无钴高镍层状氧化物正极材料研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/42328.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！

无钴高镍层状氧化物正极材料研究取得进展
。氧化物正极材料是决定锂离子电池能量密度、倍率性能、循环寿命和安全性的核心材料。

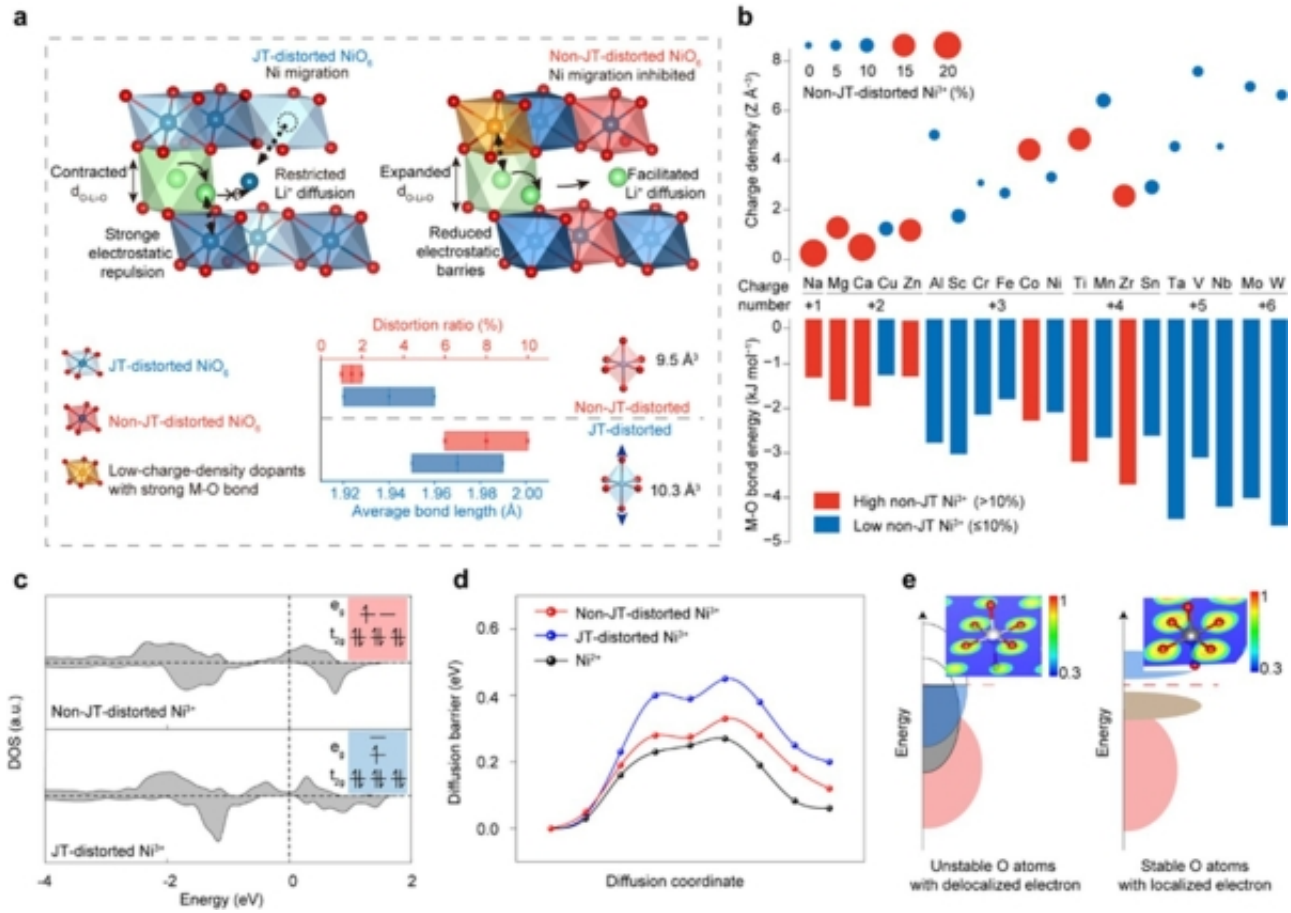
近日，中国科学院金属研究所在无钴高镍层状氧化物正极材料研究中取得进展。团队提出基于物理化学描述符的多元微量元素设计策略，将微量元素的离子电荷密度和金属—氧键合强度作为关键参数，建立了微量元素本征性质与锂离子传输、结构稳定性之间的内在关联，实现了电池正极材料微量元素设计由经验试错向目标导向型设计的研究范式转变。

研究团队基于物理化学描述符设计框架，提出引入低电荷密度微量元素，减弱锂离子迁移过程中的静电约束，提升离子传输动力学，并利用强金属—氧键元素增强氧亚晶格及过渡金属—氧骨架的结构稳定性，构建了“ 离子传输—晶格稳定性 ”协同调控的正极材料设计思路，制备出镁、钙、钛、锆多元微量元素协同无钴高镍正极材料。该正极材料实现了高倍率性能与结构稳定性同步提升。在25C倍率下可提供130.9mAh · g^{-1}
的比容量。在10C倍率下，循环350圈后容量保持率达到82.4%。在-20°C下，能以1C倍率释放112 mAh · g^{-1}比容量。软包电池测试中，在-20°C下，5.74Ah
LiMD-LNMO软包电池实现了278.6Wh · kg^{-1}
的能量密度，展现出优异的低温储能性能。多模态表征结果表明，描述符驱动的多元微量元素设计能同步提升锂离子传输动力学、抑制有害相变、缓解电化学失效，显著增强无钴高镍正极材料的结构稳定性、高倍率性能和低温服役能力。

该研究突破了氧化物正极材料微量元素选择长期依赖经验判断和反复试错的研发模式，建立了物理化学描述符驱动的微量元素设计新范式，为兼具高能量密度、长循环寿命和快速充放电能力的锂离子电池正极材料开发提供了新方法，也为其它无机电池材料精准设计与性能优化提供了重要参考。

相关研究成果发表在《自然-合成》（*Nature Synthesis*）上。研究工作得国家重点研发计划、国家自然科学基金等的支持。

论文链接



基于物理化学描述符的多元微量元素协同设计与无钴高镍正极材料开发

研究团队单位：金属研究所

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