energy storage and release model.

过程下,对高温下 PEI 纳米复合电介质储能与释能过程进行仿真研究.

当外施电场作用时,电极/电介质界面电荷注入势垒会影响电荷注入量,当电荷注入势垒较高时,电荷注入量会减少.电荷注入后会在电介质内部会形成电子电流密度和空穴电流密度.所形成的两种电流密度均会受到样品厚度、温度和施压时间等的影响,因此,电极注入到电介质内部的电子和空穴电流密度  $j_{in(e)}$  和  $j_{in(h)}$  分别可以表示为<sup>[18]</sup>

$$j_{in(e)}(0, t) = AT^2 \exp\left(-\frac{u_{in(e)}}{k_B T}\right) \exp\left(\frac{u_{sch}(0, t)}{k_B T}\right), \quad (1)$$

$$j_{in(h)}(d, t) = AT^2 \exp\left(-\frac{u_{in(h)}}{k_B T}\right) \exp\left(\frac{u_{sch}(d, t)}{k_B T}\right), \quad (2)$$

其中,  $A$  为理查德森常数,  $T$  为温度,  $u_{in(e)}$  和  $u_{in(h)}$  分别为阴极和阳极与电介质界面的势垒,  $k_B$  为玻尔兹曼常数,  $u_{sch}$  为肖特基势垒降低,  $t$  为施加电压时间,  $d$  为试样厚度.肖特基势垒降低的表达式为  $u_{sch} = (eE/(4\pi\epsilon_0\epsilon_r))^{1/2}$ .

在电介质内部存在一部分未被陷阱束缚的可动载流子,这些载流子在电介质内部可以自由流动,并且一些由浅陷阱控制的载流子脱陷后也可以自由流动.在载流子浓度较高的地方,自由流动的载流子会自发向浓度低的地方扩散.并且,这些载流子也会在电场的作用下发生漂移.考虑以上两种情况,可将载流子因扩散和漂移形成的电流密度表示为<sup>[19]</sup>

$$j_{C(e)}(x, t) = en_{M(e)}\mu_{hop(e)}E(x, t) - eD_{(e)}\frac{\partial n_{M(e)}}{\partial x}, \quad (3)$$

$$j_{C(h)}(x, t) = en_{M(h)}\mu_{hop(h)}E(x, t) - eD_{(h)}\frac{\partial n_{M(h)}}{\partial x}, \quad (4)$$

其中,  $j_{C(e)}$  和  $j_{C(h)}$  分别为电子和空穴的传导电流密度,  $n_{M(e)}$  和  $n_{M(h)}$  分别为指数陷阱中可动电子和可动空穴密度,  $\mu_{0(e)}$  和  $\mu_{0(h)}$  分别为浅陷阱控制电子和空穴的迁移率,  $D_{(e)}$  和  $D_{(h)}$  分别为可动电子和可动空穴的扩散速率.通过爱因斯坦定律可以得到  $D_{(e,h)} = \mu_{0(e,h)}k_B T/e$ .

假设在载流子输运过程中,从最深的陷阱开始填充,深能级陷阱被填满后载流子开始填充更浅能级的陷阱.在载流子填充陷阱后,会得到一个未被载流子填充的最深陷阱能级,在最深陷阱能级以下没有未被填充的陷阱.任意陷阱能级的陷阱密度

与总陷阱密度和陷阱能级有关,因此指数分布陷阱的表达式如下<sup>[20]</sup>:

$$N_{T(e,h)}(u_{T(e,h)}) = N_{T0(e,h)} \exp\left(-\frac{u_{T(e,h)}}{k_B T_{C(e,h)}}\right),$$

$$u_{T(e,h)} \geq u_{Tmax(e,h)}, \quad (5)$$

其中,  $u_{T(e)}$  和  $u_{T(h)}$  分别为电子陷阱和空穴陷阱的能级,  $u_{Tmax(e)}$  和  $u_{Tmax(h)}$  分别为最深的电子陷阱和最深空穴陷阱的能级.  $N_{T0(e)}$  和  $N_{T0(h)}$  分别为总电子陷阱密度和总空穴陷阱密度,  $N_{T(e)}$  和  $N_{T(h)}$  分别为能级  $u_{T(e)}$  和  $u_{T(h)}$  处的电子陷阱密度和空穴陷阱密度,  $T_{C(e)}$  和  $T_{C(h)}$  分别为电子陷阱和空穴陷阱的指数分布形状参数.

载流子注入到电极/电介质界面,在电介质内部输运过程中被陷阱俘获,使得载流子迁移率下降.载流子入陷-脱陷的过程与电介质内部的陷阱参数有关.假设最深陷阱能级为跳跃势垒,可以得到跳跃势垒与指数分布陷阱中电子密度和空穴密度  $n_{T(e)}$  和  $n_{T(h)}$  的关系<sup>[20]</sup>:

$$u_{hop(e,h)} = \min\left(-k_B T_{C(e,h)} \ln\left(\frac{n_{T(e,h)}}{N_{T0(e,h)}}\right), \frac{\sin(\pi T/T_{C(e,h)})}{\pi T/T_{C(e,h)}}\right), u_{Tmax(e,h)}, \quad (6)$$

其中,  $u_{hop(e)}$  和  $u_{hop(h)}$  分别为电子和空穴的跳跃势垒.

载流子的平均跳跃间距也与电介质内部的陷阱密度有关,因此载流子的平均跳跃间距可以表示为<sup>[21]</sup>

$$\lambda_{hop(e,h)} = \left\{ N_{T(e,h)} \left[ 1 - \exp\left(-\frac{u_{Tmax(e,h)}}{k_B T_{C(e,h)}}\right) \right] \right\}^{-1/3}, \quad (7)$$

其中,  $\lambda_{hop(e)}$  和  $\lambda_{hop(h)}$  分别为电子和空穴的平均跳跃间距.

载流子迁移速率与载流子的跳跃势垒和跳跃间距有关,因此,根据跳跃电导理论可以得到载流子的迁移速率为<sup>[21]</sup>

$$\mu_{hop(e,h)} = 2v_0 \lambda_{hop(e,h)} \exp\left(-\frac{u_{hop(e,h)}}{k_B T}\right) \times \sinh\left(\frac{eE \lambda_{hop(e,h)}}{2k_B T}\right), \quad (8)$$

其中,  $\mu_{hop(e)}$  和  $\mu_{hop(h)}$  分别为电子和空穴的迁移速率.

总电子密度和总空穴密度中, 会有一部分随着电场作用而迁移, 这部分电子和空穴被称为可动电子和可动空穴. 指数分布陷阱中可动电子和可动空穴密度与陷阱中总电子和总空穴密度的关系如下:

$$n_{M(e,h)} = \frac{n_{T(e,h)}}{1 + T_{C(e,h)}/T}. \quad (9)$$

当足够量的电荷被陷阱俘获后, 这些电荷会获得足够多的能量来挣脱陷阱的束缚继续迁移. 在整个载流子输运过程中, 电子和空穴也会发生复合, 因此, 考虑电荷复合动力学过程的电荷守恒方程表示为<sup>[19]</sup>

$$\frac{\partial n_{T(e)}}{\partial t} + \frac{1}{e} \frac{\partial j_{C(e)}}{\partial x} = -R_{e,h} n_{T(e)} n_{T(h)}, \quad (10)$$

$$\frac{\partial n_{T(h)}}{\partial t} + \frac{1}{e} \frac{\partial j_{C(e)}}{\partial x} = -R_{e,h} n_{T(e)} n_{T(h)}, \quad (11)$$

其中,  $R_{e,h}$  是电子和空穴之间的复合系数. 复合系数表达式:  $R_{e,h} = e(\mu_{hop(e)} + \mu_{hop(h)}) / (\epsilon_0 \epsilon_r)$ .

