

中国材料大会 2025

暨新材料科研仪器与设备展

7 月 5-8 日, 2025

福建 厦门

A01-能源转换与存储材料
A01-Energy Conversion and Storage
Materials

主办单位

中国材料研究学会

会议网址: <https://cmc2025.scimeeting.cn>



A01. 能源转换与存储材料

分会主席：陈人杰、郭正晓、黄学杰、彭栋梁、潘洪革、齐志刚、武英、贾礼超

A01-01

富锂锰基正极材料的性能调控与可控制备

彭栋梁摘要内容待定

A01-02

长寿命钠离子储能电池层状正极材料

张凯*

南开大学

研制长寿命钠离子储能电池对于我国能源结构转型和新型生产力发展具有重要意义。层状氧化物具有较高的输出容量和较快的离子扩散速率，因而被视为钠离子电池正极材料的理想选择之一。层状氧化物由钠层和过渡金属层交替堆叠而成，钠离子可在相邻过渡金属层之间可逆脱嵌。目前，层状氧化物正极材料主要面临的关键科学问题是脱嵌钠过程中体相与表界面的结构失稳机制及其稳定化策略。针对体相相变、表面失活与界面失效等问题，选取高比容量、低瓦时成本的层状锰基氧化物作为研究对象，提出体相双位点协同调控策略，解决初期循环中的不可逆相变问题；构建表面梯度脱钠结构，解决中长期循环过程中的活性元素流失问题；发展界面有序去溶剂化机制，解决超长期循环中的界面副反应问题，最终实现高容量与长寿命的兼得，为长寿命钠离子电池研究开辟了新思路。

A01-03

金属基负极在低温快响锂离子电池中的应用基础

胡仁宗*

华南理工大学

随着应用领域的不断扩展与低温服役需求的剧增，现有锂离子电池体系面临低温性能差、安全性不足等突出问题。这与石墨负极的比容量小、嵌锂电位低、易析锂、电解液低温电导率低的本质特性有关。Sn、Si 等金属基负极具有高比容量、适中嵌锂电位，是新一代高比能、高安全锂离子电池的重要候选负极材料，备受研究人员和产业界关注。

Sn、Si 等金属基负极是基于合金化或转化反应方式储锂，这与嵌入式储锂的石墨负极明显不同。其一，室温下，金属基负极储锂过程的相变复杂、体积与界面变化大、材料结构转变的可逆性与稳定性差，导致库仑效率低、电压滞后大、容量衰减快；其二，金属基材料晶格间隙小，缺乏连续、稳定的 Li^+ 传输通道，导致电池充放电倍率性能差。这些问题使它们的低温应用面临更大的挑战。因此，要实现这类高量金属基负极在低温高效电池中的应用，需解决以下关键难题：其一，明确金属基负极材料在低温下的体相储锂机制，提升低温容量；其二，弄清金属基负极低温充放电能量效率低的主控因素，提出有效的改善策略；其三，在上述理论指导下，发展行之有效的金属基负极多级结构与材料制备技术。

为了解决上述科学难题，近 5 年来，申请人重点聚焦兼具合金化与转化反应特性的 Sn、Si 基负极体系。研究思路如图 1 所示，自研低温原位电化学反应池，揭示了 Sn 基负极低温嵌/脱锂过程的相变特征、界面膜的温度敏感性，厘清了电极转化反应过程可逆性差、电压滞后大的微观机制；提出了快速脱锂诱发灰锡转变、锂盐诱导温度敏感性低界面膜生长、金属相诱导形成非晶态快离子传导界面等材料设计策略，创制了低温嵌锂动力学好、可逆容量大、充放电效率高的 Sn、Si 基多相复合负极材料与适配固/液态电解质；开发等离子球磨技术与装置，实现了材料的高效宏量制备，推动了 Sn、Si 基负极材料的应用。

A01-04

二维材料的表界面调控及其在能源催化器件中的应用姜琳^{1,*}, 吴仁兵², 王连卫³, Paul K. Chu⁴¹ 上海大学微电子学院, 上海市 201800, 中国² 复旦大学材料学院, 上海市 200438, 中国³ 华东师范大学物理与电子科学学院, 东川路 800 号, 中国上海, 200241⁴ Department of Physics, City University of Hong Kong, Tat Chee Avenue, Kowloon, Hong Kong, China

*Email: linjiang@shu.edu.cn

关键词: 单层石墨烯; 二硫化钼; 表界面调控; ORR; HER

二维材料具有独特的原子结构和丰富的表界面化学, 在能源转换和电催化领域研究广泛。尤其在活性位点研究方面, 边缘和表界面调控都是激活二维材料电催化性能的有效策略。作为非金属氧气还原反应 (ORR) 电催化剂, 氮掺杂碳材料的活性位点研究始终难以定论, 这与碳材料的复杂组成和结构无不相关。利用单原子层石墨烯作为碳基催化剂模型, 通过在石墨烯基面系统引入氮、氧掺杂原子及碳缺陷, 研究不同掺杂和缺陷对石墨烯基面 ORR 活性位点的激活作用。结果发现, 单纯氮掺杂难以提高石墨烯的催化活性; 在碳缺陷和低比例氧掺杂共存的情况下, 氮掺杂石墨烯 ORR 活性显著提升; 尤其基面内含氧碳缺陷对激活氮掺杂石墨烯催化活性具有关键作用。同时, MoS₂ 作为电解水制氢 (HER) 的优良催化剂, 仍然存在基面硫原子难激活的挑战。采用杂原子掺杂和边缘结构设计, 通过调节价态轨道中的空态来激活相邻基面硫位点, 从而降低氢吸附能垒, 有效提高 HER 催化活性, 为二维材料在能源催化器件中的机理和应用研究提供了重要参考^[1-9]。

A01-05

Rational Design for Rechargeable Batteries

李鸽摘要待定

A01-06

层状界面调控锂负极沉积行为的研究

罗冲*

北京理工大学

锂金属因其超高理论比容量和极低的电化学电位, 被认为是构建高比能电池的理想负极材料。然而, 锂与电解质间的副反应以及锂枝晶的不可控生长, 严重限制了锂金属电池的循环稳定性。在负极/电解质界面自发形成的固态电解质界面膜 (SEI) 在抑制电解质持续分解和延长电池寿命方面起到关键作用。然而, 天然 SEI 普遍存在锂离子脱溶动力学缓慢、锂盐解离效率低和机械稳定性差等问题, 导致界面浓度极化加剧, 进而引发不均匀锂沉积和枝晶生长, 加速活性锂的损耗。

针对上述问题, 本研究提出并构建了一种新型层状人工界面, 在锂金属表面实现自组装形成具有定向层间通道和限域强化介电环境的结构。该层状界面具备多重调控机制: 其可调节的层间距可对溶剂分子进行选择筛分, 促进锂离子的高效去溶剂化; 限域诱导的聚合物构象转变增强了局部介电常数, 加快锂盐解离; 水平方向的纳米通道则提供了强化的传质路径, 有助于实现锂的快速均匀沉积。该创新界面结构不仅展现出优异的机械稳定性, 还显著提升了电池的循环性能与沉积均匀性。本研究为实现高比能锂金属电池的稳定运行提供了具有前景的界面设计策略。

A01-07

基于等离子体超细晶的固态电池界面构筑及其离子与电子传输机制

孙世翼、延卫*、丁书江

西安交通大学

随着近年来无人机和机器人等新兴产业快速发展, 锂电池的性能已成为我国实现产业升级的关键支撑, 亦是当前国防建设的重要内容。凭借电解液替代和电极堆叠带来的能量密度提升, 固态电池被认为是下一代具有革命性的高安全高比能电池技术, 特别是省去传统负极材料和过量锂的无负极 (Anode-less) 固态

电池结构, 可将电池能量密度推升至 1300 Wh L^{-1} 、 600 Wh kg^{-1} 以上, 大幅提高无人机和机器人的续航能力。然而, 无负极固态电池充电时, 电极/固态电解质界面出现离子与电子传输失配, 无法实现锂离子均匀沉积, 易产生锂枝晶和“死锂”, 造成活性锂离子损失, 致使电池容量和寿命快速衰退。本团队以电池界面问题中重要且极少研究的“原位/异位改性方式”、“界面原子比例”对离子与电子传输行为的影响为切入点展开研究。通过合理使用 $\text{H}_2/\text{Ar}/\text{SF}_6$ 整合等离子体, 在铜箔表面分别以原位/异位方式生长 $\text{Cu}_x\text{S}/\text{CuF}_x$ 超细晶作为锂成核位点。通过调控界面原子比例对界面电子供给速率与离子迁移速率进行同步调整, 即在防止电子聚集、隧穿的同时促进锂离子高通量迁移扩散, 拟实现对锂的沉积方式和沉积形貌进行优化, 获得高性能、长寿命的固态电池。通过解析 $\text{Cu}_x\text{S}/\text{CuF}_x$ 的原位/异位生长机制和界面调控功能差异, 以及对电池电化学性能的影响规律, 为高性能电池材料、电极界面的设计提供新思路。

A01-08

金属硫电池硫电极关键材料设计及硫催化转化机制研究

张红*、鹿可

吉林大学

随着国家倡导加快实现双碳目标, 低碳化发展已成为能源行业势在必行的发展方向。储能技术作为未来零碳能源系统的核心, 是实现双碳目标的关键。金属钠硫基储能电池是重点发展方向之一, 将其作为新能源汽车和城市公共交通的动力电源可实现真正的零排放。然而, 基于溶解沉积机制的固态金属硫电池, 硫电极迟缓的反应动力学以及非完全转化, 致使电池体系放电容量低且循环性能差。为解决这一问题, 我们从硫正极结构设计出发, 开发了一种富含双连续催化位点 (N, P 杂原子耦合 PtNi 纳米晶) 的功能复合硫正极, 采用限域连续催化机制实现多硫化物催化转化及准固态硫可逆转化。N, P 杂原子有利于催化长链多硫化物还原, PtNi 纳米晶在放电过程中可以完全实现 Na_2S_4 到 Na_2S 的动力学转化。PtNi 纳米晶耦合 N, P 共掺杂的碳基体上沉积的 Na_2S 具有很强的电化学反应活性, 在电池充电过程中可以很容易地生成 S_8 , 而不会钝化活性物质, 从而真正实现了限域连续催化准固态硫转化机制。组装的全固态软包 Na-S 电池在 60°C 下稳定循环, 具有 876 mAh gS^{-1} 的可观的比容量和 608 Wh kg^{-1} 的高能量密度。

A01-09

Fast-Charging Anode-Free Sodium Batteries

liangliang li^{*1}, haocheng yuan²

1. Lingnan University 2. Tsinghua University

Anode-free sodium batteries (AFSBs) are attracting considerable research attention owing to their high theoretical energy density, low cost, and inherent safety advantages. However, the practical application of current AFSBs is hindered by challenges such as poor cycling stability and inadequate rate performance. These limitations primarily stem from the insufficient efficiency of sodium (Na) plating and stripping processes on the current collectors. Consequently, enhancing the electrochemical performance of AFSBs critically depends on optimizing these Na plating and stripping behaviors. Our investigation reveals that the mechanical properties of separators play a pivotal role in regulating Na deposition. Specifically, separators exhibiting in-plane isotropic mechanical properties promote the formation of flat, dense Na metal deposits on the current collector, thereby facilitating efficient Na plating and stripping. Conversely, anisotropic mechanical properties in separators tend to induce Na dendrite formation and subsequent penetration, leading to internal short circuits. By employing optimally designed separators, we successfully demonstrated AFSBs with a high active material mass loading (13.5 mg/cm^2) achieving stable cycling performance at a demanding current rate of 4 C. Beyond separator engineering, our study also explored the influence of electrolyte solvation structure on Na plating dynamics. We determined that modifications to the solvation structure directly alter the nucleation mode of Na metal on current collectors, which is crucial for achieving uniform Na deposition. Through careful optimization of the solvation structure, the critical current density for AFSBs was significantly enhanced, translating to improved fast-charging capabilities. Collectively, this research provides valuable strategic guidance for tailoring Na plating and stripping behaviors, paving the way for the development of high-rate and long-cycle-life AFSBs.

A01-10

固态锂电池的聚合物电解质设计

汤育欣摘要待定

A01-11

陶泽天摘要待定

A01-12

酸化预处理泡沫镍上 $\text{Ni}_3\text{S}_2/\text{Mo}_3\text{S}_4/\text{MnS}$ 复合材料的原位合成及电容性能

李明伟*

辽宁工程技术大学

以聚乙烯吡咯烷酮（PVP）作为生长以调节剂与表面活性剂，分别在两种方法预处理的泡沫镍上合成了 $\text{Ni}_3\text{S}_2/\text{Mo}_3\text{S}_4/\text{MnS}$ 硫化物纳米复合材料。研究表明泡沫镍是否酸化以及 PVP 添加量均对电极材料形貌及电容性能有显著影响。其中电容性能最佳的 PVP 添加量为 0.2 克的酸化预处理泡沫镍上合成 $\text{Ni}_3\text{S}_2/\text{Mo}_3\text{S}_4/\text{MnS}$ 硫化物纳米复合材料在 1 A g^{-1} 电流密度下的比电容为 3184 F g^{-1} ，在 10 A g^{-1} 电流密度下经过 5000 次恒流充放电后比电容仍然保留到初始值的 84%。而常规清洗泡沫镍上合成的 $\text{Ni}_3\text{S}_2/\text{Mo}_3\text{S}_4/\text{MnS}$ 复合材料，在 1 A g^{-1} 电流密度下的比电容仅为 2188 F g^{-1} 。以酸化处理泡沫镍上制备的 $\text{Ni}_3\text{S}_2/\text{Mo}_3\text{S}_4/\text{MnS}$ （正极）和活性炭（负极）组装成的电池-超级电容器混合（BSH）装置在 800 W kg^{-1} 的功率密度下具有 84.3 W h kg^{-1} 的显著能量密度，在 10 A g^{-1} 电流密度下 5000 次循环之后的电容保持率达到 95%。

A01-13

MXene 微结构精准调控及增强锂硫电池的界面反应机制研究

张新鲁*

郑州轻工业大学

通过精准调控金属单原子的配位微环境以加速硫的转化反应动力学、降低反应能垒和抑制锂枝晶生长，对提升锂硫电池的电化学性能具有重要意义。本研究中，利用无氟室温有机熔盐原位蚀刻与自还原策略原位蚀刻钌基 MXene，通过操纵结构中原子的重排，成功制备出 MXene 基单原子纳米材料。X 射线吸收近边结构和扩展 X 射线吸收精细结构发现，结构中 Fe 单原子具有八面体的配位结构。密度泛函理论揭示其轴向的 N 会引起 Fe 3d 轨道的分裂，从而降低 d_{z^2} 能级，其不仅可以增强吸附能，抑制穿梭效应和降低活化能，还可以提高多硫化物的氧化还原反应动力学；并且同时可以提高亲锂性以减小了极化和抑制了锂枝晶生长。因此，该 MXene 基单原子材料可用于修饰锂硫电池的隔膜可显著提高电化学性能，并具有优异的循环稳定性。本研究为深入理解 MXene 基单原子催化材料的电子微环境以优化电催化活性提供了全新的视角。

A01-14

固态电池界面研究

杨文*

深圳理工大学材料科学与能源工程学院

固态锂电池采用固态电解质取代传统液态电解液，具有安全系数高、能量密度高、工作温度范围宽等多方面优势。然而全固态锂电池在实际应用中还面临很多挑战，比如固态电解质的化学及电化学稳定性差、电池内部的界面相容性差，以及电极活性材料在循环过程中明显的体积膨胀或收缩导致材料粉碎、界面失效等。

针对以上问题，我们 1) 建立高离子电导电解质制备新方法，提出胶体电解质构筑无机物主导正极反应界面层，抑制多晶氧化物正极二次颗粒晶间裂纹的新机制，实现高倍率低温锂电池的制备；2) 揭示高压钴酸锂在全固态电池中电化学-机械失效机制的原子起源，建立纳米氧化物包覆高压正极的新策略，实现 4.5 V 硫化物固态电池高倍率和长循环；3) 建立硫化物固态电池正极层结构的新策略，通过引入聚合物多功能软缓冲层确保高镍氧化物正极层的结构完整性和优异的离子导电性，减少高镍正极材料体积膨胀所引发的正极层内部空穴和裂纹的形成，降低正极界面的应力避免正极颗粒破裂，实现高载量高镍正极材料在全固态锂电池长循环；4) 建立全固态锂硫电池正极高效转化新策略，提出新型的活性氧化还原媒介体改

善硫正极反应动力学, 缓解全固态锂硫电池正极电化学转化的过程巨大的体积变化带来的电化学机械力学耦合衰变; 5) 设计锂金属兼容的电解质优化负极界面相, 消除锂金属或硅负极与硫化物固态电解质的界面空穴和裂纹, 构筑高比能固态锂金属电池。

A01-15

固态电解质及其界面调控助力高稳定性固态锂金属电池

徐英*

兰州大学

基于对高能量密度和高安全性电池的需求, 固态电解质与金属锂的结合受到了广泛的关注。其中金属锂具有高达 3860 mA h g^{-1} 的理论比容量, 而固态电解质, 尤其是 LLZO, 具有不可燃性、高机械强度、较宽的电化学稳定窗口且与锂化学/电化学界面稳定, 因此为电池的高比能和高安全性提供了保障。然而 LLZO 基固态锂金属电池的实际应用还受限于锂枝晶对 LLZO 的刺穿和界面的点对点式接触。因此, 我们设计了一种具有节点-纤维结构的聚四氟乙烯膜 (PTFE) 作为 LLZO 与锂负极的界面层, 利用其高柔韧性促进 LLZO 与锂的界面对接触, 同时利用其特殊结构赋予的高能量耗散能力来缓冲锂沉积产生的高局部内应力, 由此防止 LLZO 的机械破损, 抑制锂枝晶的生长和贯穿。此外, 我们还开发了具有离子电导、自修复特性的聚甲基丙烯酸甲酯基中间层, 利用其柔韧性填充 LLZO 与锂的界面, 同时利用其优异的自修复特性在界面处缓解枝晶生长造成的影响, 由此提高 LLZO 基固态锂金属电池的电化学性能。为了进一步提高固态锂电池性能, 我们还利用 CaF_2 对锂盐的解离作用与和醚氧键的相互作用, 将其与 PEO 混合形成复合电解质, 由此提高自由锂离子浓度、削弱 PEO 对锂离子的络合作用, 进而有效提高电解质的离子电导率。此外 CaF_2 还与锂反应形成富含 LiF 的 SEI, 抑制锂枝晶的生长, 由此进一步提高固态锂电池的电化学性能。

