

补充材料

Al 含量对 $\text{Li}_{1+x}\text{Al}_x\text{Ti}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$ 固态电解质表面稳定性、电子结构及 Li 离子输运性质的影响*李梅 严怡 蓝雯欣 孙宝珍[†] 吴木生 徐波 欧阳楚英

(江西师范大学物理与通信电子学院, 计算材料物理实验室, 南昌 330022)

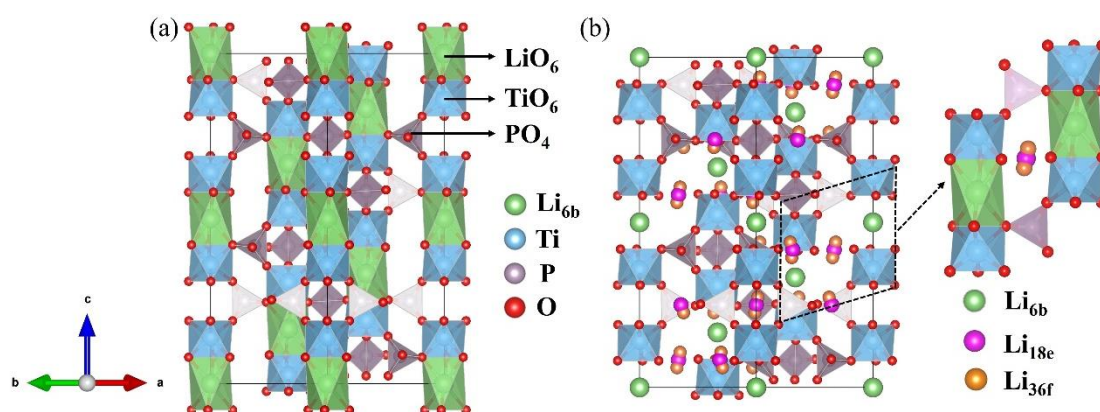


图 S1 (a) LTP 晶体结构图; (b) LTP 晶体结构中 Li 的 Wyckoff 位点

Fig. S1. (a) LTP crystal structure; (b) the Wyckoff sites of Li in the LTP crystal structure.

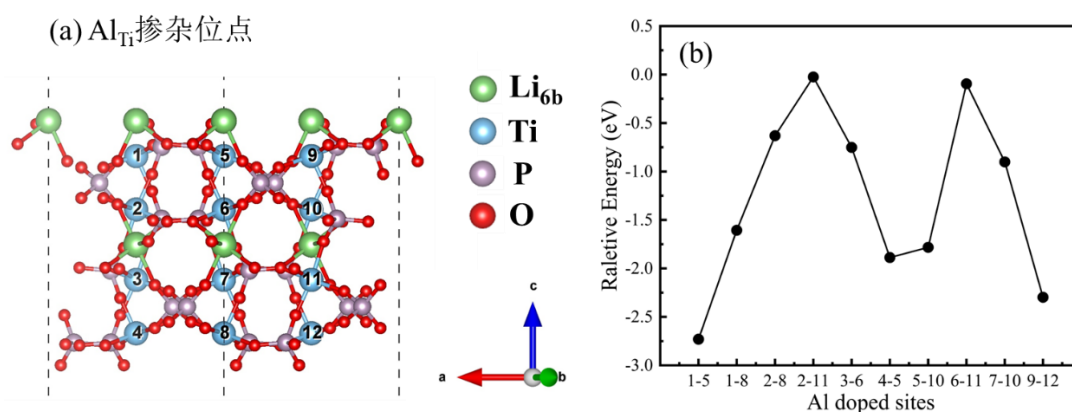


图 S2 (a) Al 可取代的 Ti 原子的位点及(b) 具有不同 Al 掺杂位点的表面的相对能量

Fig. S2. (a) The doped sites of Al, and (b) the relative energy of different Al doped sites.

* 国家自然科学基金 (批准号: 12364026, 12174162, 12464029) 和江西省自然科学基金 (批准号: 20232BAB201038, 20232BAB201030) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: bzsun@jxnu.edu.cn