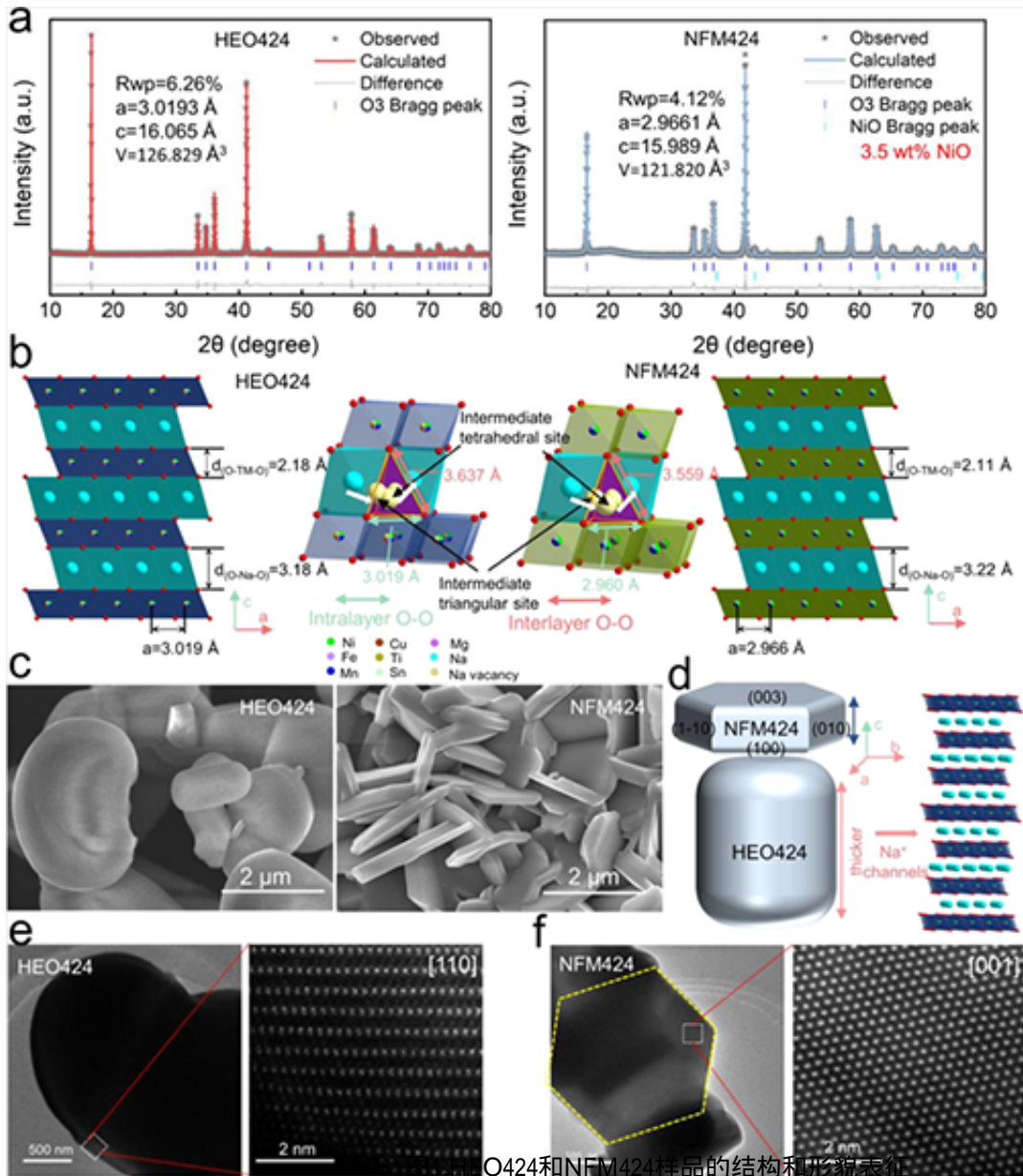


物理所设计高熵构型材料实现钠离子电池正极材料长循环和高安全性能

钠离子电池是锂离子电池的有益补充，其资源丰富、价格低廉，并具有优异的综合性能，是支撑大规模储能领域发展的候选技术之一。近年来，钠离子层状氧化物（ Na_xTMO_2 ，TM为过渡金属离子）作为具有应用前景的正极材料得到广泛研究。但与锂离子层状氧化物正极相比， NaO_2 层中 Na^+ 半径较大， Na^+-Na^+ 静电斥力较强， Na_xTMO_2 在充放电过程中会发生更多复杂的相变，从而对电化学性能产生不利影响。因此对钠离子电池层状材料的设计制备、组成优化和结构调控提出了更高的要求。

