

向伟：双位晶格修饰调节阳离子有序性提高富镍正极材料结构和循环稳定性

中文标题：双位晶格修饰调节阳离子有序性提高富镍正极材料结构和循环稳定性

英文标题：**Dual-site lattice modification regulated cationic ordering for Ni-rich cathode towards boosted structural integrity and cycle stability**

入藏号：WOS:000579752500044

中国科学院文献情报中心期刊分区（升级版）：环境科学与生态学 1 区/TOP

作者：徐春柳，向伟，吴振国，邱浪，明勇，杨文，岳鲁超，张军，钟本和，郭孝东，王公轲，杨二强

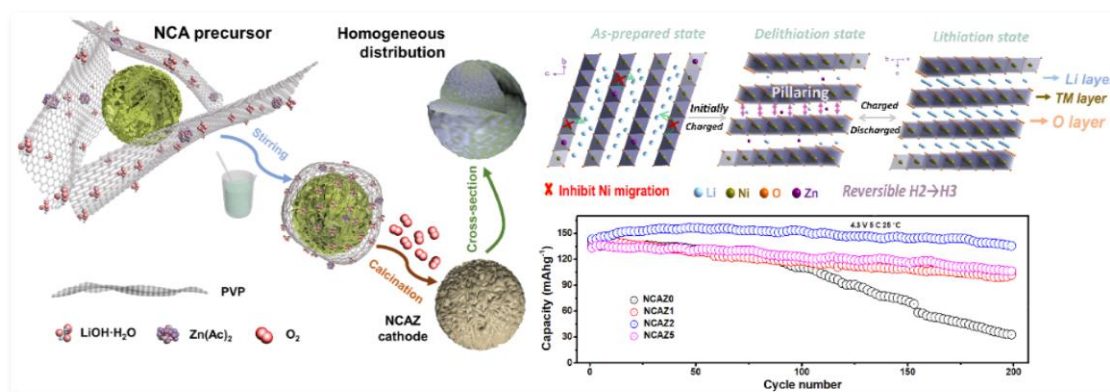
来源出版物：**Chemical Engineering Journal** 卷：403 文献号：126314

出版年：2021

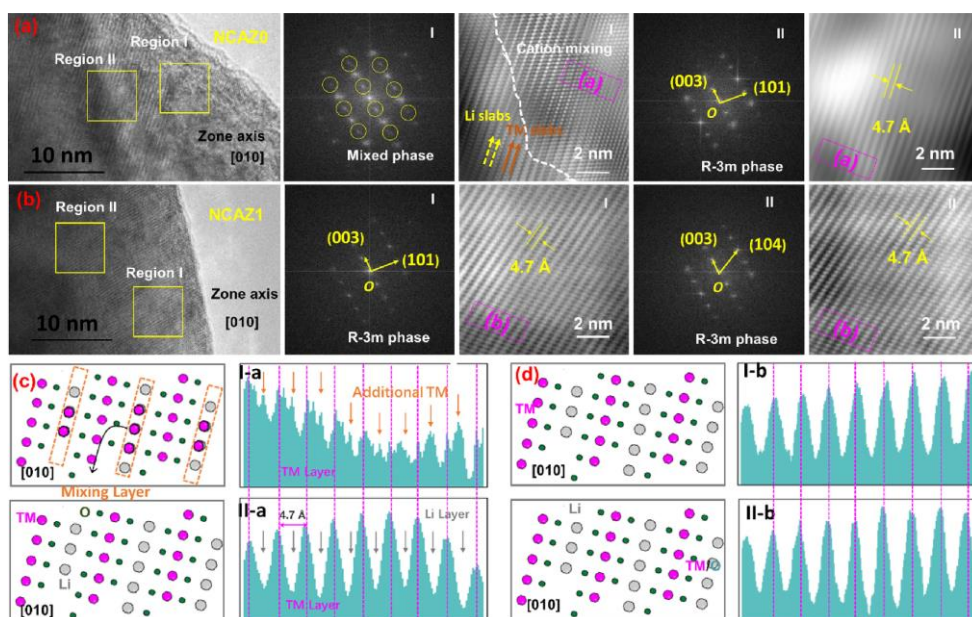
第一地址：成都理工大学

关键词：锂离子电池 富镍正极 双位掺杂 结构有序化

代表图：



图文摘要



不同材料两个随机选择区域的 HRTEM、FFT 和 IFFT 图像、以及相应的结构模型和晶面结构线强度图

摘要: 富镍正极材料在原始状态和脱嵌锂过程中的阳离子有序性是获得高放电容量和优循环性能的关键因素。然而，合成低阳离子无序的富镍正极并在循环过程保持良好有序层状结构仍然是较大的挑战。通过在过渡金属(TM)和锂位同步双位掺杂 Zn^{2+} ，本文合成了阳离子有序性调控的富镍正极，该材料在制备状态具有有序的层状结构，在循环过程具有受抑制的阳离子混排。在 TM 位上掺杂适量的 Zn^{2+} 离子减少 Ni^{2+} 含量，从而促进了制备材料的层状结构有序性，保证高容量。同时，一部分 Zn^{2+} 离子取代了 Li^+ 离子作为支柱离子，抑制 TM 离子从 TM 层向 Li 层迁移，维持锂脱嵌过程中晶体结构的完整性。第一原理计算表明 Zn^{2+} 在富镍正极的双位掺杂在热力学上是有利的，且改性正极在电化学反应过程中具有更好的结构和相稳定性。在调控阳离子有序性下、Zn 改性的正极具有较高的容量和稳定的循环性，在 5C 循环 200 周具有 86% 的显著提高的容量保持率和优异的高温性能。

文章链接地址：<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1385894720324426>