

首页

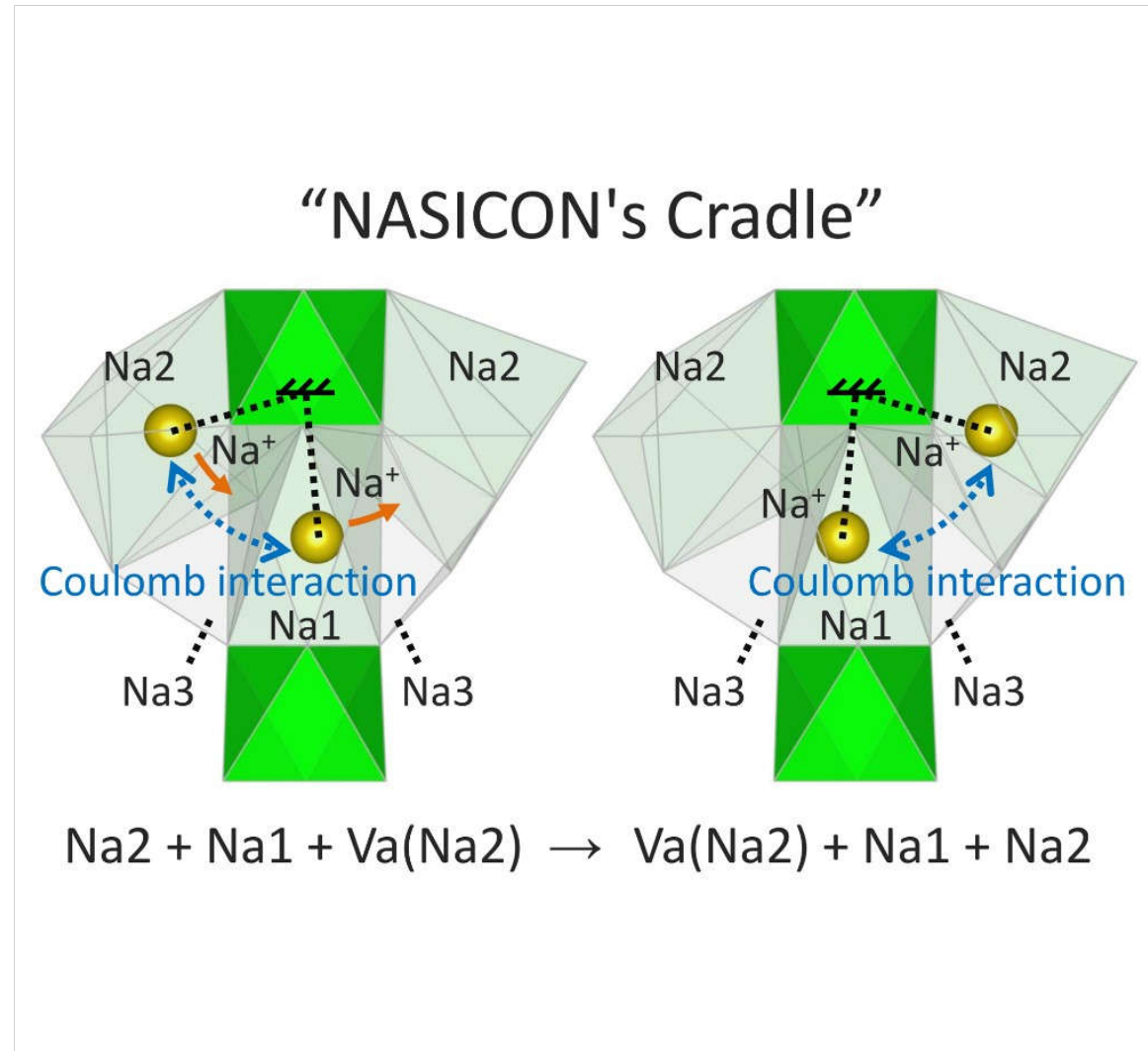


材料学院施思齐团队在《Advanced Energy Materials》发表关于三方NASICON中钠离子分布、协同运输及扩散性质之间关系的研究论文

发布日期: 2020/07/01 投稿: 高珊 部门: 材料科学与工程学院 浏览次数: 815 [返回](#)