当电极激发的电荷大量注入到电极/电介质界面时, 在电介质内部会积累大量的电荷, 形成稳定的反向电场, 这会导致电介质内部的电场发生畸变. 为得到电介质内部的电场情况, 采用有限元法对泊松方程进行求解, 泊松方程表示为<sup>[19]</sup>

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = -\frac{e(n_{T(h)} - n_{T(e)})}{\epsilon_0 \epsilon_r}. \quad (12)$$

求解电位的负梯度可以得到电场强度:  $E = -\nabla \varphi$ . 电介质中的总电流密度为

$$\begin{aligned} j_{total}(x, t) &= e(n_{M(e)}(x, t)\mu_{hop(e)} + n_{M(h)}(x, t)\mu_{hop(h)})E(x, t) \\ &+ \epsilon_0 \epsilon_r \cdot \partial E(x, t) / \partial t. \end{aligned} \quad (13)$$

三角波形电压其形状类似于等腰三角形, 从 0 逐渐上升到最大值, 然后再从最大值逐渐下降到 0, 在这个过程中, 电介质会经历充电-放电过程, 因此在电介质两端施加三角波形电压, 可以仿真得到  $D-E$  回线, 通过计算  $D-E$  回线可以得到储能密度、放电能量密度、能量损耗. 由放电能量密度与储能密度的比值可以计算得到充放电效率.

### 3 电阻率和 $D-E$ 回线仿真结果与实验结果对比

为验证指数分布陷阱电荷跳跃输运模型的可靠性, 并确定纯 PEI 的电荷输运参数, 将纯 PEI 的

体积电阻率和  $D-E$  回线的仿真结果与实验结果进行对比. 为保持与文献实验条件一致, 在试样两侧施加如图 2(a) 所示的恒定电压仿真体积电阻率, 施加如图 2(b) 所示的三角电压仿真  $D-E$  回线. 本文在仿真过程中将电子与空穴、阳极与阴极的参数设置为相同数值. 试样厚度设置为  $5 \mu\text{m}$ , 并通过网格法将试样厚度平均分为 200 份. 由于电荷守恒方程需遵循 CFL 定律, 即计算步长  $\Delta t$  与载流子迁移率的乘积需小于剖分厚度  $\Delta x$ , 否则易出现数值发散, 因此将  $\Delta t$  设置为  $1 \times 10^{-6} \text{ s}$ . 通过数值仿真可以得到纯 PEI 的在不同电场强度下的电阻率和  $D-E$  回线.

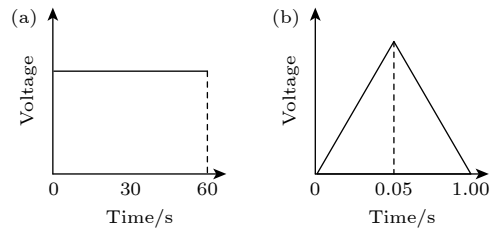


图 2 (a) 恒定电压波形; (b) 三角电压波形

Fig. 2. (a) Constant voltage waveform and (b) external triangular voltage waveform.

根据文献<sup>[10, 22]</sup>实验数据, 分别通过(6)式可以计算得纯 PEI 内部的最深陷阱能级为 0.62 eV, 通过(7)式可以计算得总陷阱密度为  $1.605 \times 10^{26} \text{ m}^{-3}$ . 实验测量和仿真计算结果见图 3. 图 3(a) 为  $150 \text{ }^\circ\text{C}$  下, 纯 PEI 体积电阻率随外施电场强度的变化, 图 3(b) 为纯 PEI 的  $D-E$  回线的仿真结果, 图 3(c) 为最大电位移 ( $D_{\text{max}}$ ) 和残余电位移 ( $D_r$ ) 对比结果. 图 3(a) 中, 随着电场的增大, PEI 的体积电阻率呈现逐渐下降的趋势, 同时, 计算结果与实验结果一致, 也证明了该指数分布陷阱电荷跳跃输运模型的可靠性. 图 3(b) 中, 随着电场不断增大,  $D-E$  回线所包围的面积不断增大, 这说明在高场条件下, PEI 的储能性能会大幅下降. 图 3(c) 选取了  $400 \text{ kV/mm}$  和  $500 \text{ kV/mm}$  时 PEI 的  $D_{\text{max}}$  和  $D_r$  的计算结果与实验结果进行对比. 对比结果为, 在  $400 \text{ kV/mm}$  时,  $D_{\text{max}}$  仿真值与实验值的误差小于 10.45%,  $D_r$  的仿真值与实验值的误差小于 2.13%. 在  $500 \text{ kV/mm}$  时,  $D_{\text{max}}$  仿真值与实验值的误差小于 12.42%,  $D_r$  的仿真值与实验值的误差小于 11.04%. 结果表明, 本模型提供了一种研究聚合物电介质高温储能性能的准确有效方法.

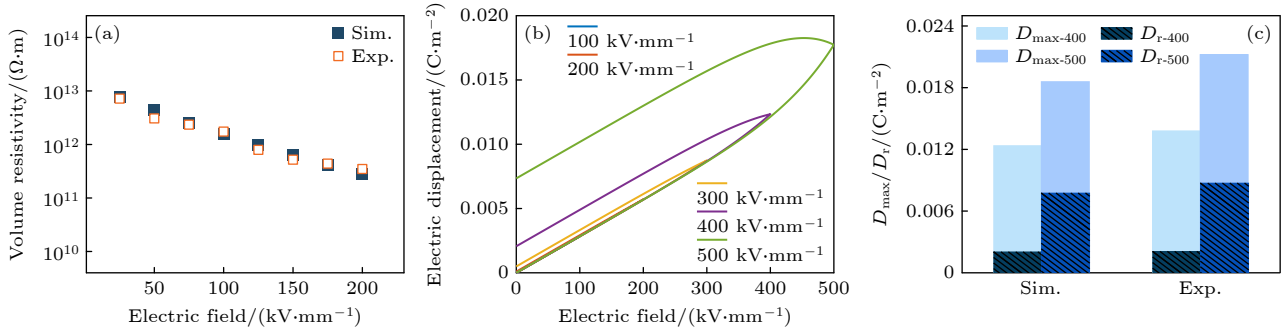


图3 (a) 纯PEI薄膜的实验测量<sup>[10,22]</sup>与仿真计算的体积电阻率; (b) 仿真计算出纯PEI薄膜在不同电场下的电位移矢量-电场强度回线; (c) 最大电位移和残余电位移仿真结果与实验结果<sup>[10,22]</sup>对比

Fig. 3. (a) Comparison of experimental volume resistivities<sup>[10,22]</sup> and simulation results of pure PEI film; (b) simulation results of the  $D$ - $E$  loops of pure PEI film under different electric fields; (c) comparison of simulation results of  $D_{max}$  and  $D_r$  and experiments<sup>[10,22]</sup>.