A01-16

晶泰公司待定

A01-17

层状双氢氧化物设计及电解水制氢性能研究

吴仁兵

复旦大学智能材料与未来能源创新学院, 上海, 200438

E-mail: rbwu@fudan.edu.cn

发展氢能对于实现能源转型和应对气候变化至关重要。电化学水分解制氢是绿色氢气制取的主要方式之一, 但受限于阴极析氢反应、阳极析氧反应缓慢的动力学和活性金属原子的溶出, 其催化性能仍有待提高。尽管贵金属催化剂在析氢和析氧反应中展现了优异的催化活性和稳定性, 但是资源稀缺限制了其规模化使用。基于此, 本报告通过湿化学方法设计了系列层状过渡金属双氢氧化物催化剂, 通过引入碱土金属阳离子固溶化、局域结构高熵化精细调控活性中心的电子结构和提高热力学稳定性, 显著提升了催化剂析氢反应/析氧反应的活性和稳定性; 在此基础上探索了高熵层状过渡金属双氢氧化物催化剂在阴离子交换膜电解水器件中的应用前景。

A01-18

Y 替代对 AB_2 型 Nd-Mg-Ni 基合金循环稳定性的影响

李媛*、吴贯九、韩树民

燕山大学

AB_2 型 Nd-Mg-Ni 基合金具有 C15 型 Laves 相立方结构, 相比于 Ti/Zr 系 Laves 相合金, 有更加优异的活化性能, 相比于 AB_5 和 AB_{3-4} 型 RE-Mg-Ni 基超晶格系列合金, 它具有更高的理论储氢容量。然而在吸氢过程中, AB_2 型 Nd-Mg-Ni 基合金极易发生氢致非晶化, 导致 Laves 结构发生分解。降低原子半径比是抑制氢致非晶化的有效措施。

本文采用粉末烧结法制备了 $\text{Nd}_{0.6-y}\text{YyMg}_{0.4}\text{Ni}_2$ ($y = 0, 0.10, 0.15, 0.20, 0.25, 0.30$) 储氢合金。XRD 结果表明合金具有 MgCu_4Sn 相和微量的 Y_2O_3 相。PCT 测试表明, 随着 Y 含量增加, 合金的平台压逐渐提高, 储氢容量呈现先增大后减小的趋势。在 348 K 和 5 MPa 氢压下对各合金进行了 50 次吸氢循环测试,

其中 $y = 0$ 合金在初次吸氢后发生了严重的氢致非晶化，导致储氢容量衰减严重。少量 Y 元素替代 Nd 可以有效抑制循环前期的氢致非晶化，但随着 Y 含量增加，合金的循环稳定性呈现逐渐衰减的趋势，这可能归因于富 Y 合金在循环过程中积累了较大的微观应

A01-19

碱土金属二次电池正极材料设计

李真西*

中国科学院青岛生物能源与过程研究所

碱土金属（镁、钙）二次电池具有高理论能量密度且无需依赖锂（Li）、钴等关键原材料，是一种极具应用前景的新型电化学储能体系。镁/钙金属二次电池的研究始于 20 世纪 90 年代，恰逢锂离子电池商业化初期。然而，碱土金属负极在传统电解液中会迅速钝化，这一问题严重制约了早期的研究。2000 年，Aurbach 团队取得里程碑式突破，通过采用有机卤铝酸盐电解液和 Chevrel 相 Mo_6S_8 正极，成功构建了镁二次电池原型。这一突破性进展引发了学界广泛关注，并有力推动了近年来高性能镁/钙离子电解液的开发。

尽管在电解液研究方面取得显著进展，镁/钙二次电池技术仍面临正极侧的严峻挑战。其中的核心问题在于 Mg^{2+} 和 Ca^{2+} 离子具有高电荷密度和二价特性，受到正极宿主材料较强的库仑牵制作用，导致离子扩散势垒显著升高。研究表明，在几种典型的嵌入型正极材料中， Mg^{2+} 和 Ca^{2+} 的扩散能垒比 Li^+ 高 3-4 倍。此外，这种强库仑相互作用还会引发热力学反应路径的转变：例如具有隧道结构的 $\alpha\text{-MnO}_2$ 与 Li^+ 发生可逆嵌入反应，而与 Mg^{2+} 反应时却倾向于不可逆的转化反应。上述热力学的双重挑战严重阻碍了镁/钙离子正极材料的开发。

本报告将首先阐述二价 $\text{Mg}^{2+}/\text{Ca}^{2+}$ 离子在嵌脱过程中面临的热力学挑战，随后重点探讨正极材料的设计策略：包括基于电子结构调控的价电子离域策略，以实现阴、阳离子协同参与的氧化还原反应；以及通过溶剂分子或单价阳离子的协同嵌入降低二价离子的扩散势垒等。最后，将汇报我们在钙金属电池高压氧化物正极研发方面的最新研究进展。

A01-20

钒基低温钠电池

芮先宏*

广东工业大学材料与能源学院，广州 510006

高能量密度、高功率密度、高安全性、长寿命和宽服役温度二次电池是储能行业追求的共同目标。现今，太空探索、极地科考等领域的角逐日益激烈，为保障其能源的持续供应，发展环境适应性强、低温性能优异、成本低廉的储能电池尤为重要。钠电池因钠资源储量丰富，且钠离子斯托克斯半径小，离子电导率更高，是一种很有发展前景的新型低温电池体系。然而，在低温条件下实际运行时，钠电池常存在容量衰减严重、循环寿命短、充放电困难等问题，严重制约其应用。针对上述难题，利用钒基材料多价态和化学结构丰富可调的优势，通过电极材料结构设计，导电网络优化，界面层构筑、电解液结构调控等策略，实现了钒基低温钠电池快速稳定循环。本报告主要介绍近年来课题组在钒基低温钠电池方面的研究进展。

A01-21

锂硫电池单原子催化剂的理论设计与研究：杂原子驱动的边缘型 FeN₄ 活性位点电荷重排

朱海燕*、吴愁

西北大学

锂硫(Li-S)电池被认为是最有前途的下一代高能量密度存储系统。然而，它们仍然面临着诸如多硫化物(LiPSs)的穿梭效应和硫氧化还原动力学缓慢等挑战。本文利用密度泛函理论研究了杂原子(P 和 S)掺杂边缘型铁单原子催化材料($\text{FeN}_4\text{S}_2/\text{P}_2\text{-DG}$)在 Li-S 电池中硫还原反应(SRR)和硫氧化反应(SOR)中的应用。理论分析表明，与平面型 Fe-N₄ 片段相比，S 或 P 掺杂边缘型 Fe-N₄ 结构片段周围的电荷密度积累更高。此外，P 或 S 的掺杂降低了 Fe 3d 轨道的电子填充状态，导致反键轨道上的电子占位减少，有利于 d-p 轨道杂化的形成，增强了 $\text{FeN}_4\text{P}_2/\text{S}_2\text{-DG}$ 对 S₈/LiPSs 的锚定强度。其中， $\text{FeN}_4\text{P}_{1,2}\text{-DG}$ 对 SRRs 表现出最低的自由能势垒(0.56 eV)，且充电过程中 Li₂S 的离解能势垒从 1.85 eV(平面 FeN₄-G)降低到 0.96 eV，表现出优异的催化性能。此外，该理论研究为石墨烯负载的单原子催化剂材料作为 Li-S 电池锚定材料的应用提供了进一

步的见解。

A01-22

高功率钠离子电容器

魏湫龙摘要待定

A01-23

BaCo_{0.4}Fe_{0.4}Zr_{0.1}Y_{0.1}O_{3-δ} 阴极材料氧还原反应活性的调控研究

奚修安摘要待定

A01-24

Topological chiral materials for high performance oxygen electrocatalysis

Xia Wang*

Max Planck Institute for Chemical Physics of Solids

The oxygen evolution reaction (OER) and oxygen reduction reaction (ORR) are central to the efficiency of key sustainable energy technologies, including water splitting and fuel cells. However, their performance is often limited by inherently sluggish kinetics, due to the spin-dependent nature of the electron transfer processes. Efforts to control spin through chirality and magnetization have shown potential in enhancing performance of the oxygen electrocatalysis. The direct generation of spin-polarized electrons at catalytic surfaces remains elusive, and the underlying mechanisms are still controversial due to the lack of intrinsically chiral catalysts. Herein, we explore the electrocatalytic potential of topological chiral semimetals, whose spin-polarized Fermi surfaces promote spin-dependent electron transfer. By harnessing both structural chirality and strong spin-orbit coupling (SOC), we achieve efficient spin polarization at the catalyst surface, thus breaking the conventional volcano-plot limitations. A comparative study of Rh-based chiral semimetals reveals a clear correlation between SOC strength and OER performance: RhSi < RhSn < RhBiS. Notably, chiral RhBiS single crystals outperform traditional achiral catalysts such as RhTe₂, RhTe, and RuO₂ in alkaline media, with a specific OER activity up to two orders of magnitude higher than RuO₂. Our findings highlight the critical interplay between chirality and SOC in enabling spin-dependent electrocatalysis and provide a conceptual framework for the rational design of next-generation chiral catalysts with topological electronic structures.

A01-25

全固态电池中锂/镁基氢化物的限域调控与性能优化

高攀宇，鞠顺隆，夏广林*，余学斌*

复旦大学智能材料与未来能源创新学院

全固态锂离子电池因具备高能量密度与良好安全性，成为新一代储能系统研究热点。MgH₂ 负极具有容量高、资源丰富、成本低等优势，LiBH₄ 电解质则具备良好热稳定性与高理论离子电导率，均展现出广阔应用前景。然而，Mg 基氢化物在循环中易出现容量衰减，LiBH₄ 室温电导率低且循环稳定性差。针对上述问题，本研究原位构建非活性 Nd₂H₅ 框架对 MgH₂ 和 Mg₂NiH₄ 进行限域调控，有效缓解体积膨胀，提升锂离子与电子传输速率，增强负极可逆储锂性能。同时，通过 LiNH₂BH₃ 脱氢反应原位形成[LiNBH]_n 骨架，实现对 LiBH₄ 的空间限域，揭示其对导电性能的调控机制，并明确 Li₃N 与 LiB 界面层在抑制锂枝晶中的作用，显著提升了电解质循环稳定性。本研究为高性能氢化物电极与电解质材料的优化提供了理论支持，并为未来新型储能材料的设计提供了新思路。

关键词：全固态锂离子电池；氢化物电极；氢化物电解质；纳米限域结构

A01-026

氢电复合动力用固态储氢材料与技术

郝雷摘要内容待定

A01-027

新型反应电对赋能下一代水系电池

晁栋梁.

复旦大学

近来手机、电动汽车、储能电站自燃、爆炸等事故连连，电池本身的安全性受到了高度关注。另外，我国70%的锂电池资源都依赖进口，开辟新赛道，保障国家能源安全的新型安全电池技术至关重要。面向国家对新一代安全电池技术的迫切需求，积极响应总书记发展新质生产力的号召，晁栋梁所带领的eAB团队致力于发展具有本征安全、低成本特性的新型水系电池。跳出现有电池体系及方案，该报告将从水系电池面临的瓶颈——能量密度（ $<50 \text{ Wh/kg}$ ）出发，以电化学反应的基本单元——氧化还原反应电对的精细调节为核心，以设计制备稳定可逆的多电子转化反应为手段，发展电化学反应路径可控定制与追踪方法、创制高容量高电压反应电对、构筑新型水系电池体系，最终为高比能水系电池（ $>150 \text{ Wh/kg}$ ）的设计提供系统的器件化解决方案。

A01-028

CO₂ 电还原催化剂构筑及其催化反应机制研究

陈洲摘要待定

A01-029

Asymmetric gradient orbital interaction of hetero-diatomic active sites for promoting C–C coupling

Jinming Wang*

Northwestern Polytechnical University

Diatomic-site catalysts (DACs) garner tremendous attention for selective CO₂ photoreduction, especially in the thermodynamical and kinetical mechanism of CO₂ to C₂⁺ products. Herein, we first engineer a novel Zn-porphyrin/RuCu-pincer complex DAC (ZnPor-RuCuDAC). The heteronuclear ZnPor-RuCuDAC exhibits the best acetate selectivity (95.1%), while the homoatomic counterparts (ZnPor-Ru₂DAC and ZnPor-Cu₂DAC) present the best CO selectivity. In-situ spectroscopic measurements reveal that the heteronuclear Ru–Cu sites easily appear C₁ intermediate coupling. The in-depth analyses confirm that due to the strong gradient orbital coupling of Ru4d–Cu3d resonance, two formed *CO intermediates of Ru–Cu heteroatom show a significantly weaker electrostatic repulsion for an asymmetric charge distribution, which result from a side-to-side absorption and narrow dihedral angle distortion. Moreover, the strongly overlapped Ru/Cu-d and CO molecular orbitals split into bonding and antibonding orbitals easily, resulting in decreasing energy splitting levels of C₁ intermediates. These results collectively augment the collision probability of the two *CO intermediates on heteronuclear DACs. This work first provides a crucial perspective on the symmetry-forbidden coupling mechanism of C₁ intermediates on diatomic sites.

A01-030

高性能镁二次电池关键材料设计与技术

瞿佰华*、周小元、王敬丰、潘复生

重庆大学

储能技术的诸多特性使其在电力系统的发、输、配、用及调度等各个环节都具有广泛应用前景。锂离子电池是目前最成熟的电化学储能技术，但是锂离子电池面临资源和安全两大问题，发展低成本、高安全和资源丰度的二次电池是解决锂离子电池面临资源和安全两大问题的关键。镁元素在地壳丰度远远高于锂资源，且镁金属负极不易生长尖锐的枝晶，具有本征安全特性；因此，近年来，镁二次电池引起了广泛的关注。本报告从镁二次电池关键材料制备及性能优化，将从储镁正极材料的设计制备及储镁机制研究，镁金属负极界面调控及电化学性能优化，构筑性能防钝化界面层，为低成本和高安全镁二次电池应用提供理

论基础。

A01-031

超声扫描技术在锂电池失效分析中的应用

沈越*

华中科技大学

以锂离子电池为代表的二次电池通常具有封闭式外包装，会阻碍可见光、红外线、电子束等信息载体的透过，导致其内部结构表征非常困难。特别是大容量电池内部电解液、SEI 以及气泡等结构，对 X 射线散射能力弱，用常见的基于 X 射线的无损表征手段很难观测。

针对上述难题，本工作提出用超声波扫描成像表征电池内部变化。特定频率的超声波具备穿透电池的能力，且其传播行为受材料的模量、声速、密度影响巨大，理论上可以反映电解液、SEI 以及气泡等多相结构的变化。我们通过多频率组合、干耦合聚焦声束设计、模型电池对标、小波变换、卷积神经网络人工智能识别等创新方法，研究了大量电池样本的超声透过特征，厘清了电池内部电解液浸润不足、产气、析锂、荷电状态变化、界面裂纹等结构信息的对超声波透射信号的影响规律；进而搭建了聚焦超声波扫描装置，实现了上述结构信息的空间分布成像，具有直观、原位、快速、无损等优点，且灵敏度极高，往往可以先于电化学测试发现电池内部的问题。

目前，该技术已经转化为成熟产品，被宁德时代、比亚迪、亿纬锂能、宁德新能源、美国通用汽车等 30 余家企业采购，用于新电芯研发、质量控制、失效分析等不同领域。

A01-032

不同直径磨球调控硅粉粒径及电化学性能研究

张勇*

辽宁工程技术大学材料科学与工程学院

硅负极材料凭借其极高的理论比容量（4200 mAh/g）成为提升锂离子电池性能的关键因素，但其在嵌锂过程中巨大的体积膨胀（>300%）会导致结构破坏和容量快速衰减，严重阻碍其实际应用。硅纳米化可有效缓解体积膨胀并提升循环稳定性，球磨技术是实现低成本、规模化制备纳米硅的重要手段。为了探究球磨技术对硅纳米化的作用机制及其对纳米化后电极电化学性能的影响，本文采用理论计算与实验验证相结合的方法，利用第一性原理计算软件构建硅晶胞的嵌锂模型和 Li_xSi 合金相与硅的界面结构模型，分析 Li_xSi 合金相的转化趋势；采用行星式球磨机制备硅纳米材料，阐明不同直径磨球及其组合对硅粉粒径的调控机制；通过组装锂离子电池探究不同粒径分布范围硅粉对电极电化学性能的影响。

硅在嵌锂后最易形成结构性质最稳定的 Li_7Si_3 结构，其形成能为 -1.50 eV；硅与 Li_xSi 合金相界面结合后最易形成结构性质最稳定的 $\text{Li}_{12}\text{Si}_7$ 结构，其形成能为 -0.89 eV。 Li_xSi 合金相的相变趋势表明，硅的纳米化可以影响锂与硅的形成物相，继而影响体积收缩和膨胀，有效改善其体积效应。

