
固态锂电池和快离子导体材料研究领域新突破

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/17845.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！

固态锂电池和快离子导体材料研究领域新突破。近日，加州大学伯克利分校Gerbrand Ceder教授与三星美国研究院王琰团队在Nature Materials上发表了一篇题为Lithium superionic conductors with corner-sharing frameworks的新研究。

该研究团队发现在氧化物锂离子导体材料（用于固态锂电池）中，高价阳离子-氧配位多面体共顶点连接形成的结构骨架有利于锂离子的快速传导。基于这一结构特征，结合高通量筛选和分子动力学模拟，该团队预测出了10种新型的快离子导体材料。论文的通讯作者为王琰，Gerbrand Ceder；（共同）第一作者为KyuJung Jun，孙滢智。

随着锂离子电池在便携电子设备、电动汽车等领域的广泛应用，锂离子电池的安全性问题也受到了越来越广泛的关注。其中，有机液态电解液的泄漏和易燃问题一直是锂离子电池的一个重大安全隐患。使用无机固态电解质替代有机液态电解液可以从根本上解决这一问题、提升电池的安全性，而开发无机固态电解质的关键便在于发掘新的快离子导体材料。

加州大学伯克利分校Gerbrand Ceder教授与三星美国研究院王琰团队研究发现在氧化物锂离子导体材料的晶体结构中，高价阳离子-氧配位多面体多以共顶点（corner-sharing，简称CS）形式进行连接。基于这一结构特征，该研究团队对材料基因组数据库中8572种含锂氧化物进行了高通量筛选，并结合分子动力学模拟最终预测了10种新型的快离子导体材料。同时，该研究团队已成功合成出其中一种新型的快离子导体材料—— $\text{LiGa}(\text{SeO}_3)_2$ 。通过电化学阻抗谱（EIS）分析，该材料在室温下的体相锂离子导率可以达到 0.11 mS/cm ，与预测结果相符。