由电介质的能量密度公式可知, 提高电介质的介电常数或外施电场强度可以增大电介质的能量密度. 由于纳米填料一方面可以提供较大的比表面积, 在电介质内部形成较大范围的界面区域, 从而提升纳米复合材料的极化程度, 提高电介质的介电常数<sup>[23,24]</sup>, 另一方面可以抑制电荷注入和迁移, 提高电介质的击穿场强, 可施加更高的工作电场强度<sup>[25]</sup>. 因此, 在电介质中掺杂高介电常数的纳米填料可以明显改进电介质的储能性能. 现有研究表明, 在电介质材料中掺杂纳米填料会增大电介质内部的陷阱能级和陷阱密度<sup>[26,27]</sup>. 改变纳米填料的类型可以调控陷阱能级, 并且改变纳米填料的掺杂含量可以调节陷阱密度. 通过将载流子迁移速率(8)式与可动的电荷密度(9)式相乘可以得到电流密度. 然后通过分析电流密度随温度和电场强度的变化关系结合(6)式和(7)式, 可以得出PEI纳米复合电介质内部最深陷阱能级和总陷阱密度的大致范围. 随着温度的上升, 电介质的击穿场强会出现明显的下降. 因此, 在低温条件下, 可以施加更高的电场强度. 综合分析现有研究中的测试结果<sup>[10,22,24]</sup>, 总结参数变化范围如下: 总陷阱密度设置为  $3 \times 10^{26}$ — $1 \times 10^{27}$   $m^{-3}$ , 最深陷阱能级设置为 0.8—1.0 eV. 然后将温度设置为 100—150  $^{\circ}C$ , 外施电场强度设置为 100—600  $kV/mm$ , 施加如图2(b)所示的三角电压波形, 仿真研究电介质的储能特性. 通过调节总陷阱密度和最深陷阱能级两个参数, 对不同温度和不同电场强度下PEI纳米复合电介质的高温储能性能进行仿真研究. 综上所述, 如表1所示进行仿真参数设置, 开展高温下PEI纳米复合电介质电流密度、 $D$ - $E$ 回线、放电能量密度和充放电效率的仿真研究.

表1 指数分布陷阱电荷跳跃运输的PEI纳米复合电介质储能与释能模型参数设置

Table 1. Parameter setting of energy storage and release model for PEI nanocomposite dielectric with exponentially distributed trap jump transport.

参数	值
温度/ $^{\circ}C$	100—150
总陷阱密度/ $m^{-3}$	$3 \times 10^{26}$ — $1 \times 10^{27}$
最深陷阱能级/eV	0.8—1.0
指数分布形状参数/K	1200
外施电场强度/ $(kV \cdot mm^{-1})$	100—650 (100 $^{\circ}C$ )
	100—600 (125 $^{\circ}C$ )
	100—550 (150 $^{\circ}C$ )

## 4 陷阱能级和陷阱密度对储能性能的影响规律

### 4.1 纳米复合电介质陷阱参数对三角电压下 $D$ - $E$ 回线的影响

为进一步分析具有不同陷阱参数PEI纳米复合电介质的储能性能的变化规律, 需要分别研究最深陷阱能级和总陷阱密度对高温下PEI纳米复合电介质  $D$ - $E$  回线的影响机制. 图S1给出了在 100、125 和 150  $^{\circ}C$  下PEI纳米复合电介质在不同陷阱参数作用下  $D$ - $E$  回线的变化关系, 其中  $D$ - $E$  回线所包含的区域表示电介质充放电循环过程中的能量损耗. 由图S1(online)可知, 在高温高电场情况下, 电介质在充放电循环过程中会产生巨大的能量损耗, 导致电介质的储能性能显著劣化. 而随着电介质内部最深陷阱能级的不断增加, 在同等温度和外加电场的条件下,  $D$ - $E$  回线所包含的区域越来越小. 更高的最深陷阱能级会增加电介质内部的陷阱对于载流子的束缚能力, 阻碍载流子的正常输运过

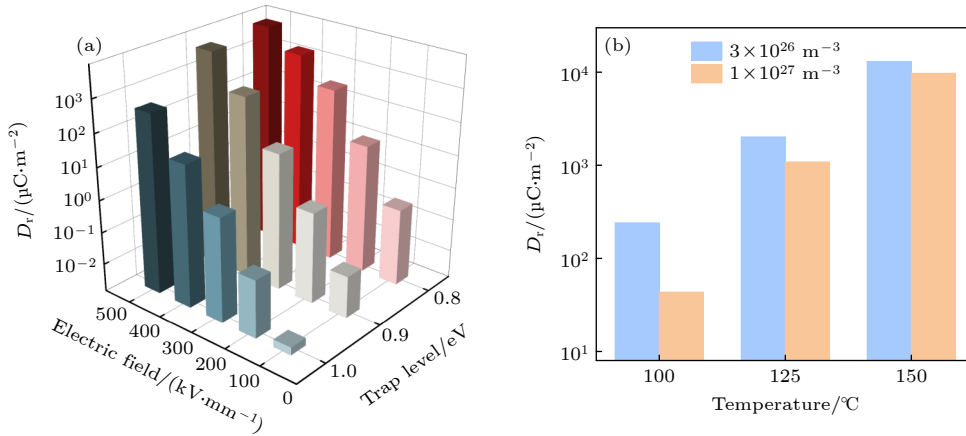


图 4 (a) 在 150 °C, 总陷阱密度为  $3 \times 10^{26} \text{ m}^{-3}$ 、具有不同最深陷阱能级 PEI 纳米复合电介质下的  $D_r$  随外施电场变化关系; (b) 在 550 kV/mm, 最深陷阱能级为 0.8 eV、具有不同总陷阱密度 PEI 纳米复合电介质的  $D_r$  随温度变化关系

Fig. 4. (a) Dependence between  $D_r$  and applied electric fields in PEI nanocomposite dielectrics with different deepest trap levels at the total trap density of  $3 \times 10^{26} \text{ m}^{-3}$  and 150 °C; (b) dependence between  $D_r$  and temperatures in PEI nanocomposite dielectrics with different total trap densities at the deepest trap level of 0.8 eV and 500 kV/mm.

程, 从而降低电介质的能量损耗. 由  $D$ - $E$  回线得出来的  $D_r$  结果如图 4 所示.  $D_r$  越小,  $D$ - $E$  回线所包含的区域也越小, 因此可以用  $D_r$  的变化趋势来研究电介质能量损耗的变化. 由图 4(a) 可得, 在温度、外施电场和总陷阱密度固定的条件下, 随着最深陷阱能级的增加,  $D_r$  逐渐减小, 也就是  $D$ - $E$  回线的面积逐渐缩小, 充放电过程中的电介质的能量损耗降低. 因此提升最深陷阱能级是降低高温下电介质能量损耗的重要措施. 从图 4(b) 可以发现, 同等温度和外施电场条件下, 固定最深陷阱能级, 随着总陷阱密度下降, 电介质的  $D_r$  增大, 能量损耗增加. 在 100 °C, 这种下降更明显. 因此总陷阱密度和最深陷阱能级的增加均会导致电介质的  $D_r$  减小, 能量损耗降低. 众所周知,  $D_r$  基本上是由高温高场下的电导损耗引起的. 因此寻找切实有效的方法来降低电流密度, 从而降低电导损耗对于提升电介质储能性能是十分必要的 [28].