近年来，中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心研究员胡勇胜团队在钠离子层状氧化物正极材料方向作了深入探索。近日，针对高熵材料中近乎等摩尔比的活性和非活性过渡金属离子组成显著降低材料的可逆比容量，以及其中昂贵和有毒性的钴和铈离子不利于材料的低成本化和可持续性的问题，物理所/北京凝聚态物理国家研究中心怀柔研究部岗位博士后丁飞翔、容晓晖与副研究员陆雅翔和研究员胡勇胜合作，以 $\text{O}_3\text{-NaNi}_0.4\text{Fe}_0.2\text{Mn}_0.4\text{O}_2$ （NFM424）正极材料为基底，通过替代二价镍和四价锰离子设计出高熵构型的 $\text{NaNi}_0.25\text{Mg}_0.05\text{Cu}_0.1\text{Fe}_0.2\text{Mn}_0.2\text{Ti}_0.1\text{Sn}_0.1\text{O}_2$ （HEO424）正极材料。实验结果表明HEO424为纯 O_3 相，其显著扩宽的过渡金属层扩大了 Na^+ 八面体-四面体-八面体的传输通道，导致较快的 Na^+ 传输动力学；并且显著降低 Ni^{3+} 八面体的姜泰勒扭曲、 Na^+ /空位有序无序转变和晶格参数变化。上述结构特征使高熵HEO424材料具有较好的倍率性能、优异的长循环稳定性，且过渡金属离子溶解和晶间裂纹得到明显抑制。热稳定性研究发现，HEO424材料具有更高的放热温度和更少的放热量，有利于钠离子层状氧化物热安全性的提升。

相关研究成果以Using High-Entropy Configuration Strategy to Design Na-Ion Layered Oxide Cathodes with Superior Electrochemical Performance and Thermal Stability为题，发表在Journal of the American Chemical Society上。研究工作得到中科院战略性先导科技专项、国家自然科学基金项目、中科院青年创新促进会、中国博士后科学基金资助项目、北京市自然科学基金的支持。