在针对 1 μm 硅粉原料的单一直径球磨中，直径较大的 5 mm 磨球会因其间隙较大而降低有效碰撞次数，直径较小的 0.1 mm 磨球则会导致破碎力不足；先后球磨能有效球磨出 200 nm 及以下硅粉，但因分段破碎导致整体粒径呈双峰分布，均匀性较差；组合球磨可以使不同尺寸磨球同时作用，因此粒径分布更为均匀，但当磨球间的直径差异过大或磨球种类超过两种时则效果不佳；先后组合球磨可以有效使粒径细化且均匀统一，其中先 5 mm 后 2+0.3 mm 磨球组球磨后粒径下降 88.29%，200 nm 及以下硅粉占整体的 39.95%。球磨后的小粒径硅粉与原料相比虽因比表面积增大导致首次库伦效率降低，但能有效改善循环稳定性；粒径均匀分布的先 5 后 2+0.6 mm 磨球组球磨硅粉能抑制应力集中和 SEI 膜过度生长，降低不可逆锂损失，100 次循环后放电比容量保持为 59.57 mAh/g，优于粒径相近但分布不均的硅粉。不同粒径分布范围的硅粉结果表明小粒径且均匀分布的硅粉具有更好的电化学性能。其中先 5 mm 后 2+0.3 mm 磨球组球磨硅粉的首次放电/充电比容量分别为 1777.54 mAh/g 和 818.94 mAh/g，与最稳定界面相 $\text{Li}_{12}\text{Si}_7$ 的理论质量比容量 1635.91 mAh/g 相近，经过 100 次循环后仍保有 87.77 mAh/g 的放电比容量。

A01-033

机器学习解析 SEI 形成路径

文明健*

电子科技大学

化学反应网络与机器学习技术相结合，能够为研究电池体系提供新的机遇。该方法特别适用于理解电池的界面行为；在电池体系中，快速的反应级联过程使得界面组分及其动态演变的精确表征变得极为复杂。本报告将探讨如何利用化学反应网络与图神经网络相结合的方法，实现对锂离子电池化学反应空间的数据驱动研究。重点介绍控制固体电解质界面膜（SEI）形成的关键反应路径，并讨论该方法如何实现百万级反应网络的规模化研究，同时解决复杂体系中可靠预测的技术难题。

A01-034

A family of homologous metal heteromaterials for high-current-density electrocatalysis

Heming Liu

¹*Department of Chemistry, The University of Hong Kong, Hong Kong*²*Tsinghua Shenzhen International Graduate School, Tsinghua University, Shenzhen, P. R. China.*

High-current-density electrocatalysis is a prerequisite for industrial applications, but it is still limited by the mechanical stability and charge transfer kinetic of electrode materials. Endowing materials with excellent interfacial conductivity and chemical bonding is an effective solution but remains challenging. Here we synthesized a family of homologous metal heteromaterials (HMHs) featuring chemically bonded and metallic interface. These features stem from delocalized electronic states and uniformly distributed electric field across the interface of HMHs. We synthesized and high-throughput screened a family of HMHs comprising four categories and twenty materials. As an example, we show that HMHs operate stably in a water electrolyzer with a decay rate of $1.06 \mu\text{V h}^{-1}$ at high current density over 1,000 hours, thanks to the above two interface properties. To our knowledge, this is the lowest decay rates reported to date which surpassing the target of United States Department of Energy in 2040.

A01-035

等离子辅助球磨技术在功能材料中的应用

欧阳柳章摘要待定

华南理工大学

A01-036

氨的合成与分解关键催化材料何腾¹, 陈萍¹

1. 中国科学院大连化学物理研究所

氨在可再生能源的储存、转化与利用过程中将扮演关键角色。发展温和条件下的高效合成氨及氨分解制氢技术是实现氨储能应用的核心。

本报告将介绍我们课题组在低温合成氨以及氨分解制氢方面的研究进展。氢化物是电子与质子的载体，而氮气分子活化转化需要电子与质子的给予。这种内在关联启发我们研制了由氢化物与过渡金属组成的复合或络合催化剂体系。进一步研究发现氢化物还可通过光生电荷分离实施光催化合成氨。氢化物与氮、氢、氨之间独特的化学作用使低温低压合成氨成为可能。

近期，本课题组开发了具有自主知识产权的“低温氨分解催化剂技术”，并在 20 Nm³/h 氨分解制氢中试系统上实现了技术验证，具有较好的应用前景。

A01-037

中熵合金催化氨硼烷高效醇解制氢性能及催化增强机理

肖学章

中山大学 先进能源学院

A01-038

夏广林内容待定

A01-039

多层次多孔碳纳米纤维材料储氢与催化性能研究

陈晓红

华北电力大学能源电力创新研究院, 北京 102206

氢能是理想的能源之一, 它洁净、无毒且丰富, 高效安全储氢是氢能规模化应用的主要瓶颈。因此, 寻求高效、安全、稳定的储氢材料已经成为近年来氢能研究的热点和难点。纯碳基纳米材料与氢气之间主要是通过范德华力、静电场力等进行物理吸附, 达到储氢。然而, 纯碳纳米材料对氢的吸附比较弱, 储氢量也比较低, 远远未能达到实际应用的需求。另外, 碳基材料作为燃料电池阴极氧还原反应及析氯反应催化剂, 其缓慢的动力学过程也需提升。因此, 基于碳基材料因其独有的电子特性、质量轻、表面积大等特点, 近年来采用软模板与煅烧等方法, 以软模板剂为制孔剂, 用于构筑多层次多孔碳纳米纤维材料, 其在储氢、氧气还原及析氯反应中均显示出优异的相关性能。同时, 通过引入异质原子及贵金属, 增加了吸附或催化活性位点, 从而提高了碳材料的储氢及催化能力。

关键词: 多层次多孔碳材料; 软模板; 质量储氢密度; 氧气还原反应、析氯反应

A01-041

多主元贮氚合金研究进展及其在聚变能源中的应用前景

申华海*

中国工程物理研究院核物理与化学研究所

氚是核聚变反应的关键核燃料, 氚的安全贮存和高效利用是核聚变能源应用面临的关键问题之一, 高性能贮氚材料研制是 ITER 研发计划中的重要研究内容之一。氚以固态氚化物的形式贮存具有贮存密度高、纯度高、安全可靠等优势, 因此贮氚材料的研制在核材料研究领域受到极大关注。已研制的主要贮氚材料体系包括 Pd、U、LaNi₅、ZrCo 等, 但以上体系并不能满足贮氚材料的全部性能要求, 如 Pd 贮存量小、平衡压高, U 具有放射性、易自然, LaNi₅ 易毒化, ZrCo 存在歧化效应。因此, 研制新型的贮氚材料体系迫在眉睫。

多主元合金基于一种全新的合金设计理念, 提出了制备多组元合金, 通过多种元素的本征特性和元素之间的相互作用使其具有优异的综合性能[6]。相比传统合金而言, 多主元合金另一个显著特点是在合金中引入严重的缺陷, 这种晶格缺陷将会有利于提升材料的力学性能。而作为贮氚材料来说, 晶格缺陷可能有利于增加氚的间隙位置数量[7], 并且增加氢原子的迁移能垒, 显著提升多主元合金的固氢性能。因此, 多主元合金有望成为一种新型的重要贮氚候选材料, 促进核聚变能源的实际应用。作为潜在的新型贮氚候选材料体系, 可以通过先进的电镜技术(球差、能量损失谱技术、原子级能谱、积分差分相位衬度成像、原位氢化实验等)和计算方法(分子动力学、机器学习等), 进一步完善多主元合金在贮氚领域的理论(基于对组分类型、成分分布(化学短程有序)、相变过程与贮氢/氚性能联系的深入认识), 从而设计出综合性能(优异的可逆贮氚容量, 合适的热力学性能、快速的动力学性能、良好的循环稳定性、优秀的抗毒化性能等)满足实际工程需求的贮氚多主元合金。

A01-042

高分散金属催化剂的可控构筑及其催化氨硼烷水解放氢性能研究

夏永鹏*、李雨彤、褚海亮、孙立贤

桂林电子科技大学

氨硼烷(AB)作为一种高密度的固态储氢材料, 具有 19.6 wt% 的储氢容量, 但其常温下的水解放氢动力学缓慢, 尚需高性能催化剂的进一步优化。贵金属钌(Ru)基催化剂在 AB 水解中表现出优异的催化性能, 但贵金属的高成本和团聚问题严重限制了其广泛应用。贵金属钌(Ru)基催化剂在 AB 水解中表现出优异的催化性能, 但贵金属的高成本和团聚问题严重限制了其广泛应用。我们利用不同的合成方法设计了系列催化材料, 研究其对 AB 水解放氢反应的性能与催化机理。

(1) 以 ZIF-67 作为模板, 并在其表面包覆 MOF-74, 构建 MOF-on-MOF 的核壳结构(ZIF-67@MOF-74)。采用一步碳化法, 制备了钴氮共掺杂碳(NC₁@NC₂), 进一步引入微量 Ru 构建三明治夹心结构的复合催化剂 NC₁@Ru@NC₂。得益于 MOFs 衍生物与独特的夹心结构的优势, NC₁@Ru@NC₂ 催化剂对于 AB 水解

制氢具有良好的催化活性。在 298 K 下, 最大析氢转化率 (TOF) 为 $408.9 \text{ mol}_{\text{H}_2} \text{ mol}_{\text{Ru}}^{-1} \text{ min}^{-1}$, 活化能 (E_a) 为 $28.43 \text{ kJ mol}^{-1}$; 经 5 次循环后, 保持率为初始活性的 89.5%。

(2) 以氮磷共掺杂碳 (NPC) 为载体, 负载氧化钴 (CoO_x) 以构建复合载体, 采用化学还原法合成了钌基催化剂 ($\text{Ru@CoO}_x/\text{NPC}$)。通过 N、P 杂原子的共掺杂策略, 有效调控了碳载体与 CoO_x 的电子结构, 进而协同优化了 Ru 的电子态, 显著增强了催化剂中金属-载体相互作用。得益于其电子调控效应, $\text{Ru@CoO}_x/\text{NPC}$ 催化剂对 AB 水解制氢反应表现出优异的催化活性。在 298 K 下的 TOF 为 $1429 \text{ mol}_{\text{H}_2} \text{ mol}_{\text{Ru}}^{-1} \text{ min}^{-1}$, 且 E_a 低至 $21.56 \text{ kJ mol}^{-1}$; 且经 5 次循环后, 其初始催化活性保持率超过 90%。

A01-043

基于多策略改性的镁基材料储氢技术研究

朱云峰*、唐沁珂、李梦冉、石睿、刘雅娜、张纪光

南京工业大学材料科学与工程学院; 江苏先进无机功能复合材料协同创新中心

由于氢元素能量密度高、燃烧产物零污染, 被认为是实现能源革命的重要燃料, 也是实现“双碳”政策目标的核心动力之一。作为存储氢能的重要媒介, 镁基储氢材料因为其良好的吸放氢循环性和较高的储氢密度而备受研究者青睐。然而, 从电子结构看, Mg 与 H 原子以牢固的离子-共价混合键形式连接, 导致镁基储氢材料的应用普遍被其缓慢的动力学和稳定的热力学制约。合金化被认为是一种有效的可同时改善镁基储氢材料吸放氢动力学和热力学的重要改性手段。本团队近期针对镁基材料合金化改性展开了相关的工作。在镁镍基储氢合金方面, 首先系统研究了多晶型 Mg_2NiH_4 空气暴露后表面的物相组成与微观结构, 揭示了钝化层中异质结构的建立可有效调控 Ni 的电子结构并改善其催化脱氢活性。值得注意的是, 该机制在 Ni 基催化剂的设计与创制上也具有适用性, 高稳定 $\text{Ni}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{GN}$ 能够显著提升 MgH_2 的吸放氢动力学性能。其次, 通过在 Mg_2NiH_4 相转变温度以上淬火, 实现了微米级 Mg_2NiH_4 的快速低温脱氢, 并揭示了 (210) 晶面择优取向和脱氢性能间的关联性。在镁铝基储氢合金方向, 设计了 $\text{Mg}_{90}\text{Al}_{10}\text{-CeF}_3$ 高效储氢体系, 原位生成的 Al_4Ce 和 MgF_2 可有效提升 $\text{Mg}_{90}\text{Al}_{10}$ 的吸放氢性能, 可将 $\text{Mg}_{90}\text{Al}_{10}$ 的脱氢表观活化能从 155.95 kJ/mol 降至 79.31 kJ/mol 。上述工作对构筑高性能镁基储氢材料提供了新的见解。

A01-044

基于微观标度关系的 Ti 基催化剂设计

王建辉摘要待定

A01-045

高效催化剂设计提升镁基储氢材料的低温和长循环性能

王辉

华南理工大学材料科学与工程学院

A01-046

基于微观标度关系的 Ti 基催化剂设计

鲁杨帆^{a,b,*}^a 重庆大学 材料科学与工程学院、^b 明月湖实验室

Ti 等前过渡金属催化剂的添加能在镁基储氢材料表面提供有效的氢吸附及解离位点, 有助于降低氢解离活化能, 从而改善其吸放氢反应的动力学性能。然而, 现有前过渡金属基催化剂同时使致氢扩散活化能变大, 导致在较低温度下的催化性能降低, 即存在催化标度关系的约束。针对氢解离及扩散过程之间的矛盾问题, 课题组基于前过渡金属的精准价态调控实现了催化剂-氢键强的系统性调控, 同步实现了高效氢解离及扩散步骤。拟汇报 Ti 掺杂 MgO 催化剂在镁基储氢材料吸放氢反应过程的微观标度关系, 并讨论在镁基储氢材料中 Ti/Ni 多相催化剂对复杂动力学的优化机制。

A01-047

电磁热场真空复合熔炼炉在储氢合金及其他高端合金的研究及初步应用

付亚波^{1*, 2}, 霍颜秋^{1, 2}, 郭仁青^{1, 2}¹ 台州学院, 材料科学与工程学院, 浙江台州, 318000² 全省海岛绿色能源及新材料重点实验室, 浙江台州, 318000

研发了一种制备多组元合金的新型真空熔炼炉, 具有感应加热、铸坯热处理、电磁分离、电磁净化、

电磁搅拌及机械搅拌的多项功能。适合高端铜合金、铝合金、钛合金，可制备半导体材料如 Ca 、 Si_x 、固态储氢合金 TiMn_2 、 LaNi_5 、 Li-Mg-H 、 V_{60} 等合金，具有快速冷却制备非晶合金的功能。提出了电磁热场熔炼炉制备固态储氢合金 TiMn_2VFe ，使合金成分、组织均匀，同时能完成热处理，提高固态储氢合金的容量，实现了低成本的固态储氢合金的熔炼/热处理一体化制备技术。研究表明， 700°C 3h 热处理后的组织，树枝状结晶结构减少，白色相的储氢部位面积增大，转变为以 BBC 结构为主，储氢性能得到提高。低成本储氢合金 TiMn_2VFe 析出相细小、分布较均匀，热处理后储氢量最大 2.5-3.5wt%，而未热处理 1.48wt%。

该设备在熔炼法制备石墨无铅易切削黄铜、氧化铝弥散强化铜及固态储氢合金的熔炼及热处理方面具有优势，采用数值模拟技术，使难以润湿的石墨在黄铜中较均匀分布，且熔炼后能用该设备完成热处理，实现低成本开发石墨无铅铜。研究表明，在 50Hz、60A，480s 的条件下，石墨可以通过铸造法添加到黄铜中获得较好的切削及力学性能。添加尺寸较小石墨有利于石墨在黄铜中的分布，石墨存在于 H 及 β 相周围。添加的石墨以核壳结构存在于黄铜中，小于 H 相的尺寸更有利提高石墨含量，通过电磁搅拌细化晶粒提高石墨含量能发挥重要作用。冷轧前石墨以粗大、不规则长条状分布在基体中，经过冷加工及热处理后的石墨被破碎，组织细化。

弥散强化铜—氧化铝复合材料是以硬度高、熔点高、热稳定性和化学稳定性良好的纳米氧化铝颗粒作为增强相的新型功能材料，其中的氧化铝均匀分散在铜基体中，具有高导电率、高强度、高耐热性能，其导电率大于 80%IACS，抗拉强度大于 600MPa，软化温度大于 900°C ，具有突出的高温性能，也广泛应用于电磁炮导轨材料、大规模集成电路引线框架、电阻焊电极以及 ITER 垂直靶材散热片等覆盖了电子信息业、先进民用制造业、国防科技工业等诸多高新技术领域。采用熔炼法制备纯铜未搅拌的平均导电率为 98.35%IACS，而原位添加稀土 1.2%Al-Cu 的铜坯料平均导电率约为 49.09%IACS，第二次熔炼后导电率达 68%IACS，由于原位形成的氧化铝分布均匀，铝的含量下降，导电率提高。硬度达到了 73HRB，传统粉末冶金生产的坯料的硬度为 73HRB（金属学报，申玉田，1999），施加电磁搅拌及添加稀土、添加铝粉并生成了纳米氧化铝，能够大幅度提高铜基体的硬度，与粉末冶金技术制备的硬度相当。说明熔炼法制备高氧化铝含量的弥散强化铜具有可行性。

关键词：新型熔炼炉；电磁热场；石墨无铅铜；氧化铝弥散强化铜；固态储氢合金

A01-048

原位构建功能型钝化层兼顾金属氢化物的反应活性和空气稳定性

马仲亮摘要待定

A01-049

界面微环境调控的高效绿氢技术

郭佳欣*

北京航空航天大学

氢能作为国家“十四五”规划重点战略产业，其发展意义重大。当前，可再生能源驱动的电解水制氢技术虽发展迅速，但其大规模应用对全球淡水资源构成严峻挑战。相比之下，储量丰富（占地球水储量 97.3%）的海水等低纯度水源，几乎是取之不尽的天然电解质原料。然而，直接电解海水或低纯水仍处于起步阶段，面临核心难点：在接近中性的条件下，系统效率低、稳定性差；且海水中高浓度的氯离子及其他阳离子（ Mg^{2+} 、 Ca^{2+} ）会引发有害的氯气氧化反应、电极腐蚀，并在阴极形成大量不溶性沉淀物（如 $\text{Mg}(\text{OH})_2$ ），导致堵塞。

为解决上述挑战，本研究通过在过渡金属氧化物催化剂表面构建路易斯酸层（如 Cr_2O_3 ），实现了关键突破。该设计能动态解离水分子并捕获羟基阴离子，形成原位局部碱性微环境。这一微环境调控技术同步优化了阴阳极反应动力学，并有效避免了氯离子腐蚀与电极沉淀物生成。基于此开发的流动式海水电解槽（采用 Cr_2O_3 -CoOx 修饰电极），在 60°C 条件下达到工业级电流密度（ 1.0 A cm^{-2} @ 1.87 V），并能在 500 mA cm^{-2} 下稳定运行超过 100 小时，其性能不仅超越现有海水电解技术，更接近采用高纯水及商用 RuO_2/Pt 催化剂的质子交换膜电解槽（PEMWE）水平。

进一步地，针对更广泛的低纯水（如自来水）电解瓶颈，本研究团队开发了微环境 pH 调控技术。利用 pH 超微电极结合扫描电化学显微镜进行原位监测，发现布朗斯特酸性氧化物（ MoO_{3-x} ）可显著降低局部 pH。将其修饰于 Pt/C 阴极表面后，形成强酸性微环境。基于此设计的 PEMWE，能在未经处理的自来

水中以 1.0 A cm^{-2} 的电流密度持续稳定运行超过 3000 小时，性能与高纯水体系相当。该技术通过强化析氢动力学、抑制阴极沉积物生成并延缓膜降解，大幅降低了水预处理需求与系统维护成本，为氢能产业化发展提供了新思路。

A01-050

飞驰公司内容待定

A01-051

高性能镁基储氢材料的设计及应用

李谦摘要待定

A01-052

先进储能传感材料创制与数据库构建

孙立贤 徐芬 罗玉梅 欧阳杰 张先廷

桂林电子科技大学材料科学与工程学院，广西新能源材料结构与性能协同创新中心，广西电子信息材料构效关系重点实验室，广西桂林，541001.

