
具有锂轨道杂化材料揭示钠离子电池新作用机制

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/28749.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！

具有锂轨道杂化材料揭示钠离子电池新作用机制。西安交通大学电气学院王鹏飞教授和肖冰教授团队设计了一种具有锂轨道杂化的钠基层状正极材料，通过引入特殊的Na-O-Li构型，激发未杂化的O 2p轨道参与电荷补偿，揭示了锂轨道杂化化学在钠电正极材料阴离子氧化还原反应和结构演化的新作用机制，近日该研究成果发表在《美国化学会志》上。

该研究发现，由于额外的阴离子氧化还原反应，氧离子层所携带的负电荷减少，显著降低了O-O层的静电斥力，这有效缓解了反应过程中的动态相变，因此设计的正极材料在提升阴离子反应可逆容量和动态相稳定性之间达到了平衡，在2.0-4.5 V电压范围内获得了183 mAh g⁻¹的高比容量。该研究为开发高能量密度钠离子电池正极材料提供了科学指导。

为了满足日益增长的储能需求，钠离子电池因其资源丰富和成本效益高的优势，被广泛认为是锂离子电池的一种有效补充，研制晶格氧参与氧化还原反应的层状氧化物正极材料是一种有效提升钠离子电池能量密度的策略。然而，阴离子氧化还原反应在动态脱嵌钠离子过程中通常会面临电化学反应不可逆和有害的结构畸变等科学难题。因此，调节阴离子氧化还原的可逆性，同时稳定反应过程中的动态相演化以获得额外的容量和能量密度，对于开发阴离子氧化还原反应参与的高比能钠离子电池正极材料具有重要意义。（来源：中国科学报 严涛）

相关论文信息：<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jacs.4c04814>

作者：王鹏飞等 来源：《美国化学会志》

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](https://www.iikx.com)转发