



面向世界科技前沿, 面向国家重大需求, 面向国民经济主战场, 率先实现科学技术跨越发展,
率先建成国家创新人才高地, 率先建成国家高水平科技智库, 率先建设国际一流科研机构。

——中国科学院办院方针



官方微博



官方微信

首页 组织机构 科学研究 人才教育 学部与院士 资源条件 科学普及 党建与创新文化 信息公开 专题

搜索

首页 > 科研进展

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

文章来源: 物理研究所 发布时间: 2017-06-01 【字号: 小 中 大】

我要分享

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, 全固态锂电池被公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 Materiomics 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 β -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LiAlSO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。

文章链接: 1 2 3 4

热点新闻

国科大举行建校40周年纪念大会

我国成功发射两颗北斗三号全球组网卫星
2018年诺贝尔生理学或医学奖、物理学奖...
“时代楷模”天眼巨匠南仁东事迹展暨塑...
中科院A类先导专项“泛第三极环境变化与...
中国科大建校60周年纪念大会举行

视频推荐



【新闻联播】“率先行动”计划 领跑科技体制改革



【重庆卫视】国家人工智能基础资源公共服务平台在京发布

专题推荐



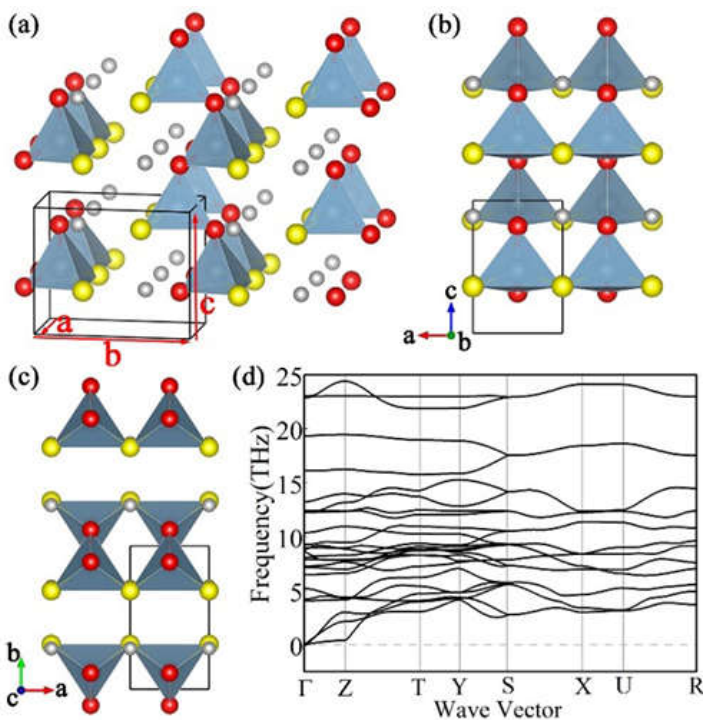


图1 通过计算预测得到的 (a) $Pmc2_1$ 空间群 $LiAlSO$ 的晶体结构, 沿 (b) b -轴和 (c) c -轴的视图以及 (d) 计算得到的声子谱。灰色、黄色和红色的圆球分别代表 Li , S 和 O 原子。四面体代表 AlS_2O_2 单元。

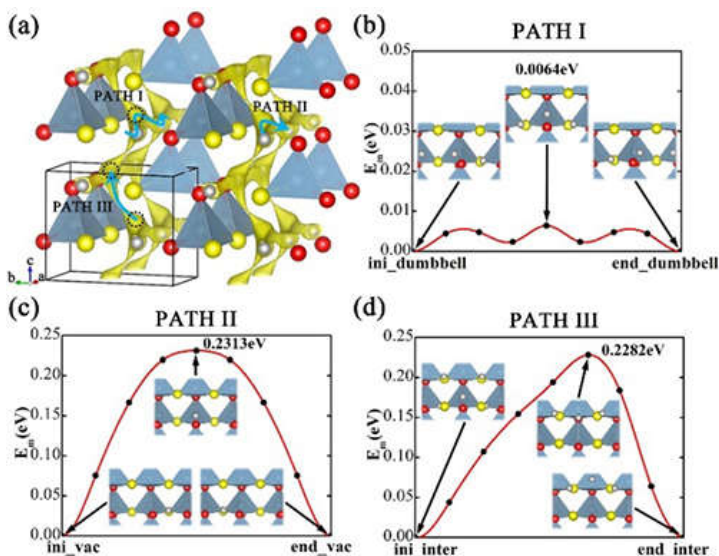


图2 计算得到的 $Pmc2_1-LiAlSO$ 的动力学性质。(a) 通过BVpath程序计算得到的 $LiAlSO$ 中的锂离子运输通道以及由密度泛函方法计算得到 (b) Li^+ 沿 a 方向由间隙离子与晶格位离子协同运动的迁移势垒, (c) Li^+ 沿 a 轴方向空位迁移的势垒, (d) Li^+ 沿 c 方向间隙离子迁移的势垒。

(责任编辑: 叶瑞优)



© 1996 - 2018 中国科学院 版权所有 京ICP备05002857号 京公网安备110402500047号 联系我们
地址: 北京市三里河路52号 邮编: 100864