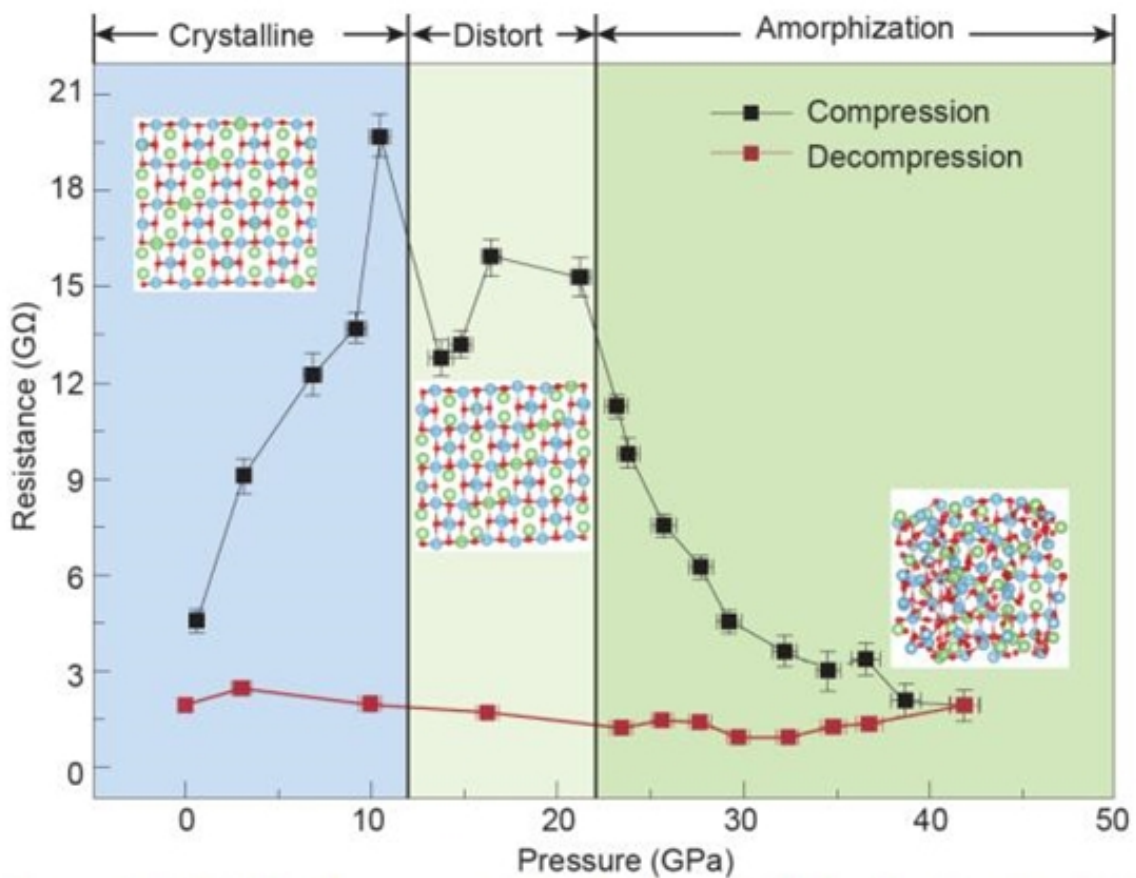


# 压力作用可以提高材料离子电导率

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/3620.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！



在压力加载和卸载过程中，LTO 的电阻以及晶体结构随压力的变化情况

压力作用可以提高材料离子电导率。可充放电电池，已经成为信息时代不可或缺的日常用品之一。它的广泛应用成功解放了许多原本不能移动的用电设备和仪器，促进了电子、信息、运输等诸多产业的飞速发展。虽然锂电池已经开始被应用于电动汽车，但是目前最先进的锂电池的储能密度尚不足汽油燃料能量密度的五分之一。因此，发展具有更优性能的电池材料迫在眉睫。

尖晶石型钛酸锂( $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ , LTO)被称为零应变锂电池材料，其结构很稳定，在锂离子嵌入和脱出过程中其晶胞体积几乎不变。较高的晶体结构稳定性使它具有优良的循环性能和稳定的放电电压。除此之外，它还具有较高的电极电压和较快的充放电速度等优点。这些优势使LTO成为重要

---

的锂离子电池材料。然而美中不足，LTO的电导率很低，束缚了其在高功率电池需求中的应用。为了提高其电导率，科学家们做了大量的研究和探索，但效果并不显著。

压力，作为重要的热力学参数，可以改变物质的原子间距，并引发一系列材料结构与性质的变化。很多常温常压下稳定的材料，在高压下都会发生压致相变，从而产生一种或多种新型化合物，可见压力为新材料的探索提供了一个新的维度。因此，高压下探索和合成新型材料已经成为一个重要的研究方向。然而，对于锂离子电池材料，压力通常会限制锂离子在晶格中的迁移和扩散，导致较低的锂离子电导率，阻碍了其在锂离子电池中的应用。

最近，北京高压科学研究中心王霖课题组和中国科学院地球化学研究所、北京物理研究所等多个单位合作，结合原位高压实验研究和第一性原理计算的方法，对LTO在高压下的结构稳定性和电导率等性质进行了细致的研究。相关研究结果以Li-ion battery material under high pressure: amorphization and enhanced conductivity of  $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ 为题在线发表于《国家科学评论》。

在该项研究中，作者利用金刚石对顶砧高压原位测量技术，对LTO在高压下的结构相变和电导率进行了表征，发现LTO在高压下结构并不稳定，会发生畸变；当压力达到270,000大气压时，由于晶格畸变过于严重，会发生不可逆的非晶相变。卸压过程中发现，该非晶相的LTO可以保留至常压。原位电导率测量发现，该非晶化LTO在高压下和常压下都有更高的电导率。

利用第一性原理计算，该团队对LTO在高压下的相变以及电导率变化机理进行了深入研究。计算结果表明，高压下LTO晶格中的两种组成单元 $\text{LiO}_6$ 和 $\text{TiO}_6$ 八面体的压缩率差别很大； $\text{LiO}_6$ 的压缩率不足 $\text{TiO}_6$ 的四分之一。这导致了LTO在高压下的不稳定，从而晶格发生畸变。随着压力升高，畸变越严重，在约270,000大气压时导致了非晶化。该非晶化的LTO为锂离子的迁移提供了更多的空位，因而即使在室温下也具有较高的锂离子电导率。

该研究结果增进了我们对高压下LTO结构性能和导电性能的理解。由于拥有更高的离子电导率，非晶态LTO很可能成为一种潜在的优秀锂离子电池材料。更重要的是，本研究表明，压力作用可以提高材料的离子电导率，从而为开发更多较高离子电导率的锂离子电池材料提供了一条新的途径。

相关论文信息：<https://doi.org/10.1093/nsr/nwy122>

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