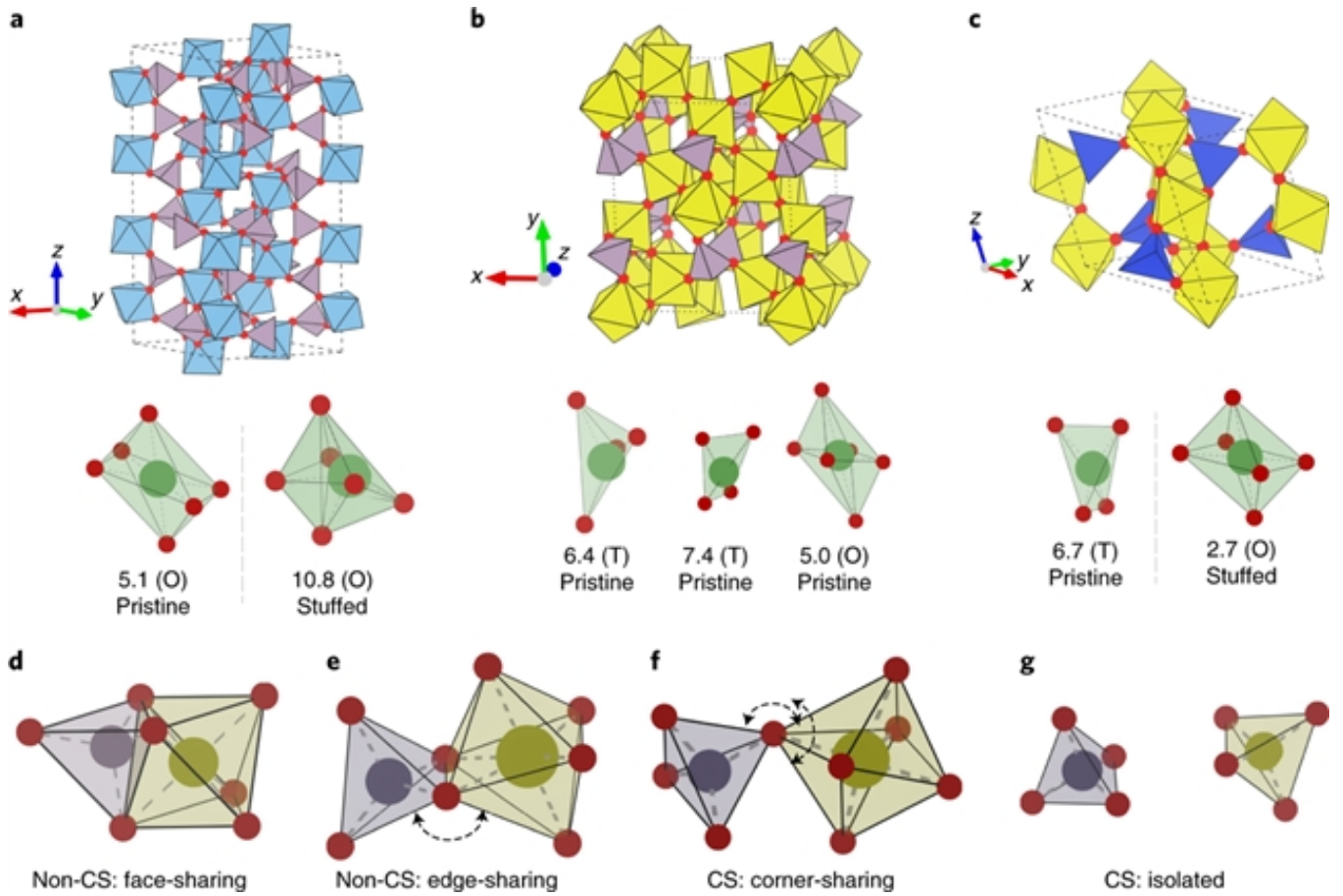


图1：已知的拥有高价阳离子-氧配位多面体共顶点骨架结构的锂离子导体材料

a

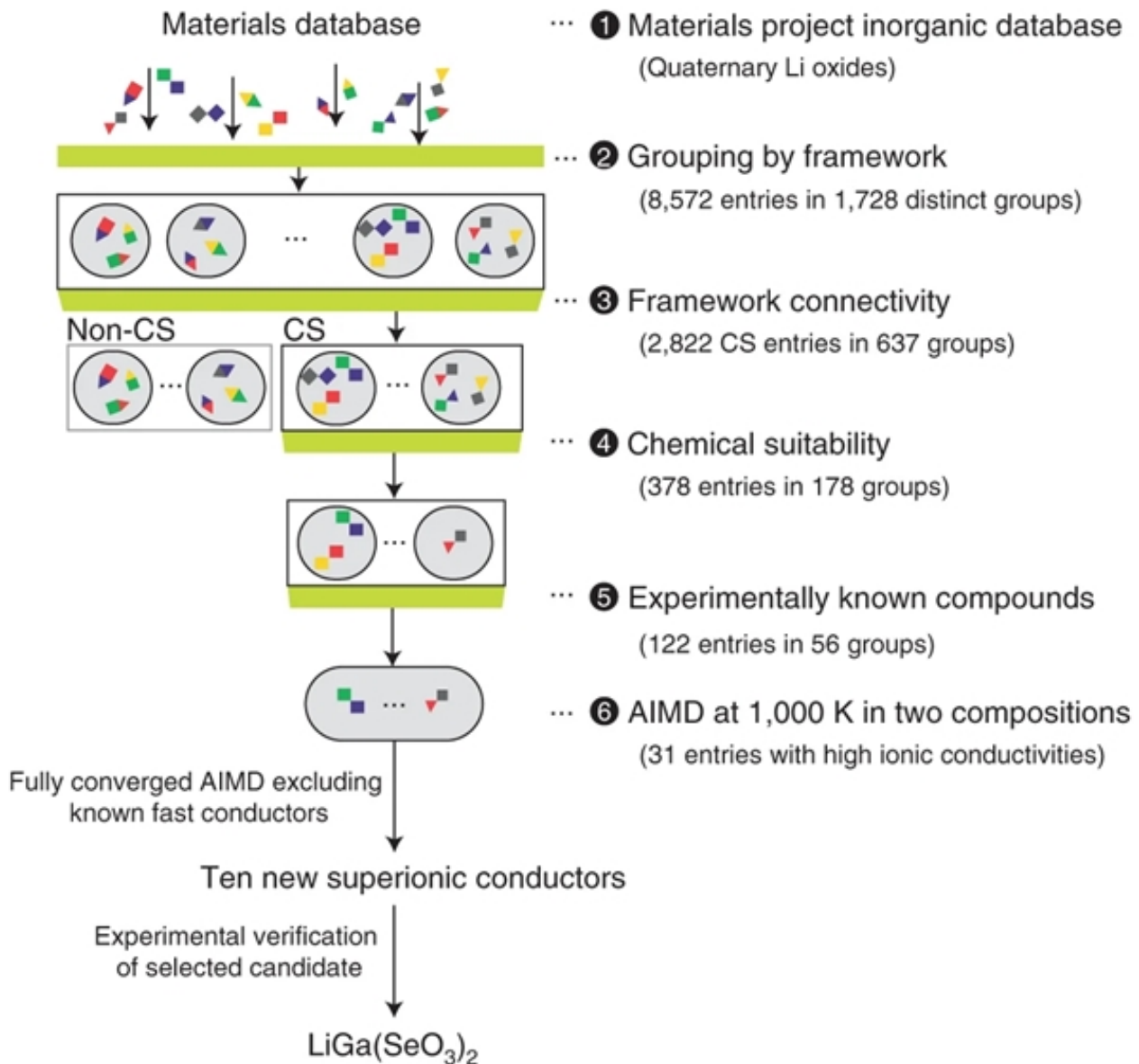


图2：高通量筛选拥有高价阳离子-氧配位多面体共顶点骨架结构的新型锂离子导体材料

该研究团队进一步探讨了共顶点骨架结构促进锂离子传输的机理。通过对比不同结构中锂离子配位多面体的连续对称测度（Continuous symmetry measure，简称CSM）分布，该团队发现共顶点骨架结构中锂离子配位环境畸变程度更大。配位环境的畸变导致了锂离子稳定位点的能量升高，进一步导致了锂离子迁移活化能的降低，提高了锂离子的迁移活性。借助Bain转变模型中四面体-/八面体-配位环境的变化，该团队对这一机理进行了模拟和验证。