E-mail: sunlx@guet.edu.cn; xufen@guet.edu.cn; luoyim@guet.edu.cn

氢能作为未来清洁能源体系的重要组成部分，其高效存储与安全检测已成为制约其规模化应用的关键瓶颈。本课题组针对高效储氢需求，构建并优化了一系列基于 MOFs 衍生的纳米催化剂，显著提升了固态储氢材料（如 LiAlH_4 、 MgH_2 等）的吸放氢性能。通过实验与理论计算相结合，系统探讨了吸放氢过程中的热力学与动力学行为，揭示了催化剂调控下材料微观结构的演变规律，深入阐明了复合体系的储氢机理。同时，在氢安全监测领域，开发了多种贵金属掺杂的过渡金属氧化物氢气传感材料，实现了高灵敏度、快速响应和良好稳定性的氢气检测。此外，创新性地构建了面向储氢材料性能与特征参数的数据库，为高通量筛选与精准设计新型储氢材料提供数据支撑，并为推动储氢材料的标准化和实用化提供支撑。

A01-053

氢能领域关键稀土材料与应用

陈庆军

中国科学院赣江创新研究院

A01-054

基于相变热力学计算的 Mg-Ni-Nd 储氢合金设计

罗群

上海大学 材料科学与工程学院

A01-055

层状过渡金属(铝)碳/氮化物调控氢化镁储氢性能研究

刘海镇*、罗辉、韦琴勤、黄存可、蓝志强、郭进

广西大学

氢化镁 (MgH_2) 具有储氢密度高、可逆性好、镁资源丰富等优点，是较有应用前景的储氢材料。然而， MgH_2 热力学稳定性过高，吸放氢动力学过慢，其实际应用受到限制。针对这一问题，我们研究了层状过渡金属(铝)碳/氮化物 (MXene/MAX) 对 MgH_2 储氢性能的改善效果。研究发现， $\text{V}_2\text{C MXene}$ 既可以改善 MgH_2 的放氢动力学性能，又能略微降低 MgH_2 的热力学稳定性。 $\text{V}_2\text{C MXene}$ 与 $\text{Ti}_3\text{C}_2 \text{ MXene}$ 的组合可以协同改善 MgH_2 的吸放氢性能，这主要归功于 $\text{MgH}_2/\text{V}_2\text{C}/\text{Ti}_3\text{C}_2$ 三叉界面的形成。 $\text{Ti}_3\text{CN MXene}$ 也可以有效提高 MgH_2 的吸放氢性能，微结构研究发现，与 Ti_3CN 接触的 MgH_2 在高能电子辐照下即可发生分解。虽然 MXene 对 MgH_2 的储氢性能具有很好的改善作用，但其制备过程需要消耗大量的氢氟酸用于刻蚀前驱体 MAX 相中的 Al 层，这对环境不是很友好。因此，我们也探索了未经刻蚀的 MAX 对 MgH_2 储氢性能的改善效果，研究表明许多 MAX 对 MgH_2 的储氢性能也有较好的改善作用，尤其是 Ti_3AlCN 、 TiNbAlC 等 MAX 对 MgH_2 的改善效果显著。微结构研究表明， Ti_3AlCN 可以作为 MgH_2 形核和长大的活性位点，从而促进 MgH_2 的吸放氢过程；而 TiNbAlC 会转化为 $\text{TiH}_{1.971}$ ，可以作为“氢泵”加速 MgH_2 的吸放氢过程。另外，我们还对比研究了致密层状的 $\text{Ti}_2\text{VAlC}_2 \text{ MAX}$ 与刻蚀后的疏松层状的 $\text{Ti}_2\text{VC}_2 \text{ MXene}$ 对 MgH_2 的改善效果，

研究表明, Ti_2VC_2 MXene 对 MgH_2 的改善效果比 Ti_2VAlC_2 MAX 更显著, 这主要得益于疏松层状的 Ti_2VC_2 MXene 能够未 MgH_2 提供更多的附着位点, 其与 MgH_2 的接触更紧密。总的来说, MXene 和 MAX 均能有效改善 MgH_2 的储氢性能, 但 MXene 的改善效果比 MAX 更明显, 这主要是由于 MXene 独特的层状结构, 从而更有利于 MXene 与 MgH_2 的相互作用。

A01-056

钛基储氢合金抗毒化机理及性能调控研究

崔文岗^a, 石航燕^a, 潘洪革^{a,b*}

a. 西安工业大学新能源科学与技术研究院

b. 浙江大学材料科学与工程学院

氢作为未来理想能源载体具有资源丰富、清洁环保、能量密度高等优势, 但在实际存储过程中存在储氢密度低、循环性差、成本高及安全性差等问题, 促使高性能储氢材料开发成为重要研究方向。其中, 钛基储氢合金因其在常温条件下具有快速吸放氢响应、可逆储氢容量及优异循环稳定性等优点, 被视为理想选择之一, 但是在实际使用过程之中却易受 CO 、 CO_2 、 CH_4 、 O_2 等杂质气体影响, 导致氢在合金中解离与吸附困难、有效储氢容量降低, 阻碍商业化应用。因此, 为解决钛基储氢材料杂质气体中毒引起的储氢性能衰退等问题, 我们系统研究了一些常见氢源中杂质气体 (主要包括 CO 、 CO_2 、 CH_4 、 O_2 等) 在 AB、 AB_2 型钛基储氢合金吸放氢过程中的毒化机理, 并通过成分设计、表面改性、合金元素替代等方式有效调控了钛基储氢合金的抗毒化性能, 这对于进一步推进钛基储氢合金的实际产业化应用具有一定的指导意义。

关键词: 储氢合金; 储氢性能; 毒化机理; 表面改性, 成分优化

A01-057

$\text{Ni}_3\text{ZnCo}_{0.7}$ 非化学计量比碳化物改性及对 MgH_2 储氢材料的影响及机理

解秀波*

烟台大学

镁基储氢材料储氢容量大、价格低廉等优点使其在车载储氢等诸多领域具有可观应用前景。但其动力学缓慢及操作温度高限制了其应用, 添加催化剂是常见的有效方面之一。目前碳化物催化剂研究主要集中于调控 MXene 基材料成分获得化学计量比碳化物, 但是对于非化学计量比碳化物储氢材料的研究还尚不清楚。本工作研究了 $\text{Ni}_3\text{ZnCo}_{0.7}$ 非化学计量比碳化物的合成方法及催化活性, 通过改善其元素配比研究了含钨、镓的非化学计量比碳化物的合成参数。通过添加 MXene, 制备了 $\text{Ni}_3\text{ZnCo}_{0.7}/\text{TiO}_2$ 复合催化剂, 确定了改催化剂的催化活性并通过理论计算确定了合成过程的配位机制及电荷转移特性。对于非化学计量比碳化物的研究丰富了储氢材料碳化物催化剂的设计, 弥补了非化学计量比碳化物对 MgH_2 等储氢材料具体作用机制的研究空白。

A01-058

基于质子/氧离子混合传导 $\text{PrBaFe}_{1.97}\text{Ce}_{0.03}\text{O}_{5+\delta}\text{-CeO}_2$ 异质结构复合电解质的低温固体氧化物燃料电池研究

黄建兵*、吴秀芝

西安交通大学

固体氧化物燃料电池 (SOFC) 被视为最清洁高效的发电技术之一, 但受材料与成本限制及系统复杂导致其至今未能规模化应用。将 SOFC 的操作温度从 $800\text{-}1000^\circ\text{C}$ 的高温范围降至 $300\text{-}600^\circ\text{C}$ 的低温范围有望带来全面突破, 推动其商业化进程。目前报道的高性能低温 SOFC 主要是通过氧离子/质子传导电解质的薄膜化结合匹配的高性能低温阴极实现的, 但电池制备困难不利于放大。为推动低温 SOFC 技术的发展, 基于新的固态离子学设计策略开发高离子电导率的低温氧化物电解质材料成为研究的前沿与焦点。

传统上 SOFC 电解质材料是基于受体掺杂策略设计的, 由于体相缺陷缔合与陶瓷晶界的制约, 其在低温下的离子电导率最高仅达 $10^{-2} \text{ S cm}^{-1}$ 量级。最近随着半导体离子材料的不断发现, 半导体离子学的材料设计策略备受关注。通常用作电池电极的混合离子-电子导体被成功用作电解质材料, 在燃料电池使用环境中原位产生的有源离子 (质子/氧离子) 可以通过其体相/晶界/表面/界面多维度高通量运输, 使得其离子电导率超过 $10^{-1} \text{ S cm}^{-1}$, 而自身高的电子电导率被半导体物理效应所抑制, 同时作为催化剂参与电极反应,

从而实现半导体离子燃料电池的低温高性能输出。

近年来,质子/氧离子/电子三重传导的双钙钛矿氧化物 $\text{PrBaFe}_2\text{O}_{5+\delta}$ (PBFO) 以其良好的稳定性和电极反应催化活性被成功用作对称 SOFC 的电极材料,本研究选择 PBFO 作为电解质基体,通过 B 位掺杂 Ce^{3+} 调控其离子-电子导电特性,进一步与半导体 CeO_2 复合构建 n-n 同型异质结构实现体相/界面多维离子输运,以期获得高的低温离子电导率。首先采用溶胶-凝胶法合成 PBFO 和 Ce 掺杂的 PBFO ($\text{PrBaFe}_{1.97}\text{Ce}_{0.03}\text{O}_{5+\delta}$, PBFC3),发现两者均可单独用作燃料电池的电解质,结合 Ni-NCAL ($\text{LiNi}_{0.8}\text{Co}_{0.15}\text{Al}_{0.05}\text{O}_2$) 电极构建对称燃料电池,在 550°C 时开路电压分别为 0.92V 和 1.05V,输出的最大功率密度分别为 $542\text{ mW}\cdot\text{cm}^{-2}$ 和 $700\text{ mW}\cdot\text{cm}^{-2}$,相应的离子电导分别为 0.084 S cm^{-1} 和 0.101 S cm^{-1} ,电子电导率分别为 0.236 S cm^{-1} 和 0.235 S cm^{-1} ,表明 B 位掺 Ce^{3+} 增强了离子电导率,略微抑制了电子电导率。整流实验结果表明两种燃料电池的阳极中均存在肖特基结,有效抑制电解质内部的电子导电;离子筛选燃料电池的性能表明 PBFO 和 PBFC3 均为质子/氧离子混合导体。采用直接混合法制备了 $\text{PBFC}_3\text{-CeO}_2$ 复合电解质材料,同样构建了对称燃料电池,发现当 CeO_2 添加量为 10wt.% 时,其电化学性能最佳,在 550°C 时电池开路电压为 1.095V,输出的最大功率密度为 $844\text{ mW}\cdot\text{cm}^{-2}$,相比 PBFC3 燃料电池提升了 20.6%,相应的离子电导为 0.121 S cm^{-1} ,电子电导率为 0.244 S cm^{-1} ,相比 PBFC3 电解质分别提升了 19.8% 和 3.8%,表明异质结构复合进一步增强了离子电导率。离子筛选燃料电池的性能表明 $9\text{PBFC}_3\text{-1CeO}_2$ 复合电解质均为质子/氧离子混合导体。通过测量复合电解质的半导体特性,验证其高的电池开路电压来自于同型异质结形成的内建电场对电子输运的阻碍。该研究为下一代固体氧化物燃料电池的开发提供了先进的电解质材料,并丰富了半导体离子学理论的应用。

A01-059

聚集诱导自由基

李远*

华南理工大学发光材料与器件全国重点实验室

近三十年,有机电致发光二极管 (OLED)、有机太阳能电池 (OPV)、有机场效应晶体管 (OFET) 及自旋电子学材料与器件取得了重要的进展。其中,经典的“给体—受体”型有机半导体的电子基态通常被公认为“闭壳—单线态”基态,将其电子自旋共振信号来源归因于金属杂质、缺陷态、水/氧/光掺杂态或极化子等。

2017 年,李远课题组首次发现经典的窄带隙“给体—受体”型有机半导体普遍存在“开壳双自由基”单线态或三线态电子自旋基态,并提出“聚集诱导自由基”机理,改变了同行对该基础科学问题的认识 (J. Phys. Chem. C, 2017, 121, 8579-8588)。相对“闭壳”的宽带隙可见光区 OLED 材料及其器件稳定性好,成功实现了产业化应用;而基于相对“开壳”的窄带隙 OPV 及 OFET 材料及器件的效率和稳定性亟待提高。抑制窄带隙有机半导体的“开壳电子自旋基态”将提高材料的发光效率和光/热/电化学稳定性,将进一步推动 OPV 及 OFET 等领域的产业化进程。

区别于石墨烯、富勒烯和碳纳米管等明星材料,我们基于“聚集诱导自由基”机理,通过“以毒攻毒”策略引入稳定的“羰基”等吸电子基团与“氧自由基”形成多重共振体系,开发了一系列光、热、电化学稳定的“电子自旋盘”、“电子自旋球”和“电子自旋管”。基于此材料体系,我们实现了高比容量且稳定的锂离子电池。探索有机高自旋材料在能量转换存储、自旋电子学和超导材料等领域的应用潜力是未来有机半导体发展的重要展方向之一。

A01-060

常温低压固态储氢技术的研发及应用

原建光

中国科学院长春应用化学研究所

A01-061

钛基异质复合材料催化剂改性镁基材料储氢性能

蓝志强*、刘子祺、刘海镇

广西大学

氢能被视为 21 世纪解决能源危机和环境污染的潜在方案。目前，氢能商业应用面临的主要技术难题是有效储存和运输。镁基储氢材料因其安全性、便利运输、高可逆储氢容量及丰富地球储量等优点，成为有潜力的候选者。然而，要实现 MgH_2 的商业化应用，还需克服脱氢温度过高（ 300°C ）和氢吸附/解吸速率慢等问题。为了改善镁基材料的储氢性能，本研究利用钛基异质复合材料（ $\text{V}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2\text{-rGO}$ 、 $\text{Ti-V}_2\text{O}_5\text{@CNT}$ 和 $\text{cp-Nb}_2\text{O}_5\text{@Ti}_3\text{C}_2$ ）催化剂对镁基材料储氢性能进行改性。研究发现，经过钛基异质复合材料催化改性的镁基材料具有良好吸放氢性能，在室温下即可吸收氢气，并且在 180°C 左右即可释放出氢气，且能大幅降低镁基材料的吸放氢活化能和提升材料的动力学性能。机理研究表明，复合材料中的异质界面以及多价钛的存在构建了电子传输通道，从而促进氢的结合与解离。这为氢原子提供了更多活性位点，加速了氢分子的解离与复合过程。

A01-062

钒基储氢合金循环衰减机制研究

严义刚*、孔汉阳、黄秋维、吴朝玲、陈云贵

四川大学新能源与低碳技术研究院

钒基固溶体型储氢合金，是一类极为重要的储氢材料，理论储氢量达到 3.8wt%，室温下可逆储氢密度达到 2.5 wt% 以上，具有良好的应用前景。然而，钒基储氢合金在吸放氢循环过程中，特别在循环前期，容量衰减过快，部分合金在循环 50 圈后容量衰减率甚至达到 20% 以上；此外，伴随着容量的衰减，合金的平台压力会持续下降、平台斜率增大，这不利于储氢装置的设计及与应用场景的匹配。研究表明，晶格缺陷可能是导致储氢性能衰减的关键因素之一，但目前对循环过程中晶格缺陷产生的内在机制尚不明晰，尤其缺乏对钒基合金缺陷形成与累积过程的原子尺度微观机理的深入解析。本研究系统分析合金的初始晶格畸变、吸放氢循环工艺、氢气气氛等因素对钒基储氢循环寿命的影响，并从原子尺度研究了吸放氢循环过程中晶格缺陷的形成和演变过程。

