

[学院动态]我校刘金平教授团队在 Nature 子刊发表重要研究成果

近日，化学化工与生命科学学院刘金平教授团队在钠离子电池研究方面取得重要进展，研究成果以“Understanding pillar chemistry in potassium-containing polyanion materials for long-lasting sodium-ion batteries”为题，发表在 Nature Communications 上。我校为第一署名单位，第一作者是我校博士生刘文焱、崔文俊和易成军，刘金平教授和郑州大学王卓副教授为论文的通讯作者，论文的重要合作者还包括我校桑夏晗研究员等。

钠离子电池资源丰富、成本低廉，在大规模储能和电动/混合电动交通领域展现出巨大应用潜力，特别是在快充、宽温域工作方面，比锂离子电池有更大优势。典型的钠电硬碳负极容量高，但存在析钠等无法规避的问题，严重影响电池安全性和寿命等。作为高安全、低成本的负极体系，含钾聚阴离子化合物具有大的离子传输通道且稳定的开放框架结构，有望用于钠离子存储；然而，其储钠行为很少被研究，且其机制尚不清楚。

值得注意的是，含钾化合物储钠的工作机制比含钠化合物储钠更为复杂。除了阐明结构和相变外，明确 Na^+ 作为电荷载体是否会通过离子交换取代 K^+ 也十分关键。对于该系列材料，长期以来，是否有 K^+/Na^+ 离子交换、如何交换、交换程度如何？极具争议。详细阐明含钾聚阴离子材料的工作机制对于理解长循环稳定性和进一步指导材料设计至关重要。

为此，刘金平教授团队设计了无干扰 KTiOPO_4 薄膜电极作为模型，结合原位/工况谱学、球差电镜和密度泛函理论计算，全面揭示了 Na^+ 存储机制。首次实验与理论上同时证明了不完全 K^+/Na^+ 交换、0.15 个残留 K^+ 对晶格隧道结构的柱撑/稳定效应、材料嵌脱 Na^+ 的“近零应变”行为（仅 3.9%）；实现了 10000 余次长循环稳定性和优异的快充安全（5C 倍率下无析钠）。同时，所制备的粉末电极表现出相当的容量，并能在商业级面容量 2.47 mAh cm^{-2} 下高效工作。所组装的准固态钠离子软包电池在极端滥用条件下仍具有高安全性和长循环稳

定性。

本工作提出了“柱撑化学”概念，丰富了常规的插层化学机制，不仅量化了离子交换程度，澄清了储钠机理，发掘了低成本、长循环、高安全钠离子负极材料，而且所提出的“柱撑化学”思路有望启发更多含大异质离子的聚阴离子电极材料的设计。

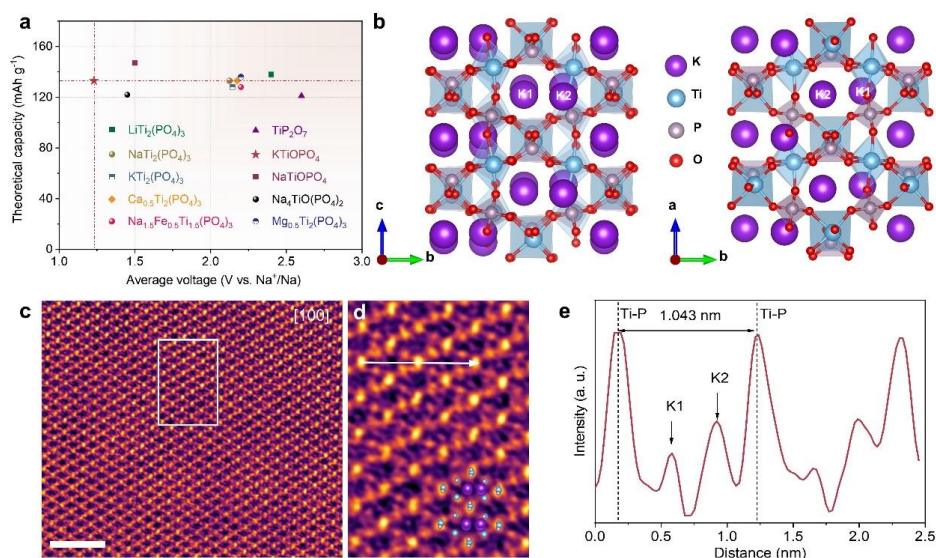


图 1 KTiOPO₄ 负极材料的优势及其结构表征分

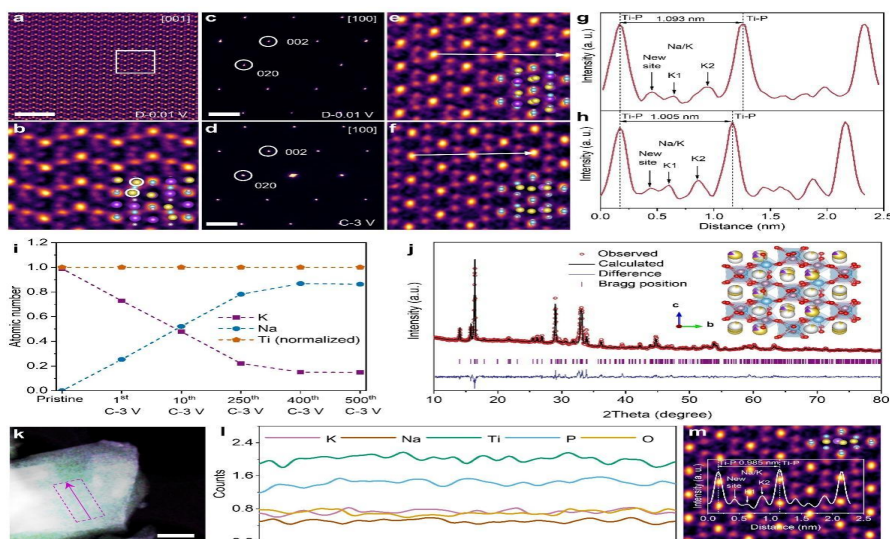


图 2 KTiOPO₄ 负极循环过程中的原子结构演化和 Na⁺/K⁺ 离子交换机理分析

论文链接: <https://www.nature.com/articles/s41467-024-54317-8>

供稿人: 刘金平 审核人: 李俊升