

上海硅酸盐所在发展计算电化学方法与固体电解质预测研究中获进展

材料多尺度计算和机器学习是新材料设计的重要手段，在揭示材料本征特性与宏观性能的内在关系方面具有优势。就电池材料而言，电化学性能包含了能量密度、倍率性能、循环性能等多因素。如何通过这些方法实现复杂电池材料性能的有效计算与模拟，对电池材料设计与性能优化十分重要。

近期，中国科学院上海硅酸盐研究所研究员刘建军团队从电池材料中电化学反应焓变对可变参数（如电荷转移数、离子迁移反应坐标、副反应焓变等）微分的电化学活性计算模型出发，构建了多尺度方法和机器学习结合的计算电化学方法，并确定了电化学性能计算的边界条件。利用这种计算电化学方法，可以实现电池材料能量密度与倍率性能有效预测，并能通过与机器学习方法结合，实现电池循环性能的有效预测。相关工作发表在WIREs Computational Molecular Science上。

固体电解质是全固态电池的重要组成，需要满足高离子电导率与电化学稳定性。研究团队利用计算电化学方法，首次发现一种阳离子与阴离子互为五配位多面体堆积的材料

Li_3NbO_4 。与传统晶体结构呈现四配位与六配位不同，该 $[\text{LiO}_5]$ 与 $[\text{NbO}_5]$ 五配位结构

，拓宽了 Li^+ 离子的迁移

通道，具有低的离子迁移势垒（0.39V）与高的离

子电导率（ $3.3 \times 10^{-2} \text{S/cm}$ ），电化学窗口达到了4.38V。相关工作发表在ACS Energy Letters上。