A01-063

高熵合金催化剂及其氢能应用

姚永刚摘要待定

A01-064

羧基化石墨烯基复合材料的制备及其电容性能研究

刘佩佩*、吴荣方

江西科技师范大学

超级电容器作为一种介于传统电容器和电池之间的新型绿色储能器件，具有功率密度大、充放电速度快、循环寿命长以及工作温度范围宽等优点，近年来被广泛研究。作为超级电容器组成成分之一的电极材料，在很大程度上决定了超级电容器的性能好坏。具有高比表面积、高的机械强度、良好电子导电性的羧基化石墨烯（CG）与导电聚合物或过渡金属氧化物复合可实现两者的优势互补，进而得到具有优异电化学性能的复合材料。为此，首先通过超声处理和真空过滤步骤制备了 CG/PEDOT:PSS 自支撑复合薄膜。复合薄膜电极在 0.5 A g^{-1} 的电流密度下表现出 192.7 F g^{-1} 的高比电容，并在 5 A g^{-1} 的电流密度下充放电 50000 次后电容保持率仍为 95.5%，且具备良好的柔性。另外，还利用表面带正电荷的 NiO 纳米片与电离后带负电荷的羧基化石墨烯间的静电自组装，制备不同比例的 CG/NiO 复合材料。结果表明，复合材料的比表面积比纯 NiO 纳米片高出三倍，复合电极在 1 A g^{-1} 的电流密度下的电容为 175.5 C g^{-1} ，高于同等电流密度下纯 NiO 电容（ 137.4 C g^{-1} ）。复合材料的电容性能之所以能够提高，主要可归结为两点：一，通过与其它电极材料复合，增大石墨烯片的层间距，增多表面活性位点，进而提升电容性能；二，羧基化石墨烯能为复合材料提供机械支撑，减缓体积变化引起的倍率性能差和稳定性差的问题。

A01-065

高熵双钙钛矿氧化物 b 位的协同多元素效应：一种有前途的高效共电解水和二氧化碳的燃料电池

徐慧, 陈婷, 王绍荣

中国矿业大学

固体氧化物电解池 (SOEC) 中燃料电池的性能对燃料气体电解至关重要, 是决定整体电解效率的关键因素。然而, 在 SOEC 中集成 CO₂-H₂O 电解的商业化仍然受到传统燃料电池结构固有的次优催化效率和长期稳定性限制的制约。本文提出了一种新型高熵 Sr₂FeTi_{0.2}Cr_{0.2}Mn_{0.2}Mo_{0.2}Co_{0.2}O_{6-δ} (SFTCMMC) 作为共电解电极材料。研究了共电解反应的理化性质和电化学性能。在施加电压的情况下, 全电池能够有效地电解 H₂O 和 CO₂。通过不同的操作条件, 研究了温度、H₂O 和 CO₂ 浓度以及外加电压对 Sc_{0.18}Zr_{0.82}O_{2-δ} (SSZ)-电解质负载的 SOEC 电化学性能的影响。在 850°C、1.5V 共电解条件下, SOEC 获得了良好的电解电流密度 1.47 A cm⁻²。此外, 该电池在 1.3 V 下可保持 150 小时的稳定性能, 并且在此期间没有检测到碳沉积。这些有希望的发现表明, 高熵的 SFTCMMC 钙钛矿是一种可行的燃料电池, 用于高效的 H₂O/CO₂ 共电解。

A01-066

The metal 1T phase MoS₂ thin nanosheets for Supercapacitors

Chunrui Zheng*

GEO university of He Bei

In the present work, MoS₂ ultrathin single-layer nanosheets were successfully synthesized by two-step solvothermal method. The main components of nanosheets were metal 1T-MoS₂ and the concentration of 1T phase was 60%. The prepared MoS₂ nanosheet shows high crystallinity and good conductivity. The corresponding specific capacitances of MoS₂ nanosheet electrode at 1, 2, 4 and 8 A g⁻¹ current were 388.8, 305, 271.3 and 230 F g⁻¹, respectively. The MoS₂ nanosheet has a specific capacitance of 97.1% after 2000 cycles of charge and discharge at a current density of 1 A g⁻¹. The high specific capacitance and good cycle stability of the MoS₂ nanosheet electrode are attributed to the good crystallinity and conductivity of the metal 1T-MoS₂, making it an excellent electrode material for ultracapacitor energy storage applications.

A01-067

基于电催化氧化富氢燃料的在线制氢技术

王建辉*

西湖大学

储氢环节一直是大规模氢能应用的关键瓶颈。高压储氢技术成本高、安全风险大, 而材料储氢技术要么重量能量密度偏低, 要么面临热力学与动力学性能的限制, 均难以满足大规模氢能应用的发展需求。为了开发高效、安全、低成本的储氢技术, 我们尝试电催化氧化富氢燃料 (如氨和甲醇) 来进行在线制氢。理论上, 电催化氧化氨或甲醇可在常温常压条件下分别产生 17.7 wt% 和 12 wt% 氢气, 获得 90% 以上的能量效率, 并且电化学过程易于精确控制, 是一种理想的在线制氢技术。然而, 上述电催化反应均存在严峻的动力学限制问题, 尚缺少高效稳定的电催化剂, 限制了技术的实用发展。本报告将剖析上述电催化反应的动力学能垒根源, 介绍在催化改性方面的研究进展。

A01-068

智能化电催化剂筛选与制备

宋二红*

中国科学院上海硅酸盐研究所

本研究依托高通量计算与智能化实验平台, 围绕电解水催化剂的设计与性能优化, 提出了一套系统性、创新性的研究策略, 并实现了催化性能的显著提升。首先, 通过对催化剂本征缺陷的精确调控以及异质原子掺杂行为的有序引入, 有效优化了活性位点的空间分布, 显著增强了材料的本征催化活性。其次, 构建了具有多维调控能力的结构体系, 基于异质结界面效应调控电子结构, 从而提升了电荷分离效率与界面载流子传输性能。结合机器学习算法与高通量实验技术, 高效筛选出一系列具有优异电化学性能的催化剂材

料，分别在析氢反应（HER）与析氧反应（OER）中展现出卓越的活性与稳定性表现。进一步地，借助人工智能驱动的智能实验室系统，实现了材料合成路径的智能化优化，显著提升了实验效率与重复性。研究成果为高效水分解催化剂的定向设计与可再生能源电化学转换技术的发展提供了重要理论依据与实践支撑。

A01-069

BSCF 基固体氧化物燃料电池阴极性能研究

杨鑫摘要待定

A01-070

高性能质子导体固体氧化物燃料电池阴极的设计

毕磊摘要待定

A01-071

快充长寿命微纳铋/碳储钠负极材料

张桥保*

¹厦门大学材料学院, 厦门, 361005

发展高能量密度、高功率密度和长循环寿命二次电池是当前国内外前沿研究热点，也是能源电化学材料研究的核心。先进电极材料开发是实现高比能二次电池的关键前提，这迫切需要对现有电极材料进行优化并探索新型高性能电极材料，同时借助清晰、精确的先进实验表征手段对新机理、新材料和新设计进行深入探讨，以形成系统的科学认识。

本报告将围绕快充长寿命钠离子电池用铋/碳复合负极的结构设计及性能提升的机理解析而展开，以先进显微和谱学表征为研究手段，深入解析其微观结构与宏观电化学性能间的构效关系，以期为解决目前快充长寿命钠离子电池存在的瓶颈问题提供新的研究思路。

A01-072

本征零应变负极材料的创制及储锂机理研究

王飞*

昆明理工大学

锂电用单相硅基负极材料（硅和氧化硅）具有高容量、低电压等优点，然而其大的体积应变会造成性能的快速衰减，甚至带来安全隐患。通过包覆、成分调节等策略能在一定程度上缓冲/减轻体积应变，但是不能从根本上解决该难题。钛酸锂等本征体积零应变负极材料具有两个结构特征：结构中含有①由强化学键构筑②用于储锂的大空腔。氧化硅尽管由强 Si-O 键构成，然而其晶内空腔较小，锂离子嵌入后会造成 Si-O 键断裂和 Li-Si/Li-O 键重构，从而引起大的体积膨胀。因此，本研究提出由强 Si-O 键（硅氧四面体）拓扑构序创制具有晶内大空腔的新型硅氧化物负极材料，实现硅氧化物储锂机理的转变（转换/合金型到固溶型），以此实现本征体积零应变和优异储锂性能。首先通过密度泛函理论（DFT）对结构模型进行创制和预测，然后借鉴常见拓扑结构材料的制备方法构筑相应的拓扑结构硅氧化物，并探究拓扑结构硅氧化物本征体积零应变的结构设计相关理论及储锂特性和机理，且该方法能够应用到其他组分的本征零应变负极材料的设计中。该研究能从根本上解决硅基负极材料的本征体积应变大的难题，并有望开辟本征低/零应变负极材料储锂的新领域、新理论和新机制。

A01-073

高熵双钙钛矿氧化物 b 位的协同多元素效应：一种有前途的高效共电解水和二氧化碳的燃料电极

徐慧，陈婷，王绍荣

摘要：固体氧化物电解池（SOEC）中燃料电极的性能对燃料气体电解至关重要，是决定整体电解效率的关键因素。然而，在 SOEC 中集成 CO₂-H₂O 电解的商业化仍然受到传统燃料电极结构固有的次优催化效率和长期稳定性限制的制约。本文提出了一种新型高熵 Sr₂FeTi_{0.2}Cr_{0.2}Mn_{0.2}Mo_{0.2}Co_{0.2}O_{6-δ} (SFTCMMC)作为共电解电极材料。研究了共电解反应的理化性质和电化学性能。在施加电压的情况下，全电池能够有效地电解 H₂O 和 CO₂。通过不同的操作条件，研究了温度、H₂O 和 CO₂ 浓度以及外加电压

对 $\text{Sc}_{0.18}\text{Zr}_{0.82}\text{O}_{2-\delta}$ (SSZ)-电解质负载的 SOEC 电化学性能的影响。在 850°C 、 1.5V 共电解条件下, SOEC 获得了良好的电解电流密度 1.47 A cm^{-2} 。此外, 该电池在 1.3 V 下可保持 150 小时的稳定性能, 并且在此期间没有检测到碳沉积。这些有希望的发现表明, 高熵的 SFTCMC 钙钛矿是一种可行的燃料电极, 用于高效的 $\text{H}_2\text{O}/\text{CO}_2$ 共电解。

A01-074

原位电镜分析电池锂负极

王鸣生摘要待定

A01-075

肖国萍待定

A01-076

基于微分电化学质谱的电极反应原位监测与机理研究

晏宁*、赵凯、姜小艺

武汉大学

原位差分电化学质谱仪 (DEMS) 能实时检测电化学反应界面产生 (或消耗) 的气体和挥发性产物, 提供定性与定量分析。近期, 我们利用 DEMS, 并结合其它原位谱学技术对不同电极反应进行实时监控, 并对相关反应机理进行了探究。本报告将通过以下三个具体实例, 从不同角度具体介绍 DEMS 原位池设计、数据分析与反应机理分析。(1) 在乙二醇电化学氧化中, 我们利用以 DEMS 为代表的多种谱学技术, 原位监控了电极杂质元素、电压、电解液 pH 值等对乙二醇电化学氧化反应多种副产物的影响。阐明了以直接-间接电化学氧化反应路径并构建了高效“二氧化碳还原-乙二醇氧化”配对电解反应体系。(2) 在中性二氧化碳电解中, 我们利用 NiOOH 作为辅助电极, 解耦阴阳极反应, 成功将氢气氧化与二氧化碳还原反应耦合。通过 DEMS 定量探究了辅助电极在不同条件下的副反应, 从而优化了电解条件, 降低了二氧化碳损失。相较于传统二氧化碳电解, 将整体能量效率提高了 42%。(3) 掺杂碳材料在高电位条件下的氧化严重制约了应用。然而, 由于碱性电解液对 CO_2 等酸性气体的强烈吸收作用, 碱性条件下碳材料的腐蚀行为一直是研究的难点。我们设计了一种差分电化学质谱膜进样原位池, 在对氮掺杂的碳材料研究中首次观察到掺杂氮元素在高电位下氧化成 NO 与 NO_2 , 确定了电压分辨的脱氮动力学, 结合 DFT 计算揭示了材料的电氧化路径, 并提出了有效的抑制策略。

A01-077

固体氧化物膜反应器的设计与应用

华斌摘要待定

A01-078

高温 CO_2 电还原的 Fe 基燃料极材料研究

郑益锋*

南京工业大学/苏州国家实验室

固体氧化物电解池 (SOEC) 是一种将电能和热能直接转化为化学能的全固态能量转换装置, 具有清洁无污染、能量转换效率高等特点。在工业生产中, SOEC 能利用清洁能源产生的电力及工业余热, 将 H_2O 和 CO_2 转化为 H_2 和 CO 等化学品储存起来, 实现碳中性循环, 对缓解能源危机和环境污染具有重要意义。SOEC 燃料极的催化性能对电池的整体电解性能至关重要, 传统 Ni 基金属陶瓷电极在电解 $\text{CO}_2/\text{H}_2\text{O}$ 时会发生 Ni 氧化、颗粒团聚和碳沉积等问题, 导致电池性能衰减。因此, 设计和研发高性能、抗积碳和高稳定的燃料极材料成为 SOEC 技术的研究热点。Fe 基 $\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{FeO}_{3-\delta}$ (LSF) 钙钛矿型材料因具有混合电子-离子电导和良好的氧化还原稳定性而成为极具潜力的燃料极材料。但是在 $\text{CO}_2\text{-CO}$ 气氛下, LSF 材料表面会发生 Sr 偏析并且结构不稳定。由于钙钛矿材料结构灵活, 能够通过离子掺杂或者原位析出的方法增加活性位点, 从而提高电极催化性能。本研究主要采用高价离子掺杂和电极表面重构的方法对 LSF 进行改性, 制备得到结构稳定且高催化活性电极材料并揭示性能增强机理。首先, 抑制 Sr 偏析和提高材料结构稳定性是改善 LSF 材料催化性能的关键, 通过 Fe 位掺杂高价元素, 研究了 Mo 掺杂对 LSF 燃料极性能的影响。

其次，为提高电极的抗积碳性能，设计了 A 位缺位和 B 位 Co、Nb 共掺的 $(\text{La}_{0.6}\text{Sr}_{0.4})_{0.9}\text{Fe}_{0.65}\text{Co}_{0.25}\text{Nb}_{0.1}\text{O}_{3-\delta}$ ($(\text{LS})_{0.9}\text{FCoNb}_{0.1}$) 材料，并通过电化学还原脱溶法在电极表面原位生成 Co 纳米颗粒，进一步提升电极的催化性能。最后，由于在 CO_2 还原反应过程中，电极反应动力学取决于限速步骤反应速率。通过高价离子掺杂调控 LSF 材料本征特性，结合阻抗弛豫时间分布 (DRT) 分析，分别研究了 LSF 基半电池和单电池上电化学过程的限速步骤，并揭示影响限速步骤的关键因素。本工作揭示了半电池和单电池电化学过程的差异，为提高电解 CO_2 性能提供了一种新思路。

A01-079

异质结构电催化剂的制备及其性能研究

张萧玉 浙江工业大学 浙江碳中和创新研究院

异质结构电催化剂因其独特的界面效应，在不同的电催化领域表现出优异的性能。本报告主要利用界面工程设计策略构筑高效异质结构电催化剂。例如，针对 Pd 基电催化剂由于对反应中间体 OH 吸附较弱而导致氢气氧化反应 (HOR) 性能差的问题，通过引入具有亲氧性的 Ir 作为助催化活性位点，构筑具有外延异质界面结构的 Ir@Pd 电催化剂。该催化剂的优异性能归因于异质界面对反应中间体 (H 和 OH) 的最佳吸附平衡能力；针对金属 Ru 容易氧化而导致催化失活的问题，设计富含高活性界面的缺电子型 Ru/RuO₂ 碱性 HOR 异质结构电催化剂。Ru(100)/RuO₂(200) 界面是实现快速碱性 HOR 反应动力学的催化区域。同时，界面处的 Ru 和 RuO₂ 分别作为吸附 H 和 OH 的活性位点，电子从金属 Ru 转移到 RuO₂ 上，导致缺电子金属 Ru 上的电子难以转移到吸附态含氧物种上。因此，界面处的金属 Ru 表现出优异的抗氧化性。富足的高活性 Ru-RuO₂ 界面提高了 Ru/RuO₂ 催化剂的 HOR 反应动力学和稳定性。该设计策略为开发高效电催化材料提供了可借鉴的设计思路。

A01-080

厦钨公司待定

A01-081

Design and Optimization of Two-Dimensional Catalysts for High-Performance Magnesium-Based Hydrogen Storage Materials

张刘挺

江苏科技大学

墙报

A01-P01

SOFC 氧化铈基阳极催化剂制备及其催化行为研究

庄奕¹，庞胜利*¹ 江苏大学，江苏镇江，212013

固体氧化物燃料电池 (SOFC) 因其高效、燃料灵活和环境友好等优势，成为清洁能源转换技术的研究热点。传统镍基阳极因易积碳和硫中毒失活，且高温运行导致材料性能不稳定，严重制约 SOFC 长期稳定性的发展。氧化铈因其优异的结构稳定性和抗积碳特性，被视为极具潜力的阳极材料基体。本研究采用了溶胶凝胶法和丝网印刷制备 SBCC 材料和 GDC-Cu，发现烧结后 Cu 元素进入了 GDC 基体中，将其研磨后在氮氢混合气中进行还原，发现还原后的材料中氧空位明显增加，且出现了 Gd₂O₃ 的偏析层。电化学分析结果表明，在 800°C 时，与 GDC-Ni 相比，GDC-Cu 的 ASR 值下降 56%，在 850°C 时，GDC-Cu 的最大功率密度 (0.49 W cm⁻²) 是 GDC-Ni (0.27 W cm⁻²) 的 1.7 倍。GDC-Cu 在 SOFC 实际工况条件下表现出优异的稳定性和抗氧化还原性能，在空气和氮氢混合气中切换电导率可达长时间稳定效果。