HEO424和NFM424样品的结构和形貌表征

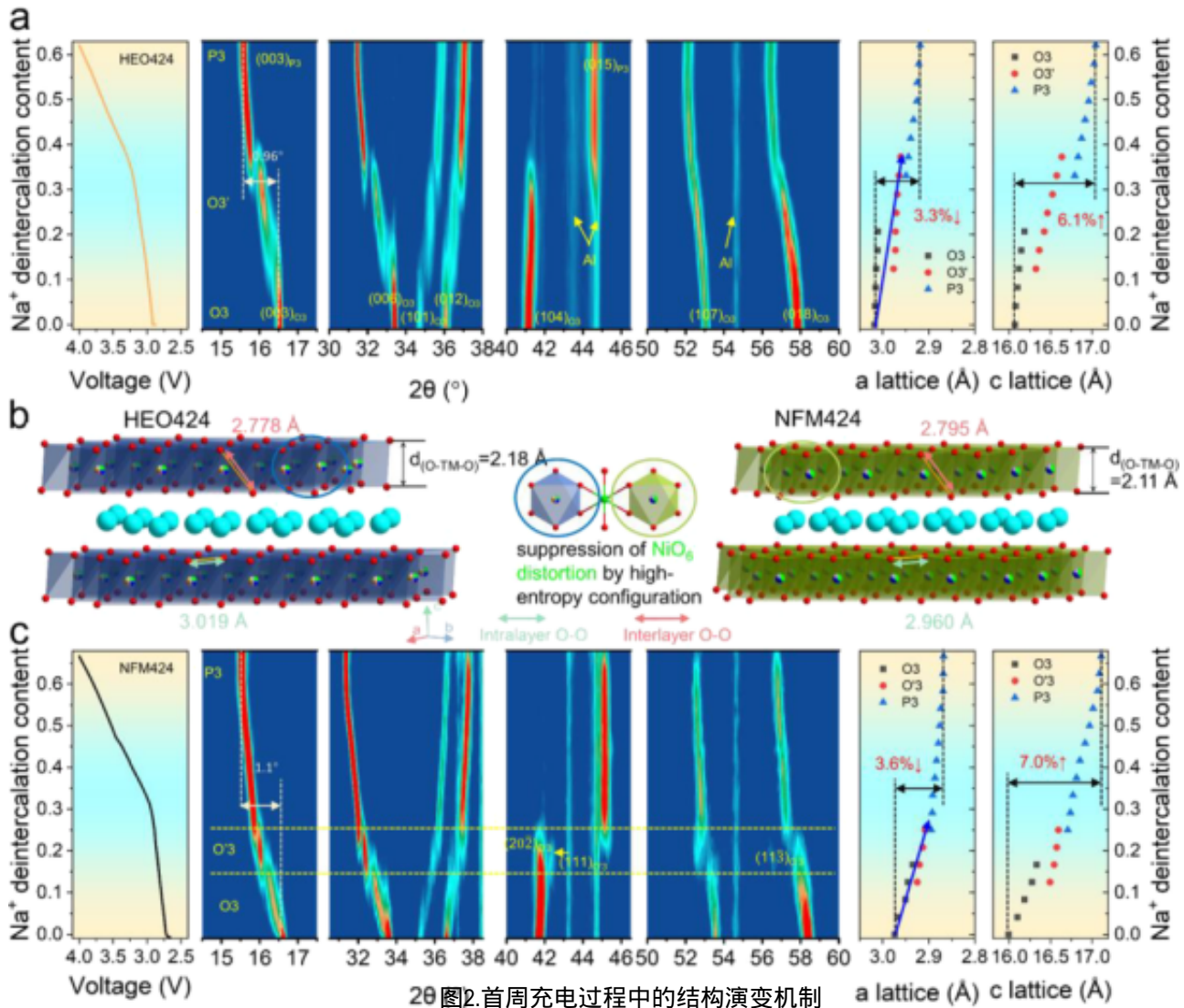


图2. 首周充电过程中的结构演变机制

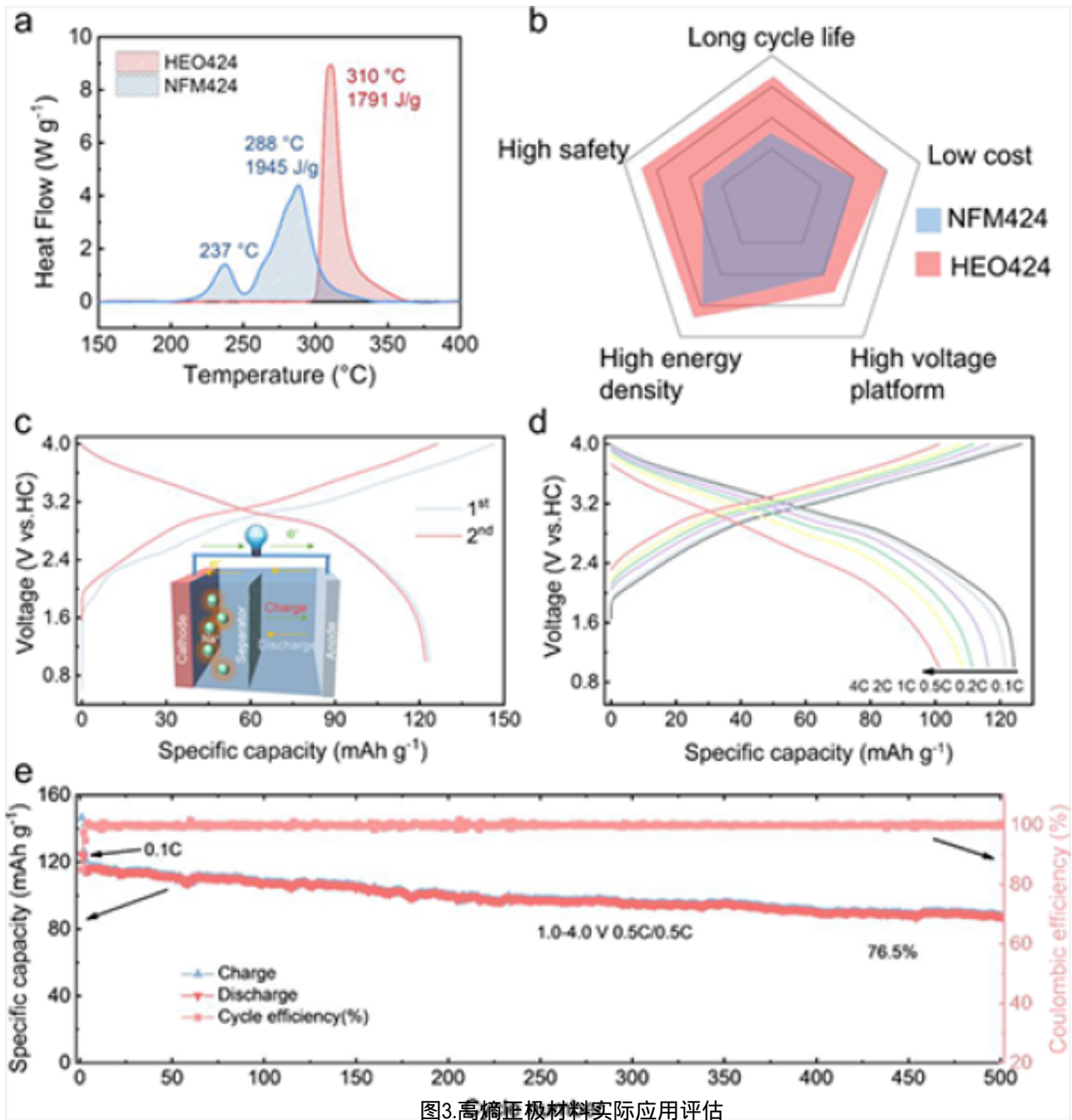


图3.高熵正极材料实际应用评估

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/181869.html>