研究工作得到国家自然科学基金重点项目、面上项目、青年基金项目 and 上海市科委等的支持。

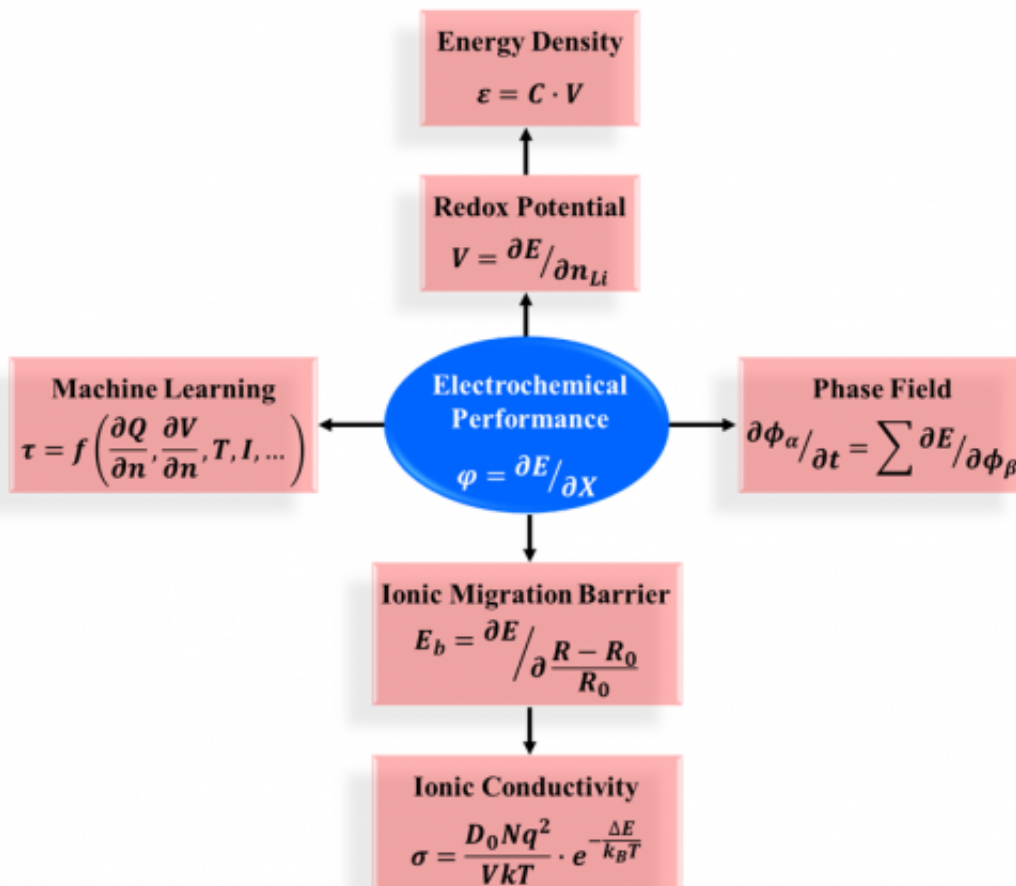


图1. 电化学性质计算方法的本质是在多尺度上求解能量对不同变量参数的微分

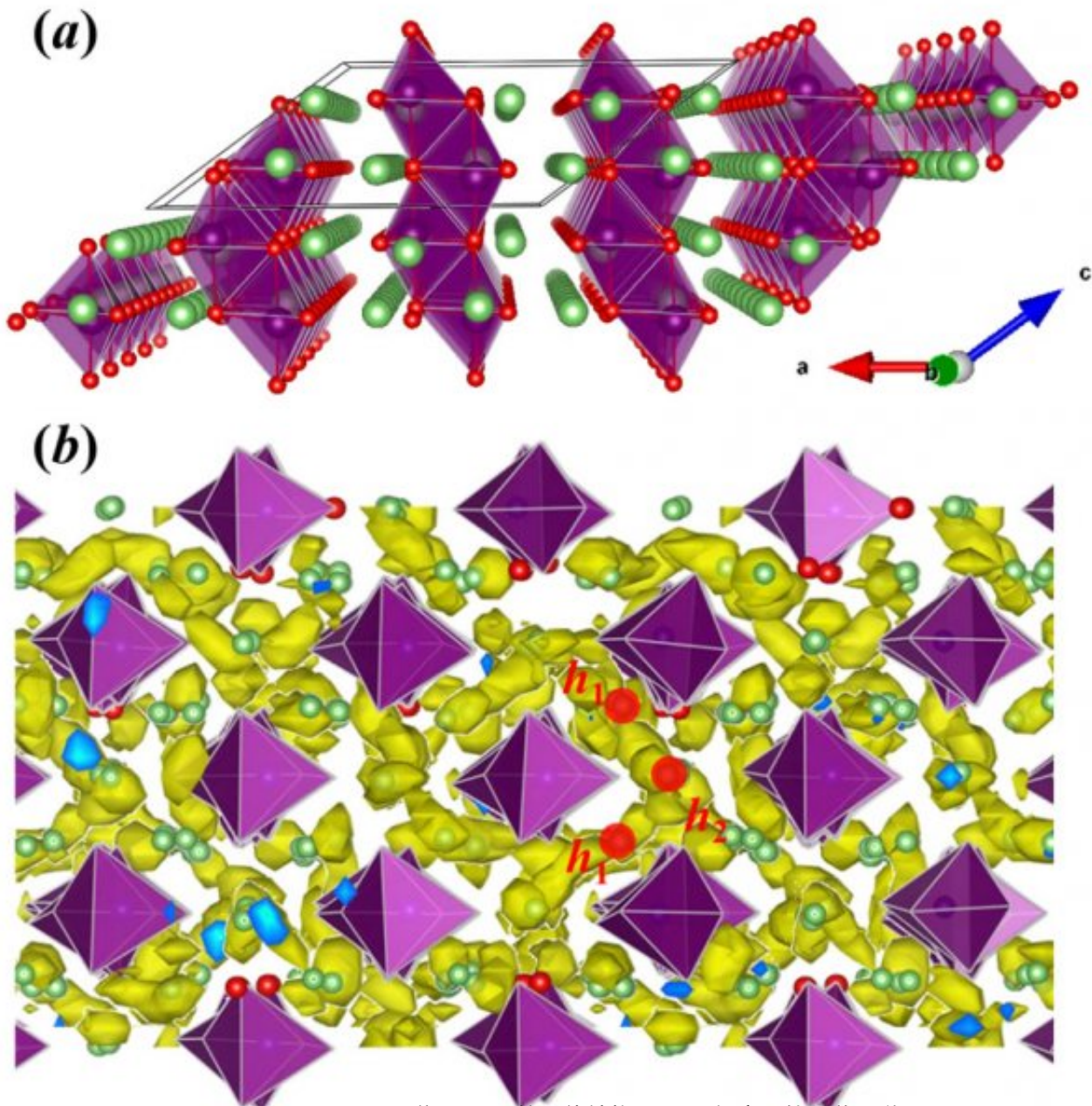


图2. (a) 五配位 Li_3NbO_4 的晶体结构；(b) 锂离子的迁移通道

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/177874.html>