关键词：氧化铈基阳极催化剂；Cu 扩散；Gd₂O₃ 偏析层；工作稳定性

A01-P02

smuth Ferrite-Based Pero

A01-P03

二维 $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ 材料三维多孔框架的跨尺度可控组装及超级电容器性能研究

孙立*、董煜、操齐高

西北有色金属研究院

二维 $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ 因高导电性和丰富官能团在储能领域极具潜力，但其片层堆叠导致的传质限制问题亟待突破。本文通过软模板自组装技术制备了一种新型三维多孔 $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ 膜，有效地削弱了 $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ 纳米片的堆积，并分析软模板与 $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ 的作用规律，揭示模板疏水链段与 $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ 的疏水吸附及亲水链段氢键锚定机制。该材料具有明显的三维多孔结构，0.9-150 nm 孔径范围， $65 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ 的比表面积和 $0.19 \text{ cm}^3 \text{ g}^{-1}$ 的孔体积（相比于纯 $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ 膜提升了 7 倍），为离子扩散/电子传输提供稳定、高效的通道和更多的接触位点。因此，三维多孔 $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ 膜作为自支撑电极应用于超级电容器呈现 272 F g^{-1} 的重量电容， 5.62 F cm^{-3} 的体积电容，优异倍率性能（61.6%，从 0.5 到 30 A g^{-1} ），以及 10000 次循环后 99.2% 的容量保留率。这项工作将为性能优异的 MXenes 电极材料的开发提供设计思路，并为超级电容器电极材料性能的进一步优化提供反馈和理论指导。

A01-P04

Carbon-reinforced $\text{Ni}_3\text{S}_2/\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ MXene composite as an anode for superior-performance lithium-ion capacitors

A01-P05

后处理钝化 AgBiS_2 量子点提升太阳能电池开路电压

杨万鹏*

华中科技大学

AgBiS_2 胶体量子点因其高吸收系数（约 10^6 cm^{-1} ）和合适的带隙（约 1.1 eV），在光伏领域具有广阔的应用前景。但 AgBiS_2 胶体量子点太阳能电池的功率转换效率仍显著低于其他硫基量子点太阳能电池，例如杂化硫化铅（PbS）胶体量子点/有机太阳能电池（约 15%）以及铜锌锡硫硒（ $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{SXSe}_{1-x})_4$ ）太阳能电池（约 15%）。其中极低的开路电压（约 0.5V）已被确定是 AgBiS_2 胶体量子点作为吸收层的太阳能电池性能不佳的主要原因。先前针对溶液法制备的太阳能电池开展的研究中，通过温度依赖的电流-电压特性以及基于发光的方法得到的实验结果，进一步明确了由胶体量子点表面的高缺陷态密度所导致的非辐射复合是 AgBiS_2 胶体量子点太阳能电池开路电压损耗的主要原因。基于此，本文章提出了一种简便的量子点表面钝化技术，即先用碘化物对 AgBiS_2 胶体量子点进行表面配体交换，再采用卤化物进行后处理制备 AgBiS_2 量子点薄膜。这种后处理钝化 AgBiS_2 胶体量子点的技术，不仅能有效抑制质子溶剂侵蚀而造成的表面配体损失，而且能显著降低表面缺陷态密度。在使用氯离子后处理钝化 AgBiS_2 量子点太阳能电池光电转换效率达到 10.02%，其开路电压（VOC）显著提高至 0.581V，这是目前 AgBiS_2 量子点太阳能电池报道的最高输出电压。

A01-P06

Metal-organic ligand cooperation enables stable high-capacity vanadium-based cathodes for low-temperature zinc-ion batteries

Han Huang, Peng Sun, Wenjie Mai*

Jinan university

Aqueous zinc-ion batteries (AZIBs) represent a highly promising next-generation battery technology. Vanadium oxide-based cathodes have garnered significant attention due to their optimal working potential, high theoretical capacity, and rich electrochemical interactions with Zn^{2+} . However, while conventional metal ion intercalation enhances the structural stability of vanadium-based cathodes, it simultaneously increases the Zn^{2+} diffusion barrier within vanadium oxide interlayers. This study developed a one-step hydrothermal method to co-incorporate both metal ions and organic ligands into vanadium oxide. The metal ions act as structural pillars to

stabilize the framework, while the organic ligands effectively reduce Zn^{2+} diffusion barriers through electrostatic effects, leading to remarkable improvements in both capacity and low-temperature performance. The resulting metal-organic co-doped vanadium-based cathode demonstrates exceptional performance, delivering a high specific capacity of 314.4 mAh/g at room temperature with outstanding cycling stability (~88% capacity retention after 5300 cycles). Notably, it maintains a substantial capacity of 155.6 mAh/g at 3 A/g even under extreme conditions (-40 °C), showcasing its potential for practical applications in harsh environments.

A01-P07

双层异质聚离子液体凝胶电解质的合理设计用于具有超低自放电速率的柔性超级电容器

董珂以、陈涛*

同济大学

超级电容器具有高功率密度和长循环寿命等优点，但面临着自放电速率快的巨大挑战。在此，我们设计了一系列由不同阳离子和阴离子聚离子液体构筑的双层异质聚离子液体凝胶电解质，并以活性炭/碳纳米管为电极，构筑具有超低自放电速率的高性能柔性超级电容器。实验和模拟结果表明，双层异质聚离子液体的 Zeta 电位差随着阳离子聚离子液体烷基侧链长度的增加（乙基<丁基<己基）和抗衡阴离子体积的减小（双三氟甲烷磺酰亚胺根>六氟磷酸根>四氟硼酸根）而扩大，这表明阳离子聚合物骨架和抗衡阴离子之间的强相互作用能有效抑制电极表面吸附的离子扩散和再分布，从而赋予超级电容器超低的自放电率（-0.04 V h⁻¹）。此外，由于双层异质聚离子液体凝胶的界面稳定性，该超级电容器在弯折数千次后仍能保持优异的电化学性能。该策略为开发低自放电、高能量密度的柔性储能器件提供了新思路。

A01-P08

Cu_9S_5 -nanowires-pinned- WS_2 Sheets on Hollow Cubic Carbon for synergistic promotion in K-ion Battery Performance

Qingqing Huang, Liyun Cao*

Shaanxi University of Science and Technology

Tungsten disulfide (WS_2) presents a layered structure with a high theoretical capacity (433 mAh g⁻¹) in potassium-ion battery, making it a promising anode material. However, its kinetics is poor with limited practical capacity, it is still a challenge to design new structures to improve its kinetics. In this work, a hollow $\text{Cu}_9\text{S}_5/\text{C}/\text{WS}_2$ composite structure is designed. It is used as a potassium-ion batteries (PIBs) anode with high reversible capacity (406 mAh g⁻¹ after 150 cycles at 200 mA g⁻¹) and excellent rate performance (246 mAh g⁻¹ at 20 A g⁻¹). These results are attributed to its unique hollow composite structure, the WS_2 sheets are pinned on hollow cubic carbon by Cu_9S_5 nanowires. On the one hand, the introduction of Cu_9S_5 nanowires expands the layer spacing of WS_2 and forms a K^+ fast diffusion channel. On the other hand, hollow carbon and Cu_9S_5 nanowires form a fast electron transmission path, which improves the charge transport rate. Additionally, the use of hollow carbon and Cu_9S_5 nanowires as a framework enhances structural stability. The synergistic effect of these aspects finally realizes the fast and stable K^+ storage. This work provides a new insight into the design of high-performance potassium storage in layered metal sulfides.

A01-P09

Cu_9S_5 纳米线钉扎 WS_2 在中空碳上协同提升钾电性能

黄青青、曹丽云*

陕西科技大学

二硫化钨 (WS_2) 具有类石墨结构和高的理论容量 (433 mAh g⁻¹)，作为钾离子电池的负极材料具有很大潜力。但其动力学慢，实际展现的容量低，提高动力学和充分发挥理论容量仍是一个挑战。本工作设计了一种中空 $\text{Cu}_9\text{S}_5/\text{C}/\text{WS}_2$ 复合结构。将其作为钾离子电池负极，在 200 mA g⁻¹ 电流密度下循环 150 圈后，可逆容量为 406.2 mAh g⁻¹，在 20 A g⁻¹ 电流密度下，比容量为 246.3 mAh g⁻¹。这得益于其独特的结构。一方面 Cu_9S_5 的引入扩大了 WS_2 的层间距，形成了 K^+ 快速扩散通道。另一方面中空碳和 Cu_9S_5 细线形成了电子快速传导路径，提高了电荷传输速率。此外，中空碳和 Cu_9S_5 细线作为框架能提高结构稳定性。这几方

面结合，最终实现了快速稳定的 K^+ 存储。本研究为层状金属硫化物高性能储钾设计提供了新思路。

A01-P10

用于高性能应变传感器的 ZIF-67 中钴原子的重构和碳纳米管的低温原位生长

阳佳鑫、陈涛*

同济大学

碳纳米管 (CNTs) 因其独特的物理和化学性质在各个领域具有巨大的应用潜力，但其合成通常需要苛刻和复杂的条件，限制了大规模应用。为了解决这一问题，我们提出了一种基于沸石咪唑酯骨架材料 (ZIF-67) 的低温化学气相沉积法 (CVD)，用于高效合成碳纳米管 (CNTs)。通过溶液浸渍法将 ZIF-67 负载于玻璃、不锈钢等低成本基底后，在 500°C 氩气氛围中引入氢气与碳源，利用 ZIF-67 中钴 (Co) 原子的原位重构形成均匀纳米颗粒作为催化剂，同时 ZIF-67 热解生成石墨层结构，协同促进 CNTs 的成核与密集生长。与传统高温 CVD ($>750^\circ\text{C}$) 及复杂镀膜技术相比，该方法无需高能耗步骤，显著降低工艺复杂度与能耗，并实现 CNTs 在多种基底上的可控生长。基于此方法制备的 CNTs 网络构建的电阻式应变传感器表现出优异性能：可检测低至 0.4% 的微小应变，循环稳定性超过 3000 次，灵敏度较传统传感器提升显著。该方法为柔性电子器件与智能传感领域提供了低成本、高性能的 CNTs 材料解决方案。

A01-P011

原位热诱导纤维状介孔溴化铅骨架制备高性能 FAPbBr_3 钙钛矿太阳能电池

王润椿、张文华*、蔡冰

云南大学

提出了一种降前驱体工程和结晶控制相结合的新型顺序沉积策略，具体来说，用醋酸铅和溴化铵来代替传统的高纯度溴化铅，通过高温后处理得到具有纤维状介孔结构的具有优先取向的溴化铅骨架，并引入尿素作为添加剂来改善介孔结构的覆盖率及薄膜均匀性，最终有效提高铵盐的反应效率，改善 FAPbBr_3 钙钛矿的结晶，降低溴化铅的残留，钝化了缺陷，最终获得了 10.77% 的效率，是 FAPbBr_3 体系的最高效率之一。

A01-P012

一种高度可拉伸的微相分离离子凝胶电解质及全固态超级电容器

严泽丰、陈涛*

同济大学化学科学与工程学院

柔性可拉伸的凝胶基固态超级电容器是柔性储能器件领域极具应用潜力的材料，然而却往往因为其中的凝胶电解质较弱的机械强度而限制了发展。针对上述问题，我们通过设计微相分离结构开发了一种具有高强度和出色拉伸性的新型离子凝胶电解质并且用于可拉伸柔性超级电容器：该结构得益于离子液体的诱导而具有以聚 N-异丙基丙烯酰胺结晶聚合物为主的硬相和以聚丙烯酸为主的软相形成的微相分离结构，通过调控单体浓度及比例、交联剂含量使得聚合可在 2 分钟内快速完成，合成的离子凝胶断裂强度高达 11.73 MPa，断裂应变为 473%，韧性为 28.09 MJ m^{-3} 。所设计的全固态超级电容器以预拉伸后 (400%) 的离子凝胶体系为电解质，以活性炭涂覆的碳纳米管薄膜为电极展现出 228.1 mF cm^{-2} 的高电容，而且还表现出 5.8 MPa 的高拉伸强度和 456% 的拉伸应变。

A01-P013

Investigation of the Electrochemical Performance of Janus MoB as an Anode for Lithium-Ion Batteries via a Bifunctional Group Strategy

Wenbo Zhang*

Lanzhou University of Technology

With the continuous advancement of energy storage technologies and the growing demand for green, low-carbon policies, the pursuit of electrode materials combining fast charge/discharge capabilities and high safety has become a persistent research focus. Compared to bulk materials, two-dimensional (2D) materials exhibit higher surface-to-volume ratios, superior chemical activity, robust mechanical stability, and abundant ion diffusion/storage channels, demonstrating significant potential as electrode materials, as evidenced by numerous successfully synthesized prototypes. Among these, two-dimensional transition metal borides (MBenes) stand out

as a promising category. While MoB, a representative MBene, displays high specific capacity compared to graphite (372 mAh/g), its practical application in advanced energy storage systems is hindered by exposed metal atoms that degrade alkali metal ion adsorption. Surface functionalization with electronegative atoms has been identified as an effective strategy to optimize the electrochemical performance of MBene-based electrodes. To address these challenges, this work proposes an asymmetric Janus MoBXY (X/Y=O, S) configuration functionalized with dual groups. The Janus architecture introduces interfacial polarization while preserving structural merits, achieving dual optimization of surface charge redistribution and ion migration pathways. First-principles calculations reveal that functionalization not only significantly reduces Li⁺ diffusion barriers but also enhances specific capacity while maintaining a safe operational voltage range to suppress dendrite formation. These improvements are attributed to the Janus-induced redistribution of surface charges, which homogenizes the interaction between adsorbed atoms and the substrate, thereby stabilizing lithium ion adsorption. In summary, this study elucidates the energy storage mechanism of O/S-functionalized MBene electrodes at the atomic scale, establishing fundamental guidelines for MBene-based electrode design. The critical roles of surface functionalization in achieving high-rate capability and dendrite resistance are emphasized, thereby advancing the development of safe and efficient energy storage systems.

A01-P014

一种用于高性能可充电柔性锌空气电池的 CoO/NBC 双功能催化剂

孙全虎、陈涛*

同济大学

可充电柔性锌空气电池因其低成本、高安全性和高能量密度成为可穿戴产品中极具潜力的能源供应装置。然而，其电化学性能往往受限于空气电极反应动力学迟缓和聚合物电解质保湿性差。在此，我们设计了一种由双功能催化剂和高保湿性水凝胶电解质组成的高性能可充电柔性锌空气电池。负载氧化钴纳米颗粒的氮硼共掺杂碳纳米管具有优异的电催化活性，组装的可充电锌空气电池表现出 1.44 V 的开路电压和 920.0 Wh kg⁻¹ 的能量密度，优于大多数已报道的非贵金属催化剂。同时，基于高保湿性的海藻糖改性聚丙烯酰胺水凝胶电解质构建的柔性锌空气电池不仅表现出优异的电化学性能（1.39 V 和 824.8 Wh kg⁻¹），而且经过 400 次充电/放电循环或弯曲任何角度的情况下也表现出优异的稳定性。

A01-P015

乙酸溶液对硼氢化镁水解析氢性能的调控

姚雨含^{1,2}、张焱*¹、于静²、王君²、甘子钊¹

1. 北京大学 物理学院新能源转化实验室

2. 哈尔滨工程大学 材料科学与化学工程学院海洋资源与环境化工研究所

硼氢化镁（Mg(BH₄)₂）作为一种储氢密度达到 14.9 wt% 的金属硼氢化物，通过水解析氢方式可放出约 30 wt% 的氢气，被认为是在便携式制氢领域具有发展前景的固态储氢材料之一。Mg(BH₄)₂ 的水解过程在无催化剂情况下，具有反应速率快、效率高、析氢纯度高优点，但析氢量仍然与理论值存在一定差距。已有研究报道用酸作添加剂可显著改善固态储氢材料的水解性能（如 NaBH₄、MgH₂），但目前尚无研究表明酸对 Mg(BH₄)₂ 水解反应的影响。本研究将乙酸作为催化剂引入到 Mg(BH₄)₂ 的水解析氢反应中，探究乙酸浓度、溶液注液量及注液速率对于 Mg(BH₄)₂ 水解析氢性能的影响，从而对硼氢化镁的氢气生成速率进行调控并提升其水解析氢量，揭示 Mg(BH₄)₂ 与乙酸溶液的反应机理，为 Mg(BH₄)₂ 的水解析氢性能优化提供了新的思路。