NASICON型化合物通式为 $A_xM_2(XO_4)_3$ (A 为碱金属、碱土金属等, M 为过渡族金属或类金属, X 一般为Si或P元素)。基于选择不同的 A 位阳离子以及不同的 M 位过渡族金属离子, NASICON型化合物可以被用作锂离子电池、钠离子电池、高价离子电池以及混合离子电池的电极材料和固态电解质材料。三方相是NASICON型化合物最常见的相结构之一, 其空间群为 $R-3c$, 空间群号为167。目前, 虽然三方NASICON型化合物中离子通道和离子通道中存在的瓶颈已经被广泛研究, 但是还存在一个争议有待解决, 即Na1-Na3-Na2-Na3-Na1通道和Na2-Na3-Na3-Na2通道中哪一条通道是离子最倾向于传输的通道。此外, 研究者们报道了在许多固态电解质材料中(如 Li_3N 、 CaF_2 、 AgI 、具有石榴石结构的锂离子导体、LISICON以及thio-LISICON衍生物、NASICON型锂离子导体等)存在多个离子协同运输的现象。通常, 这种多个离子协同运输的势垒相较于单个锂离子输运势垒要更低。Mo等人进一步提出了特定的离子排布(高/低能位离子占据)和迁移离子之间强的库伦作用是产生这种协同运输的关键。那么如何获得这种特定的离子排布, 是快离子导体研究中的关键问题之一。

最近，上海大学施思齐教授团队以三方NASICON型化合物 $\text{NaZr}_2(\text{PO}_4)_3$ 为研究对象，通过联合采用晶体结构几何分析、键价和计算(BVEL)以及第一性原理分子动力学模拟(AIMD)等方法，确定了三方NASICON型化合物中的所有 Na^+ 离子输运通道以及通道中存在的瓶颈，发现相较于 $\text{Na}_2\text{-Na}_3\text{-Na}_3\text{-Na}_2$ 通道， Na^+ 离子更倾向于在 $\text{Na}_1\text{-Na}_3\text{-Na}_2\text{-Na}_3\text{-Na}_1$ 通道中进行传输，澄清了长期以来的争论；揭示了钠离子构型、协同跳跃率以及钠离子迁移能力的关系：当 Na^+ 离子浓度增加，使得体系内 Na^+ 离子占位发生重新分布，更多的 Na^+ 离子将占据到高能位 Na_2 上来，同时产生了更多的“ $\text{Na}_2 + \text{Na}_1 + \text{Va}(\text{Na}_2)$ ”局域 Na^+ 离子构型；体系中更多的“ $\text{Na}_2 + \text{Na}_1 + \text{Va}(\text{Na}_2)$ ”局域 Na^+ 离子构型促使更多的 Na^+ 离子发生能垒较低的协同运动，进而导致协同跳跃率增加，体系总激活能 E_a 降低，扩散系数增加。这为今后理性设计具有高离子电导率的三方NASICON型化合物提供了一条思路。



该研究成果近日以 “Relationships Between Na^+ Distribution, Concerted Migration, and Diffusion Properties in Rhombohedral NASICON” 为题发表在Advanced Energy Materials上(SCI TOP期刊, IF: 25.245)。该期刊是能源材料界最具影响力

的顶级期刊之一、对所录用工作的原创性和系统性有着极高的要求。上海大学为第一单位，材料科学与工程学院博士生邹喆义为第一作者，施思齐为通讯作者。博士生邹喆义已经以第一作者身份正式发表Chemical Reviews (IF: 52.758)和Advanced Energy Materials (IF: 25.245)各一篇、在投Chemistry of Materials (IF: 9.567)一篇；以共同一作身份(计算全部贡献)正式发表Advanced Materials (IF: 27.398)和Advanced Energy Materials各一篇；拥有一项软件著作权；获参会优秀口头报告奖2次。

相关工作得到了国家自然科学基金(51622207、11874254、U1630134)、上海大学高性能计算中心和上海智能计算系统工程研究中心项目(19DZ2252600)的支持。

文章下载链接:

“Relationships Between Na⁺ Distribution, Concerted Migration, and Diffusion Properties in Rhombohedral NASICON”
<https://doi.org/10.1002/aenm.202001486>

快速链接

钱校长百年诞辰	日程安排	党务公开	信息公开
行政办公系统	招聘信息	上大志愿者	文明校园创建
非学历招生	海外学习与实习	国际会议	校报电子版
实验教学示范中心	语言文字	校医院	



版权所有 © 上海大学 沪ICP备09014157 沪公网安备31009102000049号 地址: 上海市宝山区上大路99号 邮编: 200444 电话查询
技术支持: 上海大学信息化工作办公室 联系我们