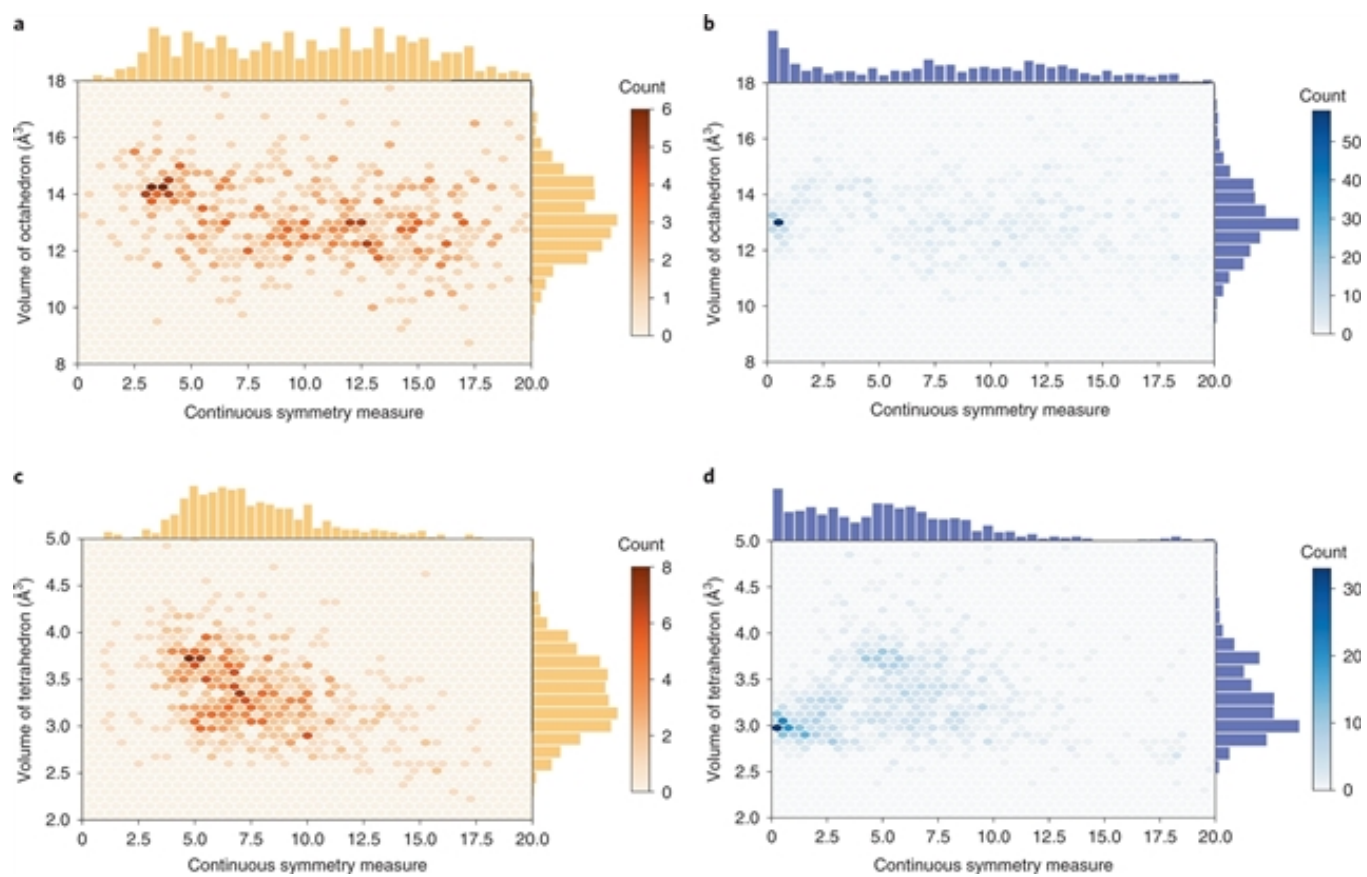


图3：不同骨架结构中锂离子配位多面体的连续对称测度分布

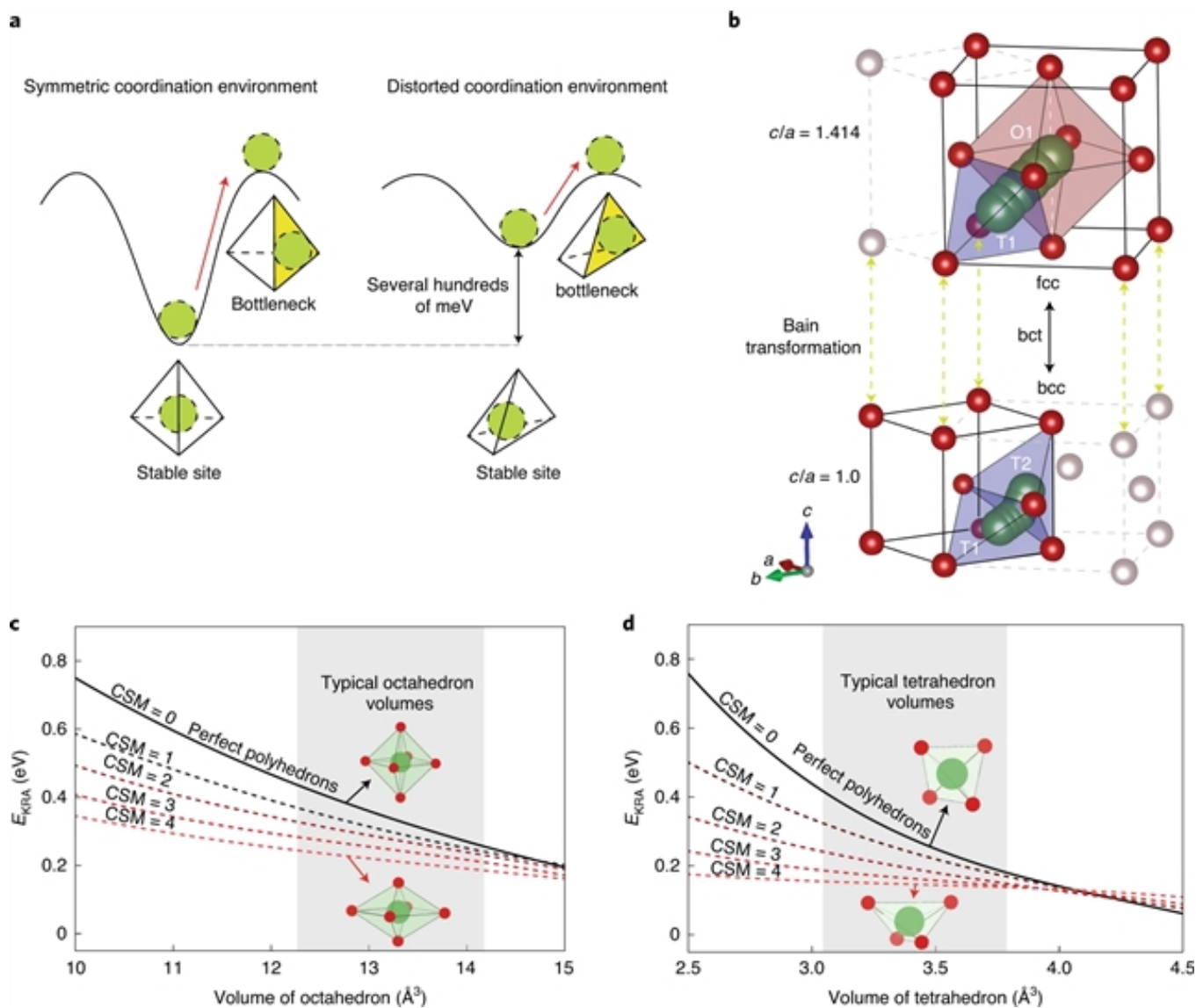


图4：配位环境的畸变程度对迁移活化能的影响

此外，考虑到相比于其它类型比如共边（edge-sharing）、共面（face-sharing）结构的材料，共顶点结构材料的原子堆叠得更为稀松，该研究团队认为共顶点结构中锂离子的迁移位点与高价阳离子距离较远，感受到的高价阳离子排斥作用更弱，这也有利于锂离子的快速迁移。本篇工作进一步定义了弱排斥作用通道（reduced-repulsion channel，简称RR-channel），并分析了这种通道在不同骨架结构中的分布。分析结果表明共顶点骨架结构中拥有更多高维、连通的弱排斥作用通道，同时这些通道与锂离子的传输通道一致。

整体上讲，本篇工作最重要的意义在于揭示了氧化物锂离子导体的结构特点，这为新型锂离子导体材料的开发提供了较为明确的方向，降低了寻找新型固态电解质的门槛，进而有望加速固态电池的研发及应用。（来源：科学网）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41563-022-01222-4>

作者：王琰等 来源：《自然-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