

## 物理所基于材料基因组的锂电池固态电解质设计取得进展

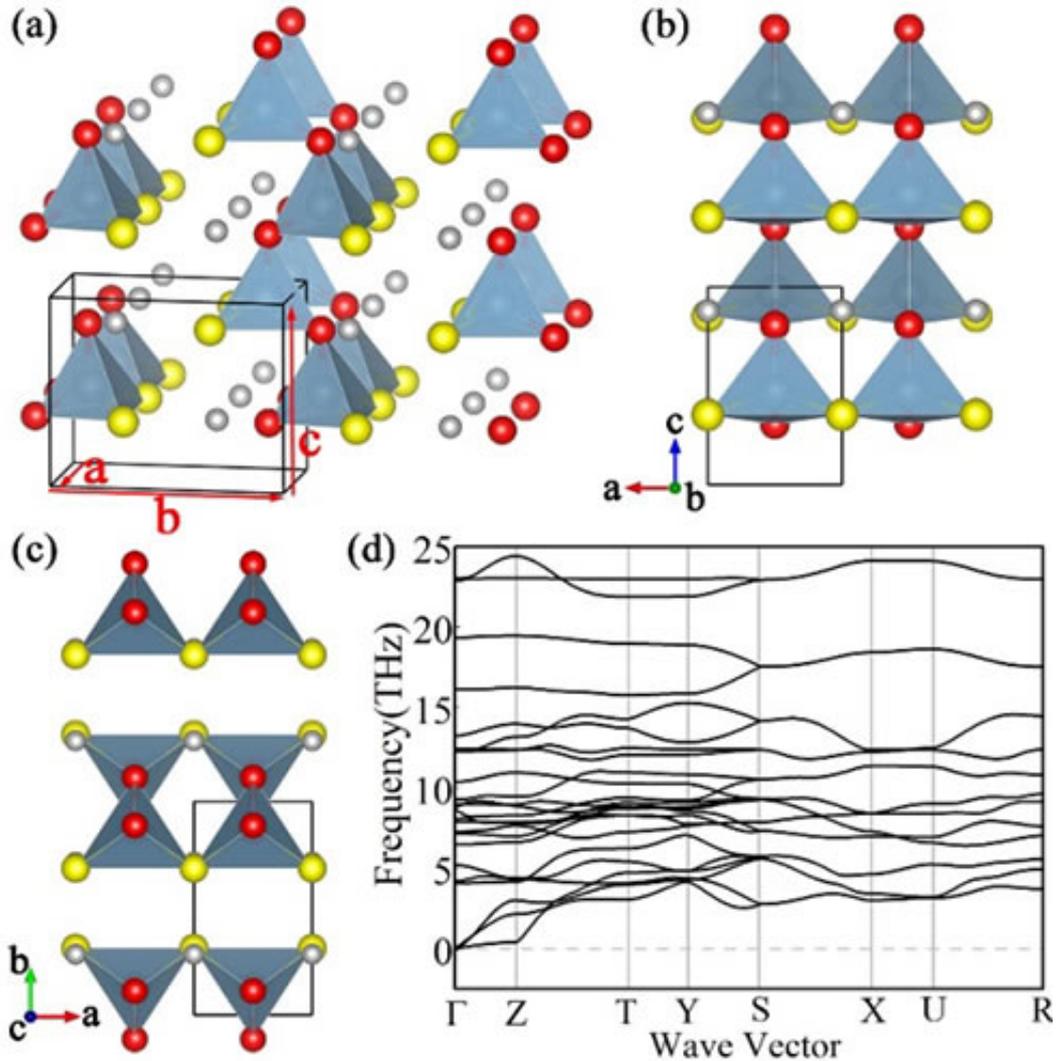


图1 通过计算预测得到的 (a) Pmc21空间群LiAlSO<sub>4</sub>F的晶体结构，沿 (b) b-轴和 (c) c-轴的视图以及 (d) 计算得到的声子谱。灰色、黄色和红色的圆球分别代表Li, S和O原子。四面体代表AlS<sub>2</sub>O<sub>2</sub>单元。