## 4.2 纳米复合电介质陷阱参数对三角电压下暂态电流密度的影响

为探究不同陷阱参数对降低电导损耗的作用机制, 在 100, 125 和 150 °C 时, 图 5 给出了不同陷阱参数 PEI 纳米复合电介质在三角电压作用下电流密度随时间的变化关系. 如图 5(a1) 所示, 在 100 °C, 最深陷阱能级为 0.8 eV, 总陷阱密度为  $1 \times 10^{27} \text{ m}^{-3}$  时, 在 0.05 s 之前, 不同三角电压作用下的电介质内部电流密度随时间的增长基本保持

稳定. 而在 0.05 s 附近, 出现电流密度的明显上升. 这是因为在充电时间较短的时候, 有损耗的电介质可以等效为一个有效电阻和一个理想电容并联. 当电压较低时, 有效电阻阻值极大, 此时阻性电流  $j_\sigma = \sigma E$  可以忽略不计, 容性电流  $j_c = \epsilon_0 \epsilon_r dE/dt$  占据主导地位. 由于在 0.05 s 之前  $dE/dt$  为常数, 则容性电流也为常数, 因此这时的电流密度基本不变. 在充电后期, 较高的外施电场强度会使电极/电介质界面处的热电子发射增强, 导致大量电荷注入到电极/电介质界面, 使得电介质内部的载流子迁移率大幅增大, 所以电流密度会明显增大 [29].

固定最深陷阱能级不变, 将总陷阱密度从  $1 \times 10^{27}$  减小至  $3 \times 10^{26} \text{ m}^{-3}$ , 结果如图 5(b1) 所示. 在充电前期, 电流密度随时间增长仍然保持稳定, 但在 0.05 s 附近的电流密度明显增大. 对比图 5(a1) 和图 5(b1) 可以发现, 当外施电场为 650 kV/mm 时, 电流密度最大值从 0.431 增至 0.446 A/m<sup>2</sup>. 对比图 5(a3) 和图 5(b3) 可以发现, 在 150 °C 和 550 kV/mm 时, 电流密度最大值则从 1.179 增至 1.254 A/m<sup>2</sup>. 这说明当电介质内部的总陷阱密度降低时, 电介质内的载流子被陷阱俘获的概率会下降, 导致电介质内部的载流子密度上升, 载流子迁移率增加, 从而引起电流密度的升高. 而随着温度的上升, 这种电流密度的升高会变得更加剧烈. 这说明, 在高温下, 增加电介质内部的总陷阱密度对于抑制电流密度的升高效果显著. Ren 等 [30] 制备了 HfO<sub>2</sub>/PEI 的纳米复合电介质. 由于 HfO<sub>2</sub> 与 PEI

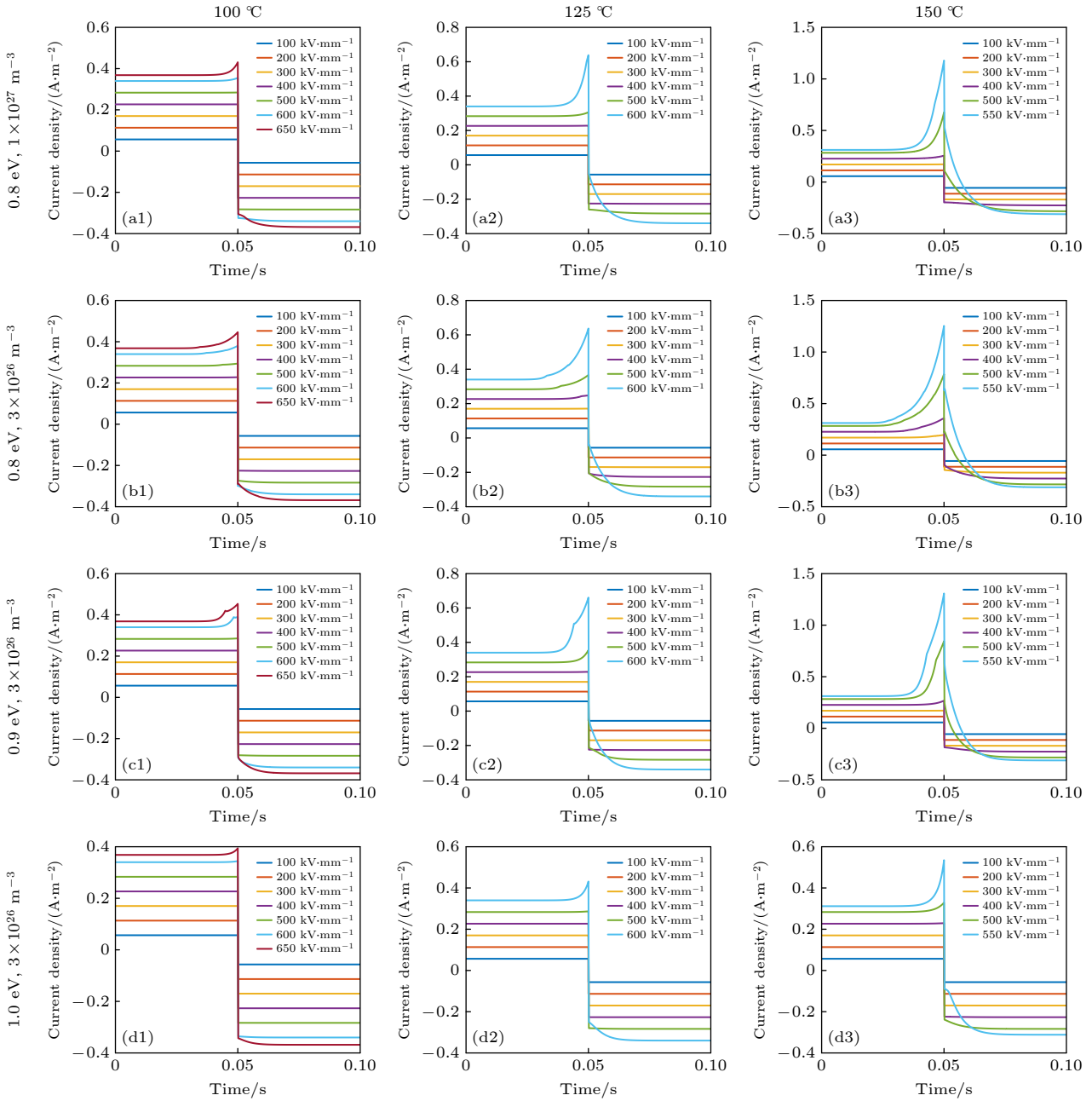


图 5 各温度下, 不同陷阱参数 PEI 纳米复合电介质的电流密度-时间特性

Fig. 5. Current density time characteristics of PEI nanocomposite dielectric with different trap parameters at various temperatures.

巨大的带隙差异, 使复合电介质内部产生了更多的深陷阱, 这些陷阱会阻碍电荷载流子的传输, 降低纳米复合材料的传导电流密度. 这与仿真结果是一致的.

