

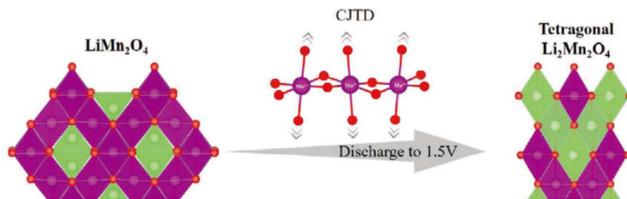


新材料学院在锂电池锰基尖晶石正极材料方面取得进展

最新

2020/09/14 信息来源：深圳研究生院
编辑：悠然 | 责编：白杨

正极材料通常被认为是决定锂离子电池性能的决定性因素。理想情况下，正极应在较宽的工作温度范围内提供高比容量、高工作电压、低成本、优越的安全性和长循环寿命，以满足要求诸如混合动力汽车、嵌入式混合动力汽车和纯电动汽车等应用的要求。在已有的正极材料中，锰基尖晶石型锂锰氧化物 LiMn_2O_4 (LMO) 由于其高电压 ($\text{Li}/\text{Li}^+ \approx 4.0\text{V}$) 和低成本而得到了广泛的应用。然而，循环性能差和相对较低的容量极大地限制了其作为锂电正极材料的广泛应用。究其原因，不良的循环稳定性直接与Jahn-Teller (JT) 畸变引起的结构转变、 Mn^{3+} 的歧化反应和Mn溶解直接相关。相对较低的LMO容量是因为放电过程中只有一个Li嵌入到 Mn_2O_4 尖晶石骨架中。理论上来说第二个锂离子嵌入到LMO中的八面体空位中 (3V以下) 形成过度嵌锂的 $\text{Li}_2\text{Mn}_2\text{O}_4$ 能够使容量增加一倍，但是这很难实现，因为它将导致 Mn^{4+} 还原为 Mn^{3+} 从而引起更严重的Jahn-Teller畸变，导致不可逆的相变 (立方相到四方相) 和循环过程中的颗粒裂纹。因此，为了获得LMO的双倍容量和优异的电化学性能，关键在于如何抑制在过度嵌锂过程中严重的Jahn-Teller畸变。



协同Jahn-Teller效应的抑制机制

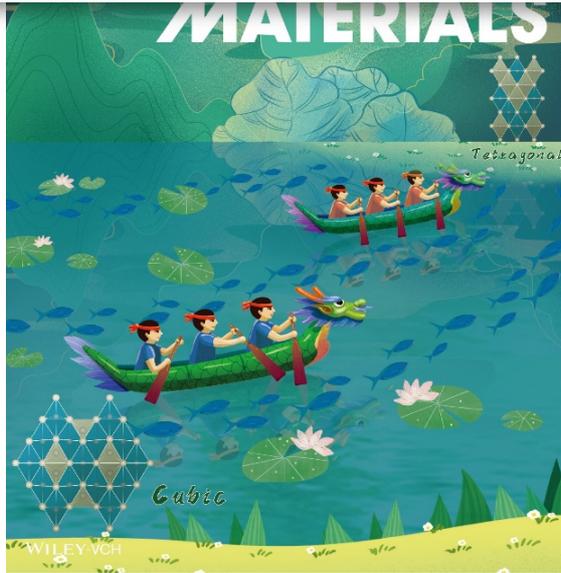
近日，在北京大学深圳研究生院潘锋教授和郑家新副教授共同指导下，研究生左昌坚和博士生胡宗祥等人通过结合实验和大量从头计算，证明了LMO中 Mn^{3+}O_6 八面体的单个Jahn-Teller畸变之间存在协同效应，被命名为协同Jahn-Teller畸变 (CJTD)，这个严重的畸变在过度嵌锂时，会导致Mn八面体朝着c方向严重拉长从而导致相变和裂纹，这是在低压下难以获得优良的电化学性能的原因所在。同时该工作进一步揭示了阳离子无序 (Mn位Li的替换和Li/Mn反位) 可以内在地抑制 Mn^{3+}O_6 八面体中的CJTD。因为，阳离子无序可以破坏 Mn^{3+} 排列的对称性，从而破坏单个JT中心畸变的相关性，并防止 $\text{Mn}^{3+}-\text{O}$ 键沿一个方向扭曲。由于抑制了CJTD，尖晶石型LMO中的原始八面体空位被激活，可以用作额外的 Li^+ 存储位点，从而在微米尺寸LMO中获得双倍容量并具有良好的可逆循环稳定性。

- 04 2021.02 肿瘤医院召开2021年度工作总结会
- 04 2021.02 北京大学召开2021年度工作总结会
- 04 2021.02 教育部体育卫生与艺术教育司司长来京调研
- 03 2021.02 北京大学与北京中医药大学合作共建
- 02 2021.02 家国情怀担当！2020年度总结表彰大会

专题



学习贯彻十九届五中全会



Advanced Energy Materials 期刊封面

该工作近日以“[Double the Capacity of Manganese Spinel for Lithium-Ion Storage by Suppression of Cooperative Jahn–Teller Distortion](#)”为题，作为封面文章 (front cover) 发表在能源材料领域知名期刊 (*Adv. Energy Mater.* 2020, 2000363, 影响因子25)上。

该工作论文第一作者为左昌坚和胡宗祥，潘锋和郑家新为共同通讯作者。该项工作得到国家材料基因工程重点研发计划、广东省重点实验室项目、深圳市科技创新委员会项目等大力支持。

转载本网文章请注明出处