A01-P016

Ni 调控镁基材料储制氢行为的第一性原理研究

石睿¹、刘江川²、朱云峰*¹、刘雅娜¹、张纪光¹

1. 南京工业大学

2. 常州大学

催化改性是改善 Mg 储氢/制氢性能的有效手段，尤其是金属 Ni 被认为是最有效的催化元素之一。大

量研究发现将 Ni 与其他材料复合会产生所谓的"协同效应"。然而,催化机理的理解受困于缺乏 Ni 催化行为与储/制氢反应的联系性、明确多活性中心具体的催化作用有一定难度、以及 Ni 与不同成分结构的材料组合产生的协同增强行为不同,导致明确 Ni 复合催化剂的协同机制具有一定的难度。针对上述问题,本团队基于第一性原理计算(DFT)明确制约 Mg 储氢/制氢性能的具体能垒步骤,阐明 Ni 对能垒步骤的改性机制。对于 Mg 吸氢反应,氢分子的解离是最主要的能垒步骤,将 Ni 固定在 Mg 表面且保持单质状态对降低氢分子的解离能垒更为有效。对于 Mg 脱氢反应,Mg-H 键强度过高导致脱氢反应能垒高,掺杂 Ni/Mg₂Ni 可以有效降低这一强度。MgH₂ 中的氢原子倾向于通过晶界扩散至 Mg₂Ni 中,并以低能垒方式脱出,这为 Mg₂Ni 作为低能垒反应途径提供理论依据。氢的扩散能垒仅影响氢化反应后期或脱氢反应初期过程,掺杂 Ni 原子可以有效降低这一能垒。对于 Mg 水解反应,Mg 与质子的电子转移是最主要的控速步骤。Mg(OH)₂ 的阻碍主要在于其绝缘特性抑制电子传递。Ni 能作为 Mg 电子的承接位点并直接供质子在其表面耦合。此外, Ni 与 Mg(OH)₂ 自发形成的内建电场能减弱其对电子流动的阻碍。以上能垒步骤以及催化位点对氢反应行为的探索,为后续开发高活性镁基储制氢材料催化剂提供了一定的理论指导。

A01-P017

一种强配位电解质衍生的具有双层 SEI 界面的钙金属负极

林慧君¹、徐正龙^{*1,2}

1. 香港理工大学工业系统工程系

2. 超精密加工技术国家重点实验室(香港理工大学)

钙金属电池(CMBs)被认为是潜在的高能量和低成本的商业锂离子电池的替代品,因此吸引了巨大的研究兴趣在储能应用。然而,开发 CMBs 的主要挑战是 Ca 金属负极材料在非质子电解质中的不可逆性,这主要源于 Ca 金属负极上离子阻断的固体电解质界面(SEI)。尽管在一些新型电解质中,钙金属负极可以实现了室温下可逆的金属钙剥离和电镀,但循环寿命还远远不能令人满意,可以使 Ca 金属负极进行数千次循环的策略仍然无法获得实现。

在本研究中,我们通过在 Ca[B(hfip)₄]₂/DME 溶液中加入添加剂 LiB(hfip)₄, 获得了体积较大的氟化烷氧硼酸盐阴离子介导电解质。该添加剂通过加强 Ca-DME 相互作用,促进含硼酸物质的分解来调节配位结构。XPS、TOF-MS 和 TEM 观察证实,CaH₂ 和 CaB₂O₄ 纳米颗粒均匀分散在钙金属负极富有机质的外层下,形成有机(外)-无机(内)双层 SEI,有利于钙离子迁移,防止电解质进一步分解。因此,我们实现了在 2 mA/cm² 的高电流密度和 1 mAh/cm² 的面积容量下,超过 1450 小时的稳定钙金属负极电镀/剥离循环。重要的是,这种金属负极界面的有效性在 Ca//聚苯胺(PANI)全电池中得到了证明,能量密度超过 200 Wh/kg,循环寿命超过 200 圈。这种钙金属负极界面的开发不仅促进了对电解质设计和 SEI 形成的理解,而且为开发稳定和高性能的 Ca 金属可充电电池开辟了新的途径。

A01-P018

构建铌酸银基反铁电体局部异质结构: 实现优异的抗疲劳与储能性能

郇帅兵¹、张清风^{*2}

1. 西安电子科技大学

2. 湖北大学

铌酸银(AgNbO₃)陶瓷因其独特的场致反铁电(AFE)-铁电(FE)相变行为及优异的环境友好性,已成为开发高性能介电电容器的重要候选材料。然而,迄今为止,同时实现高可恢复储能密度(W_{rec})、高储能效率(η)及卓越的电疲劳抗性仍然具有挑战性。本研究提出一种异价掺杂诱导的区域结构异质化策略,成功构筑兼具优异抗疲劳特性与储能特性的 AgNbO₃ 基陶瓷。通过高价态 Sm³⁺取代 A 位 Ag⁺以及低电负性 Ta⁵⁺替代 B 位 Nb⁵⁺,显著降低了[Nb/TaO₆]八面体倾角,破坏反铁电纳米畴的长程有序性并形成低原子位移区域(原子尺度电镜观测证实)。上述结构演变有效优化了反铁电特性,细化了电滞回线并降低电场诱导应变,最终在(Ag_{0.94}Sm_{0.02})(Nb_{0.75}Ta_{0.25})O₃ 陶瓷中获得 8.03 J/cm³ 的超高储能密度和 74.77% 的储能效率。尤为重要的是,该材料在 106 次循环后储能密度与储能效率的波动幅度均小于 2.6%,其抗疲劳特性显著优于迄今仅实现 104 次循环稳定性的其他铌酸银体系。

A01-P019

原位调控活性位配位场用于高效氧还原及其反应机制

张静¹、刘美欢^{1,2}、苏徽³、蒋亚铃¹、周婉琳¹、杨晨宇¹、薄烁文¹、潘军²、刘庆华^{*1}

1. 中国科学技术大学

2. 中南大学

3. 湖南师范大学

具有四氮配位的金属原子 ($M-N_4$) 基团的单原子催化剂, 在电催化氧还原反应 (ORR) 方面具有良好的应用前景, 但由于 $M-N_4$ 基团中电子的对称分布, 导致中间体的吸附强度不理想, 限制了其性能的提高。本工作通过简单的两步热解策略, 成功地在氮掺杂碳纳米片中制备了配位可调的单原子 Co 基催化剂, 通过引入轴向 Cl 配位形成了 Cl-Co- N_4 基团, 成功地打破了 $M-N_4$ 电子局域对称性, 实现了局域电四极跃迁 ($1s$ 到 $3d$ 跃迁) 和局域电偶极跃迁 ($1s$ 到 $2p$ 跃迁)。原位表征技术揭示在氧还原过程中 Cl-Co- N_4 在反应初期动态释放两个 N 配位, 形成不饱和 Cl-Co- N_2 结构, 促使 Co 位点 $3d$ 电子填充向低 d 带电子占位转变 ($d^{5.8} \rightarrow d^{5.28}$), 从而促进 O-O 键的断裂, 有效地提高了氧还原反应活性和选择性。

A01-P020

稀土元素 Y 添加调控氧强化 V_{40} 储氢合金性能及机制研究张昱晨¹、吴朝玲^{*1,2,3}

1. 四川大学材料科学与工程学院

2. 四川大学深地工程智能建造与健康运维全国重点实验室

3. 后续能源材料与器件教育部工程研究中心

钒基 BCC 固溶体合金因其高储氢容量 (~ 3.9 wt%)、适宜的平台压力区间 ($0.1 \sim 5$ MPa)、优异的循环稳定性及室温快速脱附/吸附动力学特性, 被视为极具前景的储氢材料体系[1]。然而, 基于成本控制选用的 FeV80、海绵钛等原料易引入氧残留, 诱发合金中毒效应, 恶化合金储氢性能, 制约其实际应用效能[2]。为突破此瓶颈, 本研究引入高亲氧性稀土金属作为除氧剂, 稀土元素通过选择性氧结合形成稳定氧化物, 同时避免固溶于 BCC 主相, 实现合金熔炼过程的原位脱氧[3, 4]。该策略有效抑制氧致二相偏析, 促进合金显微组织均质化。此外, 稀土氧化物在合金晶界重构可形成氢扩散通道网络, 双向促进吸/脱氢动力学过程。

本工作系统调控钇 (Y) 掺杂浓度, 设计系列 $V_{40}(\text{TiCrFe})_{60}$ 储氢合金, 并对比稀土元素镧 (La) 和铈 (Ce) 改性效应, 旨在揭示稀土元素对于 V_{40} 储氢合金微观结构演化与储氢性能的作用机制。研究表明, 2 at%Y 掺杂显著降低合金氧含量至 < 0.1 wt%, 有效抑制 Ti-rich 第二相析出, 使合金在 $0^\circ\text{C}/8$ MPa 条件下达到 3.9 wt% 的饱和吸氢量, 50°C 可逆放氢容量提升至 2.8 wt%。然而, 随 Y 含量增加, Y 相体积分数上升导致 BCC 主相占比降低, 引发储氢性能衰减。对比研究发现, La 改性合金虽展现优异可逆容量 (2.7 wt%), 但 LaH_3 第二相的形成引发成分偏析, 导致储氢平台倾斜; Ce 改性合金虽成分分布均匀且动力学性能提升, 但 Ce 原子过大的晶格参数诱发严重晶格畸变, 使可逆容量降至 2.4 wt%。循环稳定性测试表明, 2 at%Y 改性合金经 100 次吸脱氢循环后容量保持率达 89.2%, 可逆容量 > 2.5 wt%, 显著优于未加 Y 基体合金 (79.4%)、加 La (81.5%) 及加 Ce 合金 (85.3%)。

A01-P021

高性能碳纸的制备及其在燃料电池中的应用

徐骏凯¹、吕志龙^{2,3}、陈辉²、沈志刚²、李光^{*1}

1. 东华大学先进纤维材料全国重点实验室 东华大学材料科学与工程学院

2. 中石化 (上海) 石油化工研究院有限公司

3. 碳纤维及功能高分子教育部重点实验室 北京化工大学

质子交换膜燃料电池 (PEMFC) 是通过氢气和空气中氧气在两个电极发生氧化还原反应将化学能转化为电能的完全清洁的能源转换装置, 其中气体扩散层 (GDL) 作为 PEMFC 中关键部件对电池性能有至关重要的影响。碳纸凭借其丰富的孔隙结构、优良的导电性和足够的机械强度被广泛用于 GDL 的基底材料。本文采用湿法成型, 通过使用两种长度 (10 mm 和 3 mm) 的短切碳纤维混合抄纸, 制备了高性能碳纸, 研究了两种长度碳纤维不同比例对碳纸性能的影响。结果表明, 10 mm 长度碳纤维加入量为 30-50 wt% 时,

碳纸的综合性能优良，表现出较高的孔隙率、透气性能、导电性与力学强度。由 10 mm 长度碳纤维含量为 30 wt% 的碳纸组装的膜电极在 60% RH 下最大功率密度达到 1473 mW cm^{-2} ，高于商业碳纸（东丽）对应膜电极的性能。电化学阻抗谱（EIS）结果表明由合适比例两种长度碳纤维制备的碳纸具有更低的传质阻抗。表明基于短碳纤维优良分散性和长碳纤维搭建的高孔隙结构和力学性能能够实现碳纸抄造过程各性能间的平衡，满足作为 GDL 材料的要求。

A01-P022

Failure mechanism of $\text{LiMn}_{0.6}\text{Fe}_{0.4}\text{PO}_4$ cathode material under overcharging

Xuan Cao*

Tianjin University of Technology

Overcharging is a key factor inducing battery performance degradation or even thermal runaway fire. Lithium manganese iron phosphate ($\text{LiMn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{PO}_4$, $0 < x < 1$, LMFP), as an optimised material for commercial Lithium manganese iron phosphate (LiFePO_4 , LFP), combines the advantages of stability, cheapness, environmental friendliness, high operating voltage [4.1 V (vs Li^+/Li)] and high energy density, and has a promising prospect for commercial use. However, the study of the failure mechanism of this material under overcharging conditions is still unclear. Here, we performed overcharging tests on cathodes prepared from commercial lithium manganese iron phosphate ($\text{LiMn}_{0.6}\text{Fe}_{0.4}\text{PO}_4$), and found that an irreversible phase transition surface phase appeared on the surface of the particles by the HADDF-STEM characterisation method, in which Mn was dissolved and occupied O1 and Li sites, which had an impediment effect on lithium ion transport and caused an increase in the interfacial impedance.

A01-P023

Cation Exchange-Driven Grain Boundary-Rich Nanorings as Efficient CO_2 Reduction Electrocatalysts

Tianyi Gao, Honghao Huang, Fei Zhang, Yutong Luo, Kangrui Sun, Fei Wang, Fang Fang, Yang Liu*

Fudan University

Electrochemical CO_2 reduction reaction (CO_2RR) to formate offers a sustainable pathway for carbon-neutral fuel production, yet achieving high selectivity and activity remains challenging due to competing hydrogen evolution. While grain boundaries (GBs) enhance catalytic performance, the impact of GB density, uniformity, and twisting angles remains unclear. Here, we engineer SnS nanoplates with high-density GBs via cation exchange (CE), preserving sulfur frameworks while inducing strain-driven domain segmentation. The GB-SnS catalyst achieves a formate Faradaic efficiency (FE) of 98.9% at -1.0 VRHE with a high current density of 204.6 mA cm^{-2} at -1.2 VRHE , surpassing single-crystalline SnS by 3.5-fold. In-situ spectroscopy and DFT reveal high-angle GBs lower $^*\text{OCHO}$ stabilization barriers while suppressing $^*\text{H}$ adsorption. Counterintuitively, small-angle GBs raise the $^*\text{OCHO}$ barrier, impairing CO_2RR —a finding that challenges the assumption that all GBs benefit catalysis. DFT further predicts out-of-plane rotational GBs similarly enhance stabilization, guiding future 3D defect engineering. The catalyst demonstrates industrial viability in a membrane electrode assembly (MEA), sustaining $>80\%$ FE at 200 mA cm^{-2} for 150 h. Statistical analysis of >200 GBs correlates twisting angles with adsorption strength, establishing an angle-dependent design principle. This work decouples geometric/electronic GB effects and pioneers solution-phase CE for scalable defect-rich catalysts, advancing sustainable CO_2 utilization.

A01-P024

Enhanced performance of medium-temperature solid oxide fuel cells using $\text{CaSnO}_3\text{-ZnO}$ heterostructure as electrolyte

Xinyu Feng*

Guilin University of Technology

The advancement of novel heterostructure electrolytes and the enhancement of solid oxide fuel cell (SOFC) performance represent a promising strategy for developing medium-temperature SOFCs. This study focuses on

synthesizing CaSnO₃ via the sol-gel technique and fabricating CaSnO₃-ZnO composites to serve as electrolytes for medium-temperature SOFCs. At 550 °C, the 2Ca⁻⁸ Zn composite demonstrated an ionic conductivity of 0.204 S cm⁻¹, a peak power density of 700 mW cm⁻², and intermittent durability lasting up to 24 h under identical thermal conditions. Upon further investigation of the energy band structure, it has been revealed that CaSnO₃-ZnO composites are promising candidates for serving as electrolytes in medium-temperature SOFCs. The findings indicate that the combination of calcium and zinc oxides can form n-n heterojunctions within the material, which enhance ionic conductivity by creating space charge regions, while simultaneously suppressing electronic conductivity. Consequently, CaSnO₃-ZnO nanocomposites are anticipated to pave the way for advancements in intermediate-temperature solid oxide fuel cells.

A01-P025

Research on the performance of Zr-doped pyrochlore-structured Co₂Sb₂O₇ electrocatalysts for oxygen evolution reaction.

Hanzhen Liu*

Guilin University of Technology

The oxygen evolution reaction (OER) constitutes a pivotal step in numerous energy conversion and storage systems. The strategic advancement of economical, efficient, and resilient catalysts for the anode OER represents one of the pressing bottlenecks hindering their scalable implementation. Experimental results demonstrated that the synergistic effect of Zr doping and the Co₂Sb₂O₇ pyrochlore structure increased the oxygen vacancy content and significantly enhanced the catalytic activity. Thus, the appropriate proportion of Zr (only x=0.1) doped Co₂Sb₂O₇ pyrochlore structure exhibited excellent OER performance, reaching 10 mA cm⁻² at an overpotential of only 210 mV in 0.5 M H₂SO₄ and at an overpotential of only 216 mV in 1 M KOH solution. The catalyst operated stably for 60 h at 1 mA cm⁻² in 0.5 M H₂SO₄ and also operated stably for 60 hours at 10 mA cm⁻² in 1 M KOH. This study offers a promising outlook for reducing the energy consumption of noble metal catalysts used in acidic OER processes in practical electrochemical industries.