接下来固定电介质内部的总陷阱密度为  $3 \times 10^{26} \text{ m}^{-3}$ , 分别将最深陷阱能级调整为 0.9 和 1.0 eV. 从图 5 可以看出, 在同一温度和外施电场强度下, 随着电介质内部的最深陷阱能级的增大, 电流密度最大值整体呈下降趋势. 以 150 °C 和 550 kV/mm 为例, 当深陷阱能级为 0.8、0.9 和 1.0 eV 时, 电流

密度最大值分别为 1.254、1.308 和 0.535 A/m<sup>2</sup>. 可以发现, 当最深陷阱能级从 0.8 eV 增至 0.9 eV 时, 电流密度最大值出现略微增大, 这是因为从电极注入到电极/电介质界面的电荷是以衰减波的形式往对面电极运动. 当电荷快要到达对面电极时, 会导致对面电极的电场增大, 此时会造成更多的电荷注入, 从而引起电流密度的升高. 以图 5 为例, 当最深陷阱能级为 0.8 eV, 外施电场强度为 600 kV/mm 时, 在 0.04 s 左右, 有两个小尖峰. 当最深陷阱能级增至 0.9 eV 时, 电荷波包的形状会大于最深陷

阱能级为 0.8 eV 时的电荷波包, 两者在对面电极附近导致的电场增强幅度也有很大差异, 从而对电荷注入造成的影响也有所不同. 指数能级陷阱的跳跃电导不仅与电场强度有关, 还与电荷密度相关. 当陷阱底部被电荷填充以后, 跳跃势垒会大幅上升, 导致电导率升高<sup>[31]</sup>. 当最深陷阱能级为 0.8 eV 时, 电荷注入速率与迁移速率相差不多, 因此在电介质内部积聚的电荷较少, 电荷对于跳跃电导率的影响较小. 当最深陷阱能级为 0.9 eV 时, 低场下电荷注入速率远大于电荷迁移速率, 因此电荷会在介质内部积累, 从而影响电导率, 导致跳跃电导率的大幅上升. 因此会出现在三角电压下, 当最深陷阱能级从 0.8 eV 增至 0.9 eV 时, 电流密度最大值的略微增大. 而当最深陷阱能级继续增至 1.0 eV 时, 由于较高的陷阱能级, 陷阱对于载流子的束缚能力大幅提升, 大量载流子被束缚在陷阱内, 导致载流子迁移率下降, 电流密度最大值减小.

在 150 °C, 外施电场强度为 200 kV/mm 和总陷阱密度为  $3 \times 10^{26} \text{ m}^{-3}$  下, 不同最深陷阱能级的空间电荷分布如图 6 所示. 在最深陷阱能级为 0.8 eV 时, 正负电荷在试样中分布很广, 说明陷阱并未束缚大量电荷, 此时电流密度最大值为  $0.114 \text{ A/m}^2$ . 较低的外施电场强度导致电极处电荷注入速率不高, 将最深陷阱能级提升至 0.9 eV, 可以发现大量电荷被束缚在电极附近. 陷阱对电荷的束缚大于电极对电荷的注入, 因此电流密度最大值减小至  $0.113 \text{ A/m}^2$ . Yan 等<sup>[32]</sup> 证明了超低体积分数 (0.25%—0.75%) 高绝缘氮化物纳米粒子 (BNNPs)

可以在 PEI 纳米复合电介质内部产生深层陷阱俘获移动的电荷并阻碍它们的传输, 从而降低电流密度, 抑制电导损耗. 该实验结果与本文仿真结果相符合, 证明了仿真模型的准确性.

### 4.3 纳米复合电介质陷阱参数对三角电压下放电能量密度和充放电效率的影响

通过对  $D-E$  回线进行计算, 可以得到不同条件下 PEI 纳米复合电介质的放电能量密度和充放电效率. 图 7 给出了在 150 °C, 最深陷阱能级为 1.0 eV, 不同总陷阱密度的 PEI 纳米复合电介质的放电能量密度和充放电效率随外施电场的变化关系. 由图 7 可知, 随着外施电场强度的增大, 电介质的放电能量密度不断增大, 但是充放电效率逐渐下降. 这是由于外施电场较大时, 肖特基发射更为剧烈, 金属电极所发射到电极/电介质处的电荷增多, 同时高场强也会导致电介质内部载流子迁移率明显提高. 这些都会导致电介质内部的电流密度明显上升, 因此产生的电导损耗显著增加, 最终导致充放电效率的下降. 而掺杂纳米填料会使电介质内部的总陷阱密度和最深陷阱能级的增加, PEI 纳米复合电介质内部陷阱对于干扰载流子正常运输过程的概率和能力均上升, 从而降低电流密度和电导损耗, 最终导致放电能量密度和充放电效率的大幅上升. 在其他温度和陷阱条件下, PEI 纳米复合电介质的放电能量密度和充放电效率结果均高于纯 PEI, 详见图 S2、S3 和 S4 (online).

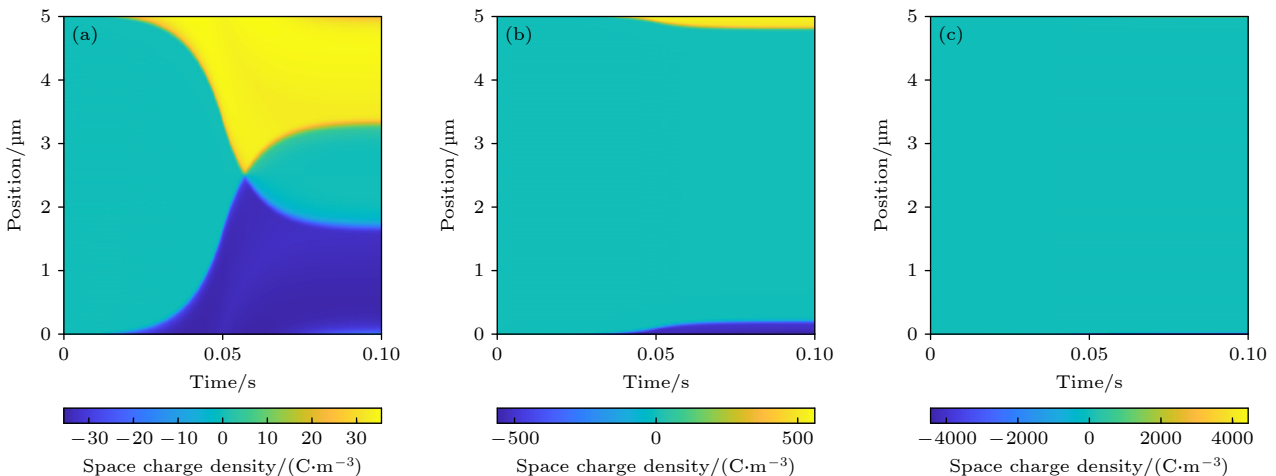


图 6 在 150 °C, 外施电场为 200 kV/mm 和总陷阱密度为  $3 \times 10^{26} \text{ m}^{-3}$  下, 最深陷阱能级分别为 0.8 eV (a), 0.9 eV (b) 和 1.0 eV (c) 的空间电荷分布

Fig. 6. Space charge distribution with the deepest trap energy levels of 0.8 eV (a), 0.9 eV (b), and 1.0 eV (c) at 150 °C, 200 kV/mm, and the total trap density of  $3 \times 10^{26} \text{ m}^{-3}$ , respectively.