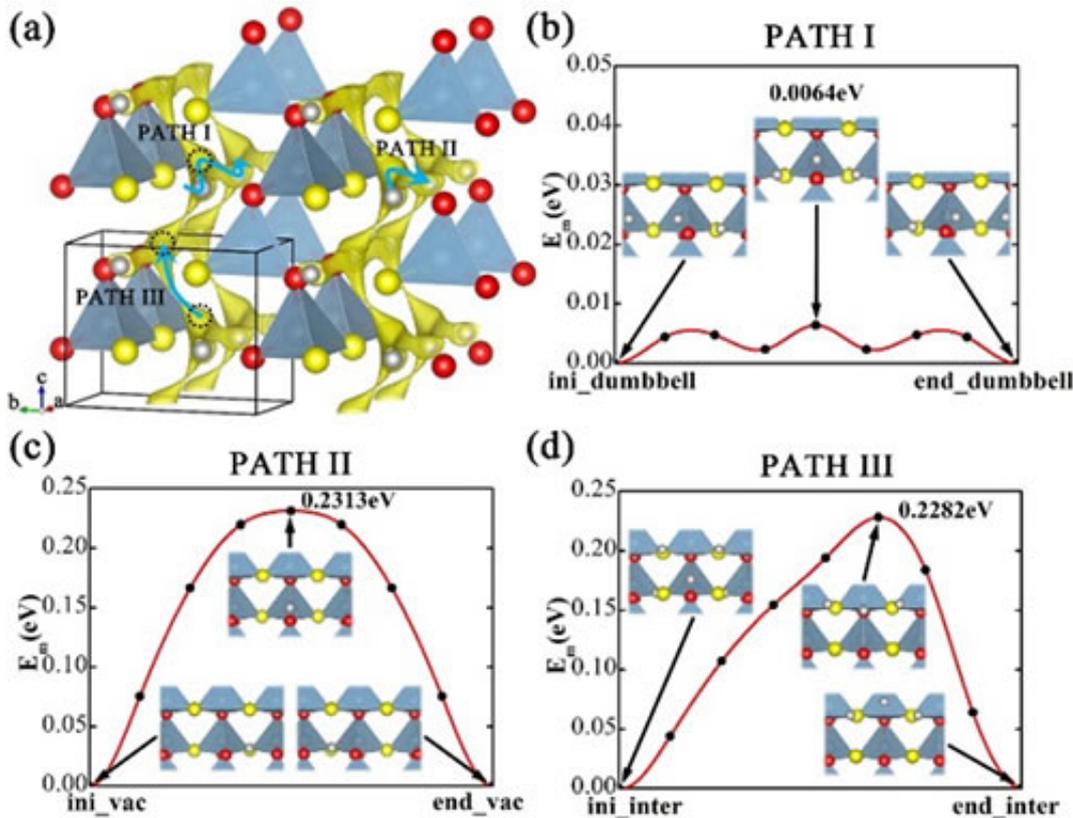


图2 计算得到的Pmc21-LiAISO的动力学性质。(a) 通过BVpath程序计算得到的LiAISO中的锂离子运输通道以及由密度泛函方法计算得到 (b) Li+沿a方向由间隙离子与晶格位离子协同运动的迁移势垒, (c) Li+沿a轴方向空位迁移的势垒, (d) Li+沿c方向间隙离子迁移的势垒。

材料基因组是近年来兴起的材料探索方法,其研究的关键是实现材料研发的“高通量”,即并发式完成“一批”而非“一个”材料样品的计算模拟、制备和表征,实现系统的筛选和优化材料,从而加快材料从发现到应用的过程。在锂电池中,从改善安全性的角度考虑,全固态锂电池被认为未来二次电池的重要发展方向。然而使用固体电解质材料的一个最大问题是固体电解质中锂离子电导率比常规液态电解质中低了至少一个数量级。由于锂离子的输运快慢与电池性能息息相关,因此开发兼具高离子电导率、高稳定性、高机械强度的固体电解质材料势在必行。

中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家实验室(筹)清洁能源实验室E01组近年来一直致力于将材料基因组思想用于锂电池材料的开发中。但是基于量子力学方法的离子输运性质计算的运算量很大,不适合于发展高通量算法。研究人员通过开发基于半经验势的离子输运路径与势垒计算软件BVpath(计算机软件著作权登记号:2015SR161954),并将不同计算精度的方法相结合用于材料筛选和优化的不同阶段,由此发展了基于离子输运性质的锂电池材料高通量计算流程。使用该高通量计算工具,研究人员对无机晶体结构数据库中1000余种含锂材料的离子输运性质进行了高通量计算筛选,搜索了可能用于下一代固态锂二次电池的固态电解质材料【J Materomics 1,325(2015)】。对于锂离子电导率较高的硫化物,采用不同精度结合的高通量计算研究了固体电解质 - Li3PS4的掺杂优化方案,发现氧掺杂能有效提高离子电导率和改善其热力学稳定性,并通过实验验证了该方案【Sci. Rep. 5, 14227(2015); Phys. Chem. Chem. Phys. 18, 21269(2016)】。

近期,该课题组中国工程院院士陈立泉、研究员李泓和副研究员肖睿娟指导博士生王雪龙,从上述氧掺杂硫化物的方案出发,提出了在固体电解质中引入多种阴离子共存的设计思想,并据此设计出一种全新的氧硫化物固体电解质LiAISO材料。通过基于晶体结构预测方法的高通量计算,确定了该材料的晶体结构,并研究了其热力学稳定性、动力学稳定性和离子输运性质。计算结果显示该化合物在a轴方向具有很低的锂离子迁移势垒,属于快离子导体,有望成为固态锂电池中固体电解质的备选材料。该材料已申请国家知识产权局专利保护(专利申请号:201710046965.8)。这是基于材料基因组思想开发出的第一个全新结构的固体电解质材料,并且将固体电解质材料的研究范围拓展至氧硫化物及混合阴离子化合物的领域。这一研究成果作为编辑推荐论文在《物理评论快报》(Physical Review Letters 118, 195901 (2017))上发表。

通过建立适用于锂二次电池新材料开发的高通量计算理论工具与研究平台,研究人员初步实现了材料基因组思想在

锂电池新材料研发中的示范应用，上述材料基因组方法的成功应用为进一步将信息学引入高通量计算数据的分析、实现材料大数据解读提供了基础，并为在其他类型材料的研究过程中推广这种新的研发模式提供了可能。这一方向的研究工作得到了国家自然科学基金委（11234013）、科技部（2015AA034201）、北京市科委（D161100002416003）、中科院青年创新促进会（2016005）以及北京市材料基因联盟的大力支持。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/109467.html>