A01-P026

用于创新性 CO₂/H₂ 固体氧化物燃料电池的 CO₂ 还原 CuxNiy/CeO₂ 催化剂

林轩宇*

桂林理工大学

二氧化碳 (CO₂) 作为一种丰富的碳源, 为增值化学品的合成提供了可持续的原料选择。电催化转化是实现 CO₂资源化利用的有效途径之一, 但受限于 CO₂分子的高稳定性, 其活化通常需要较高的能量输入。本研究开发了一种创新的中温固态 CO₂/H₂燃料电池系统, 在 400–700°C的工作温度下, 无需外部电能即可实现高效电化学 CO₂还原。实验结果表明, 该电池在 570°C下可实现 686 A·m⁻²的电流密度与 98.8 W·m⁻²的功率密度, 并展现出优异的 CO₂还原性能, CO 生成速率达 140.026 μmol·gcat⁻¹·h⁻¹。该系统兼具热电联产 (CHP) 兼容性, 能够同步实现 CO₂转化与能量回收, 为可持续能源利用与碳减排提供了新的技术路径。

A01-P027

基于生物模板法制备高烧结活性 SDC 纳米粉体及其电性能研究

孙国梁^{1,2}、孙小明^{3,4}、张印^{3,4}、马宏^{*3}、张伟刚^{1,2,3,4}

1. 中国科学院赣江创新研究院

2. 中国科学技术大学稀土学院

3. 中国科学院过程工程研究所

4. 中国科学院大学化学工程学院

钐掺杂氧化锆 (SDC, Ce_{1-x}Sm_xO_{2-x/2}, x = 0.1-0.2) 因其优异的中温离子电导率, 被视为中温固体氧化物燃料电池 (IT-SOFC) 的理想电解质材料。然而, 高致密化温度 (>1400 °C) 限制了实际应用, 亟需开发工艺简单且环境友好的高烧结活性纳米 SDC 粉体制备方法。本研究以蔗糖和葡聚糖为生物模板, 通过生物模板法成功合成了小粒径、高烧结活性和高离子电导率的 SDC 纳米粉体, 并将制备时间缩短至 30 h 以内。

结合热重分析 (TG)、X 射线衍射 (XRD)、扫描电子显微镜 (SEM)、傅里叶变换红外光谱 (FT-IR)、能谱分析 (EDS) 和电化学阻抗谱 (EIS) 等表征手段, 系统研究了模板类型、煅烧温度及烧结温度对 SDC 粉体烧结活性与电导率的影响。结果表明: 不同模板制备的 SDC 粉体粒径相近, 800 °C 煅烧 12 h, 蔗糖模板粉体平均粒径为 27.8 nm, 葡聚糖模板为 27.0 nm; 但是模板材料对粉体烧结活性产生显著影响, 蔗糖模板粉体在 1300 °C 烧结密度达 96%, 显著优于葡聚糖模板 (86%); 此外, 蔗糖模板粉体在 1350 °C 烧结获得电导率最大值 ($\sigma_{600} = 0.015 \text{ S/cm}$), 较 1300 °C (0.013 S/cm) 和 1400 °C (0.010 S/cm) 分别提升 19.7% 和 47.6%。低温烧结因高比例晶界的缺陷富集降低离子迁移率, 而高温烧结则诱发钇元素偏析, 导致电导率下降。研究表明, 不同模板材料通过调控粉体离子混合均匀性显著影响烧结活性。尽管低温烧结可实现致密化, 进一步优化烧结温度而获得最佳电导率至关重要。本研究提供了一种绿色、高效的 SDC 纳米粉体制备策略, 为 IT-SOFC 电解质的开发与应用奠定理论与技术基础。

A01-P028

MOF-74 在不同温度下衍生钴镍氧化物的微观结构 及其电化学性能研究

吕宁杰、陈志强*

武汉大学

超级电容器作为一类新型能源转化存储元件, 在能源需求迫切增长的今天备受瞩目, 而电极材料的研究则对超级电容器最终性能起着至关重要的作用。在本工作中, 我们将合成的 Ni/Co-MOF-74 在不同温度下退火氧化, 得到衍生的镍钴双金属氧化物。在 300 °C 形成的 Ni/Co-MOF-74 衍生物, 由于具有较好的微孔-介孔分布和较大的比表面积, 其比容量最大, 为 1274 F g^{-1} 。相比之下, 原始 Ni/Co-MOF-74 电极的比电容值仅为 880 F g^{-1} 。此外, 以 MOF-74 衍生的镍钴双金属氧化物为正极材料, 多孔活性炭 (商用 AC) 为负极材料组装一种有前景的非对称超级电容器 (ASC)。该器件在电流密度为 1 A g^{-1} 时的比电容为 113 F g^{-1} , 在功率密度为 801 Wh kg^{-1} 时的比能量密度为 40 W kg^{-1} 。它还具有出色的循环稳定性, 在 5 A g^{-1} 电流密度下连续 4,000 次充放电循环后, 比电容保持率为 64%。最后, 连接两个全固态非对称超级电容器可为多种发光二极管 (LED) 供电。结果表明, Ni/Co-MOF-74 衍生的钴镍氧化物具有很大的储能应用潜力。

A01-P029

电化学诱导 Ru/CoOOH 协同催化剂作为碱性整体水分解双功能电极材料

安子骥*

西安电子科技大学

用于析氧和析氢反应的基于过渡金属氧化物的高效且价格实惠的双功能电催化剂具有平衡的效率, 但控制其活性和耐久性仍然是一个重大挑战。在此, 通过电化学诱导策略合理设计了负载在泡沫镍 (Ru/CoOOH@NF) 表面的微量 Ru (0.74 wt.%) 装饰的超薄 CoOOH 纳米片 (约 4 nm), 以有效驱动碱性整体的电解。水分解。所合成的 Ru/CoOOH@NF 电催化剂综合了大量不同的 HER (Ru 纳米团簇) 和 OER (CoOOH 纳米片) 活性位点的优点以及强大的合适结构稳定性, 从而表现出优异的催化活性。特别地, 实现了 HER (36 mV) 和 OER (264 mV) 的超低过电势以实现 10 mA cm^{-2} 。实验和理论计算还表明, Ru/CoOOH@NF 具有高本征电导率, 有利于 H_2O 和 H-OH 键断裂中的电子释放, 并通过调节电荷分布加速电子/质量转移。这项作为大规模水分解技术的低成本、高活性双功能电催化剂的合理设计提供了新途径, 并有望为各种混合电催化剂的创建做出贡献。

A01-P030

Electrochemically Induced Ru/CoOOH Synergistic Catalyst as Bifunctional Electrode Materials for Alkaline Overall Water Splitting

Electrochemically Induced Ru/CoOOH Synergistic Catalyst as Bifunctional Electrode Materials for Alkaline Overall Water Splitting

Ziqi An, Zhendian Li, Yuan Ha*

Xidian University

Efficient and affordable price bifunctional electrocatalysts based on transition metal oxides for oxygen and hydrogen evolution reactions have a balanced efficiency, but it remains a significant challenge to control their

activity and durability. Herein, a trace Ru (0.74 wt.%) decorated ultrathin CoOOH nanosheets (≈ 4 nm) supported on the surface of nickel foam (Ru/CoOOH@NF) is rationally designed via an electrochemically induced strategy to effectively drive the electrolysis of alkaline overall water splitting. The as-synthesized Ru/CoOOH@NF electrocatalysts integrate the advantages of a large number of different HER (Ru nanoclusters) and OER (CoOOH nanosheets) active sites as well as strong in-suit structure stability, thereby exhibiting exceptional catalytic activity. In particular, the ultra-low overpotential of the HER (36 mV) and the OER (264 mV) are implemented to achieve 10 mA cm^{-2} . Experimental and theoretical calculations also reveal that Ru/CoOOH@NF possesses high intrinsic conductivity, which facilitates electron release from H_2O and H-OH bond breakage and accelerates electron/mass transfer by regulating the charge distribution. This work provides a new avenue for the rational design of low-cost and high-activity bifunctional electrocatalysts for large-scale water-splitting technology and expects to help contribute to the creation of various hybrid electrocatalysts.

A01-P031

Interface engineering of NiMo-based electrocatalysts for high-current-density seawater electrolysis

Fei Yu, Xin Kang, Bilu Liu*

Tsinghua Shenzhen International Graduate School

Hydrogen energy is a promising renewable resource which shows many advantages, such as high energy density and clean combustion products. Among various hydrogen production technologies, water electrolysis which can be compactly combined with renewable energy systems has broad prospects. In addition, seawater electrolysis technology can solve the problems of shortage and uneven regional distribution of fresh water resources. However, water electrocatalysts at high-current-density face challenges from different interfaces (catalyst-gas, catalyst-electrolyte, catalyst-substrate interfaces), such as limited mass transfer, low electron transfer and weak mechanical strength, results in high overpotential and low stability. Chlorine ions as interface result in low selectivity of seawater electrolysis. This poster will introduce our recent review about interface engineering of water electrolysis at high-current-density. Based on this, we design a corrosion-resistant NiMo-based electrocatalyst in seawater electrolysis, and finally we will introduce its application in industrial-level anion exchange membrane seawater electrolyzer.

A01-P032

高温导电复相陶瓷材料的合成与研究

张印^{1,2}、孙小明^{*1,2}、马宏²、孙国梁^{3,4}、张伟刚^{1,2,3,4}

1. 中国科学院大学化学工程学院
2. 中国科学院过程工程研究所
3. 中国科学技术大学稀土学院
4. 中国科学院赣江创新研究院

固体氧化物燃料电池 (SOFC) 连接体需兼具高温导电性、高化学和物理稳定性、高致密性、轻量化、可加工性等一系列要求。针对 SOFC 连接体研究现状, 本研究设计并制备了 LaB_6 改性 TiB_2 -hBN 基复相陶瓷及其 LaB_6 -hBN/ TiB_2 -hBN/ LaB_6 -hBN 分层复合材料。通过放电等离子烧结 (SPS) 技术, 合成含有不同体积分数的 LaB_6 的三元陶瓷体系, 并构建了 LaB_6 -hBN/ TiB_2 -hBN/ LaB_6 -hBN 分层结构材料。采用 XRD、SEM、EDS、高温原位电阻率等表征手段系统研究了材料氧化与导电性能。结果表明: 添加 10% LaB_6 的样品经 600°C 、48 h 氧化后, 高温 (600°C) 电导率达到 4.179 S/cm , 且表面未形成连续氧化层, 仅生成点状分布的 TiO_2 和微量 LaBO_3 ; 分层复合材料在 600°C 不同时长氧化后, 室温电阻率与氧化前相比基本无变化, 高温 (600°C) 电导率达 3.340 S/cm (氧化 48 h)。此外, 材料抗压强度随氧化时间显著提升, 从 246 MPa (未氧化时) 增加 475 MPa (氧化 100 h)。分析表明, LaB_6 的高温稳定性是保证高温导电性的关键, 而分层设计通过将抗氧化物质集中分配在导电通路的关键部位, 从而优化了整体导电性能。本研究为 SOFC 连接体材料的设计提供了理论和实践依据, 证实了 LaB_6 在高温导电抗氧化复合材料中的关键作用。

A01-P033

微量添加剂调控无负极钠金属电池界面稳定性的研究

杨恩典、王一菁*

南开大学化学学院

钠金属资源丰富并且具有较高的理论比容量 (1168 mAh/g) 和较低的电化学电位 (-2.71V vs. SHE)，被认为是最具前景的钠电池负极材料。然而实现钠金属负极的加工生产并非易事，并且存在一定的危险性，限制了钠金属电池的规模化生产。无负极钠金属电池由于具有高安全性、制造工艺简单和高能量密度等优点，在大规模储能系统和军事领域具有广阔的应用前景。但是，无负极钠金属电池也面临着诸多挑战：活性钠有限、固体电解质界面 (SEI) 不稳定和钠枝晶生长等问题使得钠沉积/剥离的库伦效率较差，进而导致电池循环寿命较短，不利于无负极钠金属电池的进一步应用。

基于无负极钠金属电池所存在的问题，我们提出了引入微量添加剂的策略来调控无负极钠金属电池界面的稳定性。分子动力学计算和核磁共振谱结果表明添加剂分子不直接参与钠离子的溶剂化结构，而是会对内层溶剂化结构产生一定的扰动，提高钠离子的传输速度。电化学测试和理论计算结果表明与二乙二醇二甲醚分子 (G2) 相比，添加剂分子会优先吸附在钠金属表面，促进钠金属的均匀沉积。此外，引入的添加剂分子能调控 SEI 成分，形成富含 NaF 的 SEI，实现钠的可逆均匀沉积/剥离。基于所设计的电解液所构筑的磷酸钒钠 (NVP) || Al@C 无负极钠金属电池循环 600 圈仍然具有 78% 的容量保持率。展示出优异的循环性能。同时，我们将添加剂引入到不同的商业化电解液体系中，电化学测试结果表明，加入添加剂之后，均能够有效的改善磷酸钒钠 (NVP) || Al@C 无负极钠金属电池的循环寿命，证明了我们所提出的策略具有一定的普适性。该策略也为未来高能量密度可充电金属电池的发展提供了新的方向。

A01-P034

A host potassiophilicity strategy for unprecedentedly stable and safe K metal batteries

Zhibin Li, Liang Ma*

Jinan University

Creating high-performance host materials for potassium (K) metal anodes remains a significant challenge due to the complex preparation process and poor K reversibility. In our work, we developed a potassiophilicity strategy using an oxygen-modified carbon cloth (O-CC) network as a host for K metal anodes. The O-CC network exhibited superior potassiophilic ability, and this improvement was also observed in other carbon hosts using the same process. The oxygen-induced epoxy group in the carbon network regulates interface electrons and enables strong binding of K adatoms through orbital hybridization, resulting in fewer side reactions with the electrolyte and promoting K-ion desolvation and uniform deposition. These factors result in unprecedented stability of the carbon network host, with a long lifespan of over 5500 hours at $0.5\text{ mA cm}^{-2}/0.5\text{ mA h cm}^{-2}$ and 3500 h at $1\text{ mA cm}^{-2}/0.5\text{ mA h cm}^{-2}$ in symmetric cells for K metal anodes, surpassing the cycle life of all previously reported K metal anodes. Furthermore, a high average coulombic efficiency of over 99.3% is demonstrated in OCC//K cells during 210 cycles. The O-CC also exhibited a stable electrochemical performance, with a capacity retention of 73.3% in full cells coupled with a perylene-3,4,9,10-tetracarboxylic dianhydride cathode. We believe that this new strategy holds great promise for metal anodes in battery applications.

A01-P035

磷酸铵表面改性对无钴富锂锰基正极材料的性能影响

朱思红¹、高明霞^{*1}、潘洪革²、孙文平¹、张欣¹

1. 浙江大学

2. 西安工业大学

层状富锂锰基氧化物 (LLO) 正极材料比容量高，是理想的锂离子电池正极材料。但其循环过程中晶格氧流失和结构相变等现象，会造成明显的电化学衰减行为，其本征电子电导率低导致了差的动力学性能。因此，提高富锂锰氧化物正极材料性能的关键在于抑制其在循环过程中氧气释放，稳定其表面结构，并改善其动力学性能。本文选取低成本的无钴 $\text{Li}_{1.2}\text{Mn}_{0.6}\text{Ni}_{0.2}\text{O}_2$ 为研究对象，针对以上问题，通过表/界改性策略和体相结构改性策略对其进行改性，并研究其改性机理。首先，使用表面改性的方式对材料进行优

化。采用磷钼酸铵为改性剂通过简单的处理，在无钴富锂锰氧化物 ($\text{Li}_{1.2}\text{Ni}_{0.2}\text{Mn}_{0.6}\text{O}_2$) 材料表面生成了包覆层和氧空位的复合表面结构。复合结构作为保护层，减少了氧释放、过渡金属溶出和界面副反应，显著提高了富锂锰正极的结构稳定性。采用 1wt% 磷钼酸铵改性的正极材料在 0.2C (40mA g^{-1}) 下循环 100 次后，容量保持率超过 80%，在 1C 下 400 次循环后，容量保持率为超过 80% (放电容量为 170mAh g^{-1})。

A01-P036

Electronic coupling effect optimized FeOOH nanosheets to enable high-performance Ni-Fe battery

Fan Yang¹, Ruiwang Zhang¹, Xunwei Ji¹, Shiwei Lin^{*1}, Xihong Lu²

1. Hainan University

2. Sun Yat-Sen University

Aqueous rechargeable Ni-Fe batteries exhibit unique advantages in large-scale energy storage thanks to their affordability, safety, and reliability. However, their limited energy density and Coulombic efficiency stem from unfavorable OH^- adsorption capability and low electrochemical activity of Fe sites, result in electrode kinetic delays for Fe anodes. Here, we report Mn and S co-modified FeOOH (MSFF) nanosheets as an advanced anode in Ni-Fe batteries, synthesized from a facile one-step surface-redox-etching method at room temperature. Based on the strong electronic coupling effect between Mn and S atoms, such MSFF anode presents fast electron transport capability, enhanced OH^- -adsorption capability, and redox reactivity. Specifically, the MSFF anode can achieve a high areal capacity of 2 mAh cm^{-2} at 10 mA cm^{-2} , which retains a staggering 96 % of the initial capacity after undergoing 9000 cycles at a higher current density of 30 mA cm^{-2} . In addition, the assembled Ni-Fe battery can provide a capacity of 0.85 mAh cm^{-2} at 16 mA cm^{-2} , significantly outperforming most recently reported aqueous rechargeable batteries. This work may offer an innovative and feasible approach for modulating the local electronic structure of high-performance Ni-Fe battery electrode materials.

A01-P037

Facile Synthesis and Electrochemical Evaluation of Vanadium-Doped Sodium Iron Oxide (V-NaFeO_2) as a High-Performance Cathode Material for Sodium-Ion Batteries

KIRAN RASHEED*

University of Science and Technology Beijing

The increasing universal demand for sustainable and cost-effective energy storage resolutions has sparked significant interest in sodium-ion batteries (SIBs) as a promising alternative to lithium-ion batteries (LIBs). Owing to the natural abundance, low cost, and environmental compatibility of sodium, SIBs are suitable for large-scale applications, particularly in still energy storage and next-generation electronic devices. Among various candidates, sodium iron oxide (NaFeO_2) has received considerable attention due to its promising theoretical capacity, low toxicity, and abundant essential elements. Nevertheless, its electrochemical performance remains limited by structural instability and poor electronic conductivity. To address these limitations, this study explores the vanadium (V) doped NaFeO_2 as a strategy to enhance its structural integrity and electrochemical performance. Vanadium (V) with its various oxidation states and strong redox activity, is anticipated to stabilize the layered structure and improve electronic conductivity through lattice modification and improved charge transfer. The novelty of this work lies in the targeted modification of NaFeO_2 via transition metal doping to overcome the material's essential drawbacks. A key part of the research methodology is the facile synthesis of V-NaFeO_2 using the ball milling method, which offers scalability and cost-effectiveness. The crystal structure of the synthesized material has been fruitfully confirmed through XRD, authenticating the formation of the desired phase and crystal structure. The next phase involves inclusive electrochemical characterization, including CV, GCD analysis, and EIS, to evaluate the effects of vanadium doping on capacity, rate capability, and cycling stability. This research aims to develop a high-performance cathode material for sodium-ion batteries, contributing to the advancement of harmless, sustainable, and ascendable energy storage technologies. Vanadium-doped sodium iron oxide (V-doped NaFeO_2) has emerged as a highly promising cathode material for sodium-ion batteries (SIBs) due to its superior electrochemical properties.