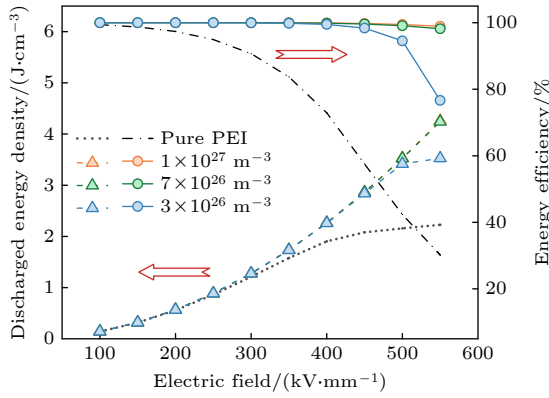


图 7 在 150 °C, 最深陷阱能级分别为 1.0 eV 的放电能量密度-电场强度和充放电效率-电场强度特性

Fig. 7. The discharged energy density and the energy efficiency characteristics at 150 °C and the deepest trap level of 1.0 eV.

为了进一步分析陷阱参数对于放电能量密度和充放电效率的影响, 选取了不同温度的最高外施电场强度绘制热图, 如图 8 和图 9 所示. 图 8 中, 100 °C 下的 PEI 纳米复合电介质显现出最高的放电能量密度. 根据肖特基热激发作用, 高温下更快速的电荷注入速率使得电介质内部电流密度显著增大, 因此出现储能性能的显著下滑, 150 °C 下的纯 PEI 放电能量密度降低至 2.23 J/cm<sup>3</sup>. 当最深陷阱能级为 0.8 eV 时, 陷阱对于载流子的束缚能力不强, 此时提高总陷阱密度对于放电能量密度的提升并不明显. 只有在总陷阱密度和最深陷阱能级均进一步提升后, 才可以得到更高的放电能量密度. 以 150 °C 为例, 最深陷阱能级为 0.8 eV, 总陷阱

密度为 1 × 10<sup>27</sup> m<sup>-3</sup> 的 PEI 纳米复合电介质放电能量密度为 2.36 J/cm<sup>3</sup>, 与纯 PEI 相比仅仅提高了 5.83%. 当深陷阱能级提高至 1.0 eV 时, 总陷阱密度为 1 × 10<sup>27</sup> m<sup>-3</sup> 的 PEI 纳米复合电介质放电能量密度比纯 PEI 提高了 91.03%. 掺杂纳米填料通常会同时提升复合电介质内部的陷阱能级和陷阱密度, 因此掺杂纳米填料是提升电介质放电能量密度的重要措施.

不同陷阱参数下 PEI 纳米复合电介质的充放电效率如图 9 所示. 图 9(a) 为 100 °C 下的充放电效率, 可以发现这时所有陷阱参数下的  $\eta$  均在 90% 以上, 相比纯 PEI 均有所提高. 当温度升高至 125 °C 时, 由于肖特基效应, 电介质的  $\eta$  下降. 但具有最深陷阱能级为 1.0 eV, 总陷阱密度为 1 × 10<sup>27</sup> m<sup>-3</sup> 的 PEI 纳米复合电介质的  $\eta$  仍高达 99.79%, 与同等条件下纯 PEI 相比, 提升率为 49.10%. 并且当最深陷阱能级保持在 1.0 eV 时, 所有陷阱密度下的复合电介质均保持 90% 以上的  $\eta$ . 温度进一步升高至 150 °C 时, 此时最深陷阱能级低于 0.9 eV 或者总陷阱密度低于 5 × 10<sup>26</sup> m<sup>-3</sup> 时, PEI 纳米复合电介质的  $\eta$  均无法达到 90% 以上. 只有进一步增大最深陷阱能级或总陷阱密度才能获得储能性能更加优异的电介质材料. 当总陷阱密度取最大值 1 × 10<sup>27</sup> m<sup>-3</sup>, 最深陷阱能级取最大值 1.0 eV 时的 PEI 纳米复合电介质的充放电效率能达到 98.93%, 与相同条件下的纯 PEI 相比, 提升率为 227.58%. 以上分析以及文献实验结果表明, 纳米

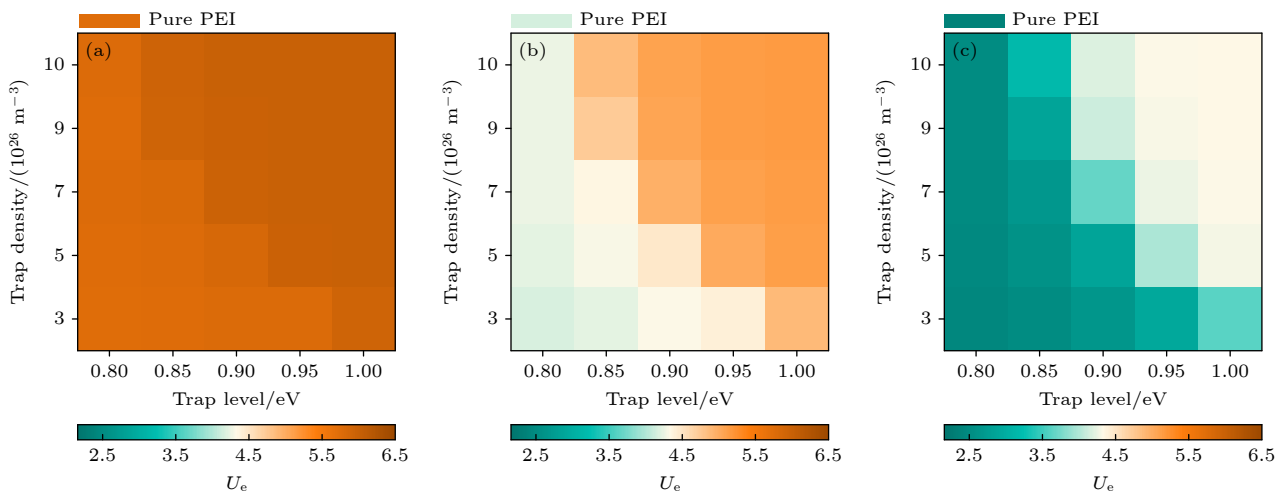


图 8 不同陷阱参数下 PEI 纳米复合电介质的放电能量密度 (a) 100 °C, 650 kV/mm; (b) 125 °C, 600 kV/mm; (c) 150 °C, 550 kV/mm

Fig. 8. The discharge energy density of PEI nanocomposite dielectric under different trap parameters: (a) 100 °C, 650 kV/mm; (b) 125 °C, 600 kV/mm; (c) 150 °C, 550 kV/mm.

