物理所等在钠离子高熵层状氧化物稳定性研究中获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/29790.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！

物理所等在钠离子高熵层状氧化物稳定性研究中获进展。

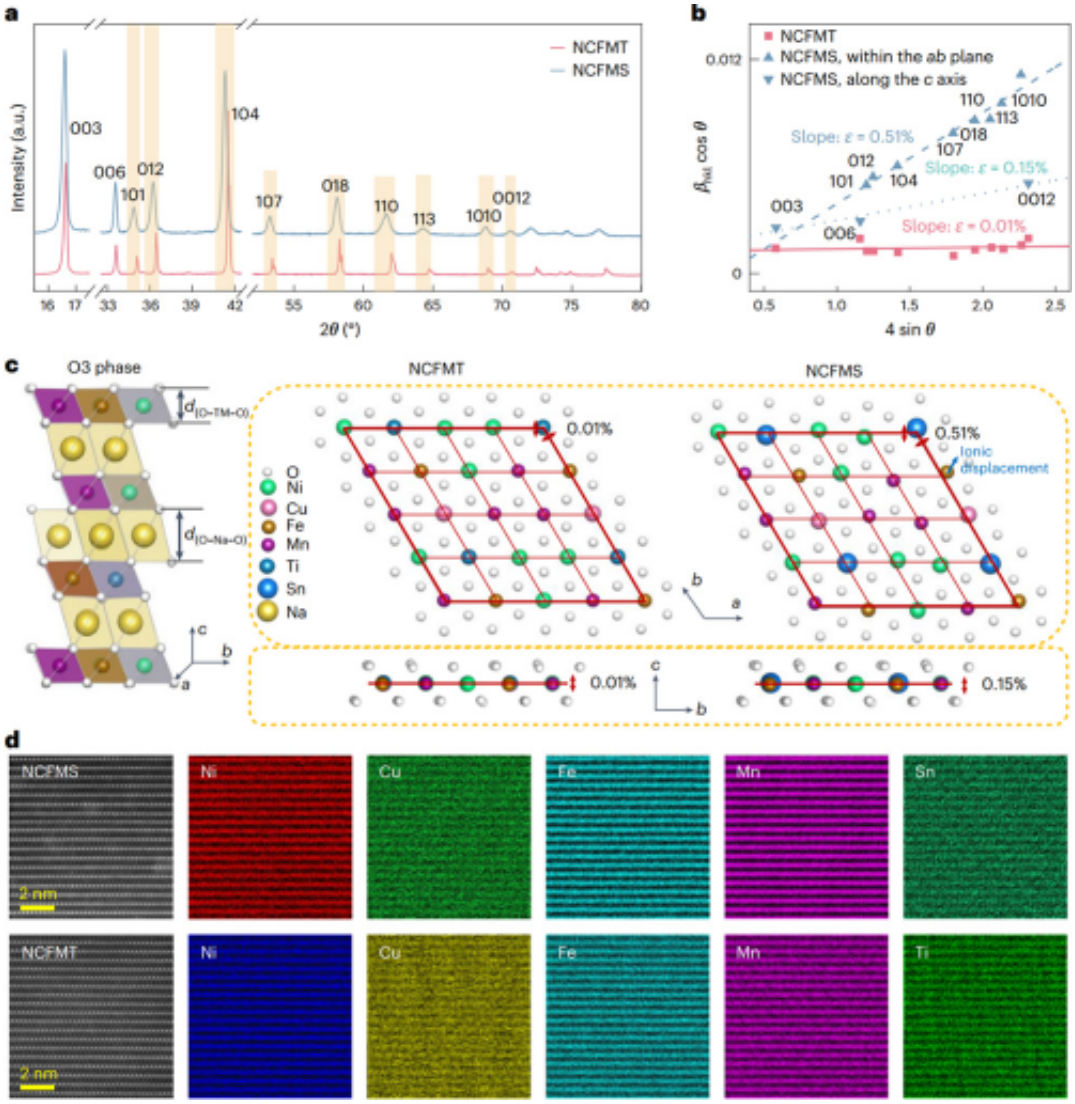
钠离子电池中正极材料的性能直接影响电池的循环寿命。传统的三元钠离子层状氧化物正极材料中，可变价元素通常趋向于均匀分布以减小体系的能量。这是由于该材料一旦发生氧化态的改变，局部结构会发生变化而导致相变发生。在过往的研究中，高熵层状氧化物正极材料展现出较多优势，但存在一些尚未解决的问题。其中，最突出的问题是过渡金属层含有不同的过渡金属离子，而不同的离子质量、半径尺寸和价电子构型可能导致材料内部产晶格应变。这种晶格应变不仅影响材料的结构完整性，而且可能导致电化学性能的退化。因此，亟需开发既能有效抑制晶格应变又能最大化利用高熵效应以稳定材料结构的设计策略。

中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心科研人员与合作者，设计了两种O3型高熵氧化物——在过渡金属层中仅含3d过渡金属的氧化物$NaNi_{0.3}Cu_{0.1}Fe_{0.2}Mn_{0.3}Ti_{0.1}O_2$（NCFMT）以及以Sn取代Ti的非全3d过渡金属的氧化物$NaNi_{0.3}Cu_{0.1}Fe_{0.2}Mn_{0.3}Sn_{0.1}O_2$（NCFMS），并探讨了两种材料的结构特征和电化学性能。研究发现，这两种材料在原始状态下均表现出均匀的元素分布，但NCFMS所含过渡金属离子大小、质量和价电子构型不匹配导致晶格畸变，在过渡金属层内表现出明显的晶格应变。研究通过像差校正高角度环形暗场扫描透射电子显微镜和原子级能量色散x射线能谱，分析了循环后的样品。研究发现，在循环过程中，过渡金属层中的本征应变和累积晶格应变促进金属离子的迁移，导致NCFMS正极颗粒内部和表面的元素偏析和裂纹形成。相比之下，NCFMT全3d过渡金属组成具有更好的结构-电化学兼容性，提升了循环过程中的结构稳定性，减少了电极材料的晶格应力积聚、离子迁移和机械化学疲劳损伤。因此，NCFMT具有相对优异的半电池和全电池循环稳定性。

这一成果为高熵氧化物正极材料的元素组成设计指明了方向，并为开发适用于钠离子电池的长寿命层状氧化物正极材料提供了潜在的解决方案。

近日，相关研究成果以*Tailoring planar strain for robust structural stability in high-entropy layered sodium oxide cathode materials*为题，发表在《自然-能源》（*Nature Energy*）上。研究工作得到国家自然科学基金、国家重点研发计划、中国科学院战略性先导科技专项、中国科学院青年创新促进会会员项目和江苏省相关项目的支持。

论文链接



NCFMT和NCFMS样品的原子结构差异

研究团队单位：物理研究所

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转发