
3D无序阳离子骨架实现锂离子电池稳定氧变价反应研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/4621.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！

3D无序阳离子骨架实现锂离子电池稳定氧变价反应研究取得进展。中国科学院物理研究所、松山湖材料实验室依托中国散裂中子源在锂离子电池材料结构研究方面取得新进展。

锂离子电池因其各方面的优势，已经被作为储能领域的首选技术。不断提升其能量密度一直是各国科学家和技术人员努力的方向。锂离子电池的能量密度正相关于单位质量正极材料脱嵌锂的数量。众多研究表明，富锂氧化物正极材料中的晶格氧可以通过自身的变价(氧化还原)反应来大幅度提升材料脱嵌锂的数量，从而实现较高的能量密度。然而，如何设计调控材料的结构去实现稳定可逆的氧变价反应一直不是非常明确。

近日，中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心博士生赵恩岳、博士李庆浩在松山湖材料实验室双聘研究员王芳卫、禹习谦的共同指导下，与物理所博士生孟繁琦、研究员谷林、何伦华，美国劳伦斯伯克利国家实验室研究员Wanli Yang以及上海同步辐射光源、美国橡树岭国家实验室、日本散裂中子源的研究人员合作，在前期中国散裂中子源第一个用户实验研究成果(Energy Storage Materials 16 (2019) 354)的基础上，首次结合中子粉末衍射与中子对分布函数技术揭示了3D无序的阳离子骨架结构可以用来稳定富锂氧化物正极材料中的氧晶格和氧变价反应。研究人员发现，不同于传统层状富锂材料(2D阳离子有序结构)畸变的氧晶格，具有3D阳离子无序结构的富锂材料在晶格氧发生变价反应的时候可以保持相对稳定的氧晶格骨架。这种差异性的氧晶格结构变化主要源于两种材料体系不同的结构维度。晶格氧的变价反应通常发生在富锂材料内未杂化的O2p轨道(Li-O-Li配位构型)上，为了降低整个材料体系的能量，被氧化晶格氧离子之间的距离会缩短(也即氧晶格畸变)。发生这一氧晶格畸变的前提是两个未杂化O2p轨道要共面。然而在阳离子无序富锂材料中，其3D无序空间分布的阳离子，会导致未杂化O2p轨道彼此之间不共面的概率非常高。所以在阳离子无序富锂材料中观察到了稳定的氧晶格结构。这种稳定的氧晶格骨架反过来又会促进材料内晶格氧变价反应的可逆性。该工作研究结果表明材料的结构维度可以被设计和调控去实现晶格氧变价反应的稳定性与可逆性。更为重要的是，该工作揭示了结构维度对晶格氧变价反应以及整体氧晶格结构的影响。

该研究为后续高性能新材料的设计提供了非常好的理论基础与研发思路，成果发表在《德国应用化学》(Angew. Chem. Int. Ed.)上，被期刊编辑部评选为Very Important Paper(VIP, Top 5%)，国际专业媒体ChemistryViews也有重点报道。

图1. 富锂氧化物正极材料结构示意图。

图2. 材料中子粉末衍射、中子对分布函数以及电化学数据。

图3. 材料氧变价电荷补偿过程。

图4. 氧变价过程中氧晶格结构的演化。

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://iikx.com)转发