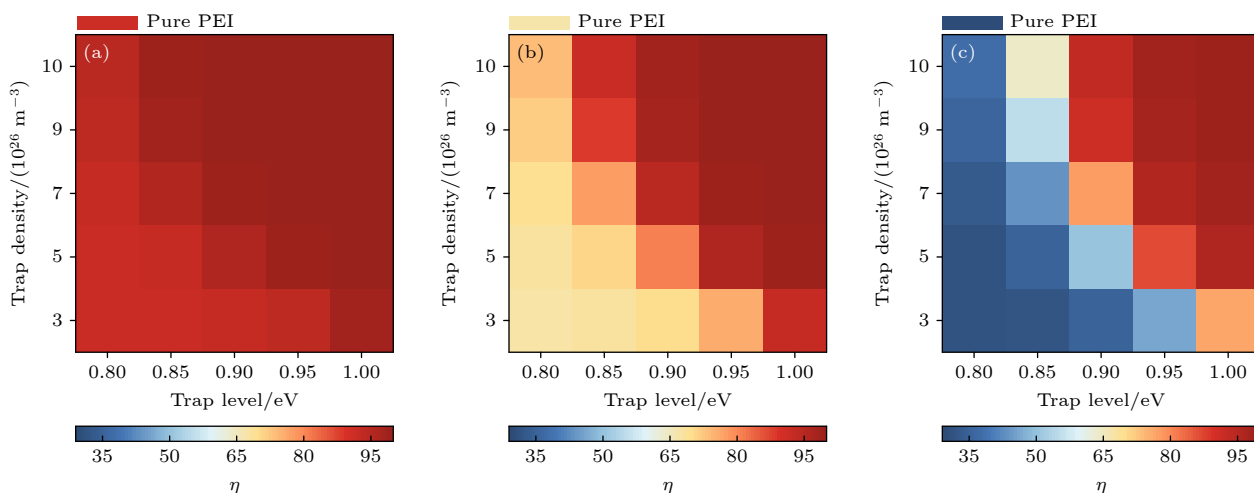


图9 不同陷阱参数下PEI纳米复合电介质的充放电效率 (a) 100 °C, 650 kV/mm; (b) 125 °C, 600 kV/mm; (c) 150 °C, 550 kV/mm

Fig. 9. The energy efficiency of PEI nanocomposite dielectric under different trap parameters: (a) 100 °C, 650 kV/mm; (b) 125 °C, 600 kV/mm; (c) 150 °C, 550 kV/mm.

复合电介质中产生的更深陷阱能级和更高总陷阱密度均可以改善电介质材料在高温高场下的储能性能,使其在实际应用中可以适应更恶劣的工况。

## 5 结论

本文建立了纳米复合电介质中指数陷阱电荷跳跃运输的储能与释能模型,以PEI纳米复合电介质为研究对象,分析了不同温度下,陷阱参数对PEI纳米复合电介质高温储能性能的影响.仿真结果表明,在同一温度下,随着最深陷阱能级和总陷阱密度的增加,电介质内部载流子迁移率减小,电流密度逐渐减小,因此产生的电导损耗也会降低, $D-E$ 回线面积逐渐减小.在高温高场条件下,随着最深陷阱能级和总陷阱密度的升高,放电能量密度和充放电效率均得到明显提升.且温度越高,对于储能性能的提升越明显.当温度为150 °C,外施场强为550 kV/mm时,最深陷阱能级取1.0 eV和总陷阱密度取 $1 \times 10^{27} \text{ m}^{-3}$ 的PEI纳米复合电介质放电能量密度和充放电效率分别为 $4.26 \text{ J/cm}^3$ 和98.93%,相比纯PEI提升率分别为91.09%和227.58%.建立了聚醚酰亚胺纳米复合电介质指数分布陷阱电荷跳跃运输与电阻率和储能性能之间的定量关系,为研发高性能高温储能纳米复合电介质电容器提供了理论和模型的支撑。

## 参考文献

[1] Miao W J, Chen H X, Pan Z B, Pei X L, Li L, Li P, Liu J J,

- Zhai J W, Pan H 2021 *Compos. Sci. Technol.* **201** 108501
- [2] Zhou Y, Yuan C, Wang S J, Zhu Y J, Cheng S, Yang X, Yang Y, Hu J, He J L, Li Q 2020 *Energy Stor. Mater.* **28** 255
- [3] Ren W B, Pan J Y, Dan Z K, Zhang T, Jiang J Y, Fan M Z, Hu P H, Li M, Lin Y H, Nan C W, Shen Y 2021 *Chem. Eng. J.* **420** 127614
- [4] Li H, Ai D, Ren L L, Yao B, Han Z B, Shen Z H, Wang J J, Chen L Q, Wang Q 2019 *Adv. Mater.* **31** 1900875
- [5] LI Q, LI M Q 2021 *High Volt. Eng.* **47** 3105 (in Chinese) [李琦, 李曼茜 2021 *高电压技术* **47** 3105]
- [6] Li Z Z, Treich G M, Tefferi M, Wu C, Nasreen S, Scheirey S K, Ramprasad R, Sotzing G A, Cao Y 2019 *J. Mater. Chem. A* **7** 15026
- [7] Li H, Liu F H, Fan B Y, Ai D, Peng Z R, Wang Q 2018 *Small Methods* **2** 1700399
- [8] Zhai J W, Huang W J, Yang X, Wan B Q, Zheng M S 2023 *High volt. Eng.* **49** 1055 (in Chinese) [查俊伟, 黄文杰, 杨兴, 万宝全, 郑明胜 2023 *高电压技术* **49** 1055]
- [9] Chi Q G, Zhou Y H, Feng Y, Cui Y, Zhang Y, Zhang T D, Chen Q G 2020 *Mater. Today Energy* **18** 100516
- [10] Yuan C, Zhou Y, Zhu Y J, Liang J J, Wang S J, Peng S M, Li Y S, Cheng S, Yang M C, Hu J, Zhang B, Zeng R, He J L, Li Q 2020 *Nat. Commun.* **11** 3919
- [11] Ren L L, Qiao J Q, Wang C, Zheng W Y, Li H, Zhao X T, Yang L J, Liao R J 2022 *Mater. Today Energy* **30** 101161
- [12] Fan Z H, Zhang Y Y, Jiang Y, Luo Z M, He Y B, Zhang Q F 2022 *J. Mater. Res. Technol.* **18** 4367
- [13] Chen H X, Pan Z B, Wang W L, Chen Y Y, Xing S, Cheng Y, Ding X P, Liu J J, Zhai J W, Yu J H 2021 *Compos. Part A Appl. Sci. Manuf.* **142** 106266
- [14] Min D M, Ji M Z, Li P X, Gao Z W, Liu W F, Li S T, Liu J 2021 *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.* **28** 2011
- [15] Kuik M, Koster L J, Wetzelaer G A, Blom P W 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 256805
- [16] Sun B Z, Hu P H, Ji X M, Fan M Z, Zhou L, Guo M F, He S, Shen Y 2022 *Small* **18** e2202421
- [17] Ding X P, Pan Z B, Cheng Y, Chen H X, Li Z C, Fan X, Liu J J, Yu J H, Zhai J W 2023 *Chem. Eng. J.* **453** 139917
- [18] Hoang A T, Serdyuk Y V, Gubanski S M 2016 *Polymers* **8** 103

