
新研究提示钠离子电池正极优选材料

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/13658.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

新研究提示钠离子电池正极优选材料。钠离子电池具有资源丰富、成本低、安全性高等优点，在中低速电动车、电动自行车、用户侧储能、大规模储能等领域具有广阔的应用前景。

近日，中科院大连化学物理研究所研究员李先锋、副研究员郑琼带领的研究团队，在钠离子电池钒基正极材料储能机理研究方面取得新进展，揭示了单斜相和四方相一氟磷酸钒钠（ NaVPO_4F ）的不可逆相变机制及储钠动力学过程。相关研究成果发表于《先进能源材料》。

钒基聚阴离子型化合物具有晶胞结构稳定、钠扩散快等优点，是高比能量、高比功率、高稳定性钠离子电池的优选正极材料之一。相比于磷酸钒钠和三氟磷酸钒钠， NaVPO_4F 因具有高的理论比容量，受到研究者广泛关注。近年来的研究表明，四方型和单斜型晶相的 NaVPO_4F 可通过不同制备方法获得，在某些条件下会出现晶相转变现象。但是，对两种晶相晶胞结构、两相间的转化机制及两相储钠动力学行为深入理解的缺乏，限制了 NaVPO_4F 在钠离子电池中的应用。

基于前期在钒基正极方面的研发基础，该团队通过低温水热法和高温烧结法分别获得了具有高结晶度和高纯度的四方相 NaVPO_4F 和单斜相 NaVPO_4F 并从原子尺度观察到两相的准确晶胞结构和构相差异，其中，单斜相在c轴方向上呈正方形晶胞边界，单斜相在[214]方向呈平行四边形晶胞边界。结合原位变温环境TEM等表征方法，团队发现，由于两相V-P-V键角不同引起的结合能差异，单斜相因具有更高的V-P-V键结合能表现出更好的热稳定性，当温度升高至650摄氏度以上时会发生由四方相 NaVPO_4F 逐渐转变为单斜相的不可逆相变。

接下来，利用电化学原位XRD和DFT理论计算等相结合，团队解析了两种晶体结构在电化学过程中的储钠反应机制及电荷传递动力学，即四方相在充放电过程中发生无相变的固溶体反应，单斜相发生由单斜—正交的两相相变反应，因此前者的电化学稳定性更好；在动力学方面，单斜相 NaVPO_4F 具有更高的本征电导率和钠离子扩散速率，表现出更高的功率密度，而四方相 NaVPO_4F 电荷传递动力学虽慢，但其本征脱钠活化能较高，放电电压较高，表现出更高的能量密度，证实了单斜相 NaVPO_4F 可作为一种功率型钠离子电池用正极优选材料，四方相 NaVPO_4F 可作为一种能量型钠离子电池用正极优选材料。

研究团队表示，该研究为高性能钠离子电池电极晶胞结构设计及下一代高比能量、高比功率钠离子电池体系开发提供了理论基础和技术支持。（来源：中国科学报卜叶凌模糊）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1002/aenm.202100627>

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在

正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：shouquan@stimes.cn。
作者：李先锋等 来源：《先进能源材料》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发