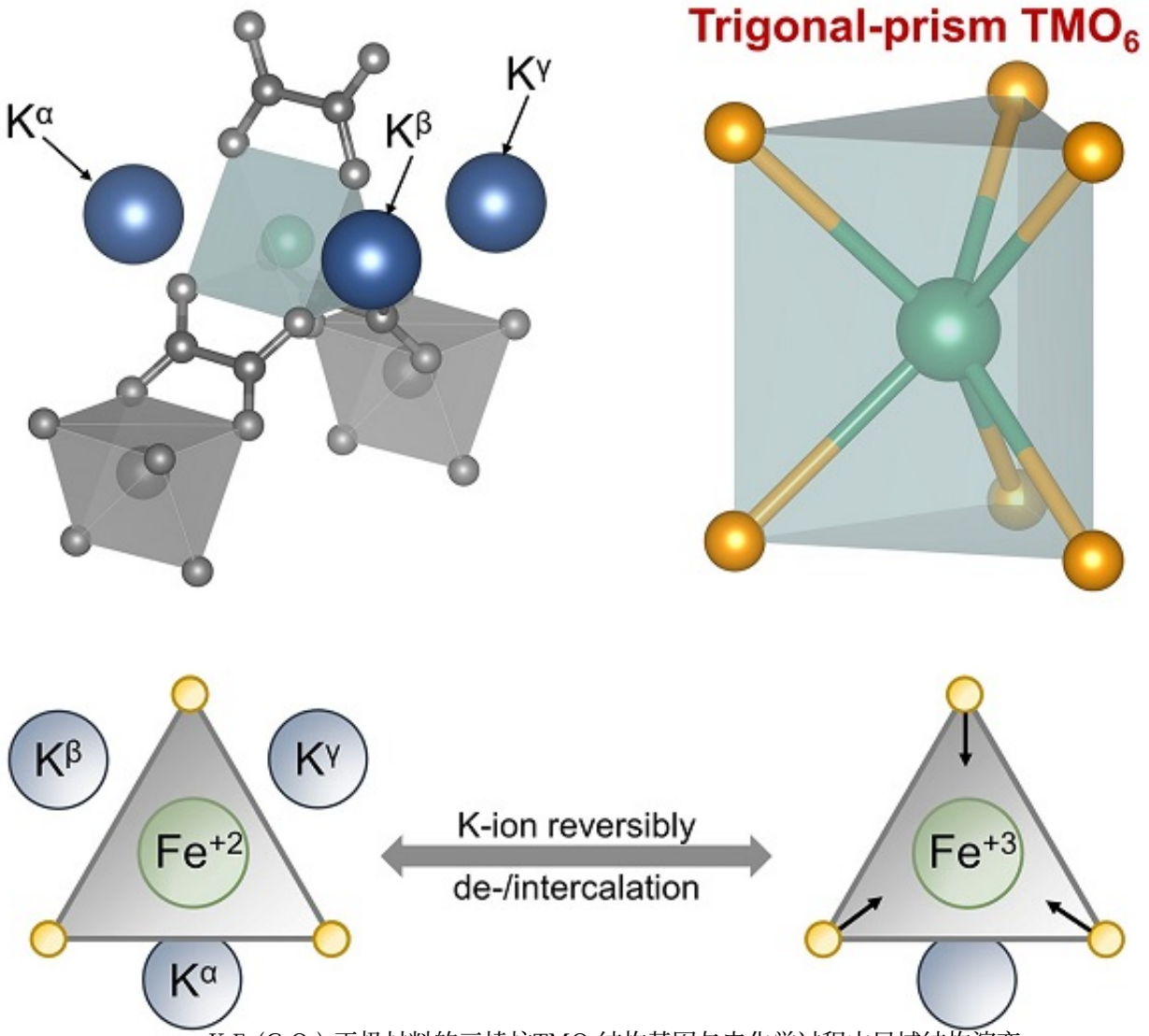
深圳先进院等发现新电池材料设计基因

近日，中国科学院深圳先进技术研究院集成技术研究所功能薄膜材料研究中心研究员唐永炳团队联合泰国同步辐射光源研究所研究员Kidkhunthod
等人，发现了具有三棱柱配体场的正极材料结构基因（TMO_6，TM为过渡金属原子)。相关研究成果以K-Ion Battery Cathode Design Utilizing Trigonal Prismatic Ligand Field为题，发表在Advanced
Materials上。深圳先进院博士生吴南中为论文第一作者，唐永炳和副研究员姚文娇为论文的共同通讯作者。

电池材料的结构基元不仅直接构成了晶体结构，而且决定了其电子结构，尤其是氧化还原中心的电子轨道分裂。因此，结构基元影
响电池材料的本征物化特性，被
视为材料设计基因。现有的晶体电池材料大部分含有TMO_6
基元，且为八面体构形，这限制了电池材料的合理设计。但传统理论认为另一种六配位构型——三棱柱，由于损失较多的晶体场稳定能与较大的配体互斥作用，难以承受电池材料充放电过程中的电荷扰动和离子嵌脱。

该研究中，研究人员研发出一种新型钾离子电池正
极材料——$K_2Fe(C_2O_4)_2$，并发现了可逆的三棱柱TMO_6
结构基因。通过原位同步
辐射等技术，获得了材料局域结构演变的清晰图像
，验证了三棱柱TMO_6结构基因的可逆性和稳定性。该研究为电池材料理性设计提供了新材料基因。

研究工作得到国家自然科学基金、中科院、广东省、深圳市科技计划项目等的资助。



$K_2Fe(C_2O_4)_2$正极材料的三棱柱TMO_6结构基因与电化学过程中局域结构演变

原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/169175.html