- [19] Kao K C 2004 *Dielectric Phenomena in Solids* (San Diego: Elsevier Academic Press)
- [20] Jakobs A, Kehr K W 1993 *Phys. Rev. B* **48** 8780
- [21] Jin W F 1997 *Dielectric Physics* (Beijing: China Machine Press) (in Chinese) [金维芳 1997 电介质物理学 (北京: 机械工业出版社)]
- [22] Li Q, Chen L, Gadinski M R, Zhang S H, Zhang G Z, Li H U, Iagodkine E, Haque A, Chen L Q, Jackson N T, Wang Q 2015 *Nature* **523** 576
- [23] Lewis T J 1994 *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.* **1** 812
- [24] Yang M Z, Ren W B, Guo M F, Shen Y 2022 *Small* **18** e2205247
- [25] Li H, Ren L L, Ai D, Han Z B, Liu Y, Yao B, Wang Q 2019 *InfoMat* **2** 389
- [26] Akram S, Yang Y, Zhong X, Bhutta S, Wu G N, Castellon J, Zhou K 2018 *IEEE Trans. Dielectr. Electr. Insul.* **25** 1461
- [27] Ma C, Min D M, Li S T, Zheng X, Li X Y, Min C, Zhan H X 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 067701 (in Chinese) [马超, 闵道敏, 李盛涛, 郑旭, 李西育, 闵超, 湛海涯 2017 物理学报 **66** 067701]
- [28] Zha J W, Zha L J, Zheng M S 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 018401 (in Chinese) [查俊伟, 查磊军, 郑明胜 2023 物理学报 **72** 018401]
- [29] Ding X P, Pan Z B, Zhang Y, Shi S H, Cheng Y, Chen H X, Li Z C, Fan X, Liu J J, Yu J H, Zhai J W 2022 *Adv. Mater. Interfaces* **9** 2201100
- [30] Ren L L, Yang L J, Zhang S Y, Li H, Zhou Y, Ai D, Xie Z L, Zhao X T, Peng Z R, Liao R J, Wang Q 2021 *Compos. Sci. Technol.* **201** 108528
- [31] Boufayed F, Teyssède G, Laurent C, Le Roy S, Dissado L A, Ségur P, Montanari G C 2006 *J. Appl. Phys.* **100** 104105
- [32] Yan J J, Wang J, Zeng J Y, Shen Z H, Li B W, Zhang X, Zhang S J 2022 *J. Mater. Chem. C* **10** 13157

SPECIAL TOPIC—Electrical/thermal properties of nanodielectrics

# Effect exponentially distributed trapped charge jump transport on energy storage performance in polyetherimide nanocomposite dielectric\*

Song Xiao-Fan    Min Dao-Min<sup>†</sup>    Gao Zi-Wei    Wang Po-XinHao Yu-Tao    Gao Jing-Hui<sup>‡</sup>    Zhong Li-Sheng*(State Key Laboratory of Electrical Insulation and Power Equipment, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)*

( Received 8 April 2023; revised manuscript received 26 July 2023 )

## Abstract

With the development of science and technology, polymer dielectric capacitors are widely used in energy, electronics, transportation, aerospace, and many other areas. For polymer dielectric energy storage capacitors to remain effective in practical applications, excellent charge and discharge performance is essential. However, the performance of the common polymer dielectric capacitors will deteriorate rapidly at high temperature, which makes them fail to work efficiently under worse working conditions. Dielectric trap energy levels and trap densities increase when nanoparticles are incorporated into the dielectric. The change in trap parameters will affect carrier transport. Therefore, the high temperature energy storage performance of polymer nanocomposite dielectric can be improved by changing the trap parameters to regulate the carrier transport process. However, the quantitative relationship between trap energy level and trap density and the energy storage properties of nanocomposite dielectric need further studying. In this paper, the energy storage and release model for exponentially distributed trapped charge jump transport in linear polymer nanocomposite dielectrics is constructed and simulated. The volume resistivity and electric displacement-electric field loops of pure polyetherimide are simulated at 150 °C, and the simulation results match the experimental results, which demonstrates the validity of the model. Following that, under different temperatures and electric fields, the current density, electric displacement-electric field loops, discharge energy density and charge-discharge efficiency of polyetherimide nanocomposite dielectric are simulated by using different trap parameters. The results show that increasing the maximum trap energy level and the total trap density can effectively reduce the carrier mobility, current density and conductivity loss, and enhance the discharge energy density and the charge-discharge efficiency of the nanocomposite dielectric. On condition that temperature is 150 °C and applied electric field is 550 kV/mm, the polyetherimide nanocomposite dielectric with a maximum trap energy level of 1.0 eV and a total trap density of  $1 \times 10^{27} \text{ m}^{-3}$ , has 4.26 J·cm<sup>-3</sup> of discharge energy density and 98.93% of energy efficiency. Compared with pure polyetherimide, the rate of improvement is 91.09% and 227.58%, respectively. The energy storage performance under high temperature and high electric field is obviously improved. It provides theoretical and model support for the research and development of capacitors with high temperature resistance and energy storage performance.

**Keywords:** trap energy level and density, energy storage density, charge and discharge efficiency, nanocomposites dielectric

**PACS:** 73.50.Gr, 82.47.Uv, 88.05.Bc, 81.07.Pr**DOI:** [10.7498/aps.73.20230556](https://doi.org/10.7498/aps.73.20230556)

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 52077162), the Joint Fund of the National Natural Science Foundation of China and the China Academy of Engineering Physics (Grant No. U1830131), and the State Key Laboratory of Electrical Insulation and Power Equipment, China (Grant No. EIPE22301).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [forrestmin@foxmail.com](mailto:forrestmin@foxmail.com)

<sup>‡</sup> Corresponding author. E-mail: [gaojinghui@xjtu.edu.cn](mailto:gaojinghui@xjtu.edu.cn)

聚酰亚胺纳米复合电介质中指数分布陷阱电荷跳跃输运对储能性能的影响

宋小凡 闵道敏 高梓巍 王泊心 郝予涛 高景晖 钟力生

**Effect exponentially distributed trapped charge jump transport on energy storage performance in polyetherimide nanocomposite dielectric**

Song Xiao-Fan Min Dao-Min Gao Zi-Wei Wang Po-Xin Hao Yu-Tao Gao Jing-Hui Zhong Li-Sheng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 027301 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20230556

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20230556>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

高储能密度铁电聚合物纳米复合材料研究进展

Research progress of ferroelectric polymer nanocomposites with high energy storage density

物理学报. 2020, 69(21): 217706 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20201209>

钛酸钡基/聚偏氟乙烯复合介质材料的界面改性及储能性能

Interface modification and energy storage properties of barium titanate-based/ polyvinylidene fluoride composite

物理学报. 2020, 69(21): 217702 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20201031>

钛酸锶纳米纤维表面羟基化处理对聚偏氟乙烯复合材料介电性能和储能性能的影响

Effects of surface hydroxylated strontium titanate nanofibers on dielectric and energy storage properties of polyvinylidene fluoride composites

物理学报. 2020, 69(21): 218101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200592>

面向高温介电储能应用的聚合物基电介质材料研究进展

Research progress of polymer based dielectrics for high-temperature capacitor energy storage

物理学报. 2020, 69(21): 217701 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20201006>

超电容储能电极材料的密度泛函理论研究

Density functional theory study of supercapacitor for energy storage electrode materials

物理学报. 2021, 70(10): 107301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201988>

不同充放电模式影响还原氧化石墨烯电极储锂性能的实验分析

Experimental analysis of influence of different charge-discharge modes on lithium storage performance of reduced graphene oxide electrodes

物理学报. 2022, 71(6): 066501 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211405>