



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

FB02-新体系电池青年论坛

主办单位

中国材料研究学会

会议网址: <https://cmc2025.scimeeting.cn>



FB02.新体系电池青年论坛

分会主席：黄永鑫、方永进、张凯

FB02-01**钙/铝离子电池宿主结构的多尺度优化设计研究**

曹峻鸣*

东北师范大学

在新型电化学储能电池技术中，非单价金属离子（如 $\text{Ca}^{2+}/\text{Al}^{3+}$ 等）作为载流子，所具有的高电荷量能够实现更多电子转移。然而，载流子与宿主之间更强的库伦相互作用，则会导致其扩散动力学迟缓与脱嵌反应可逆性差等问题。基于此，我们提出对宿主材料的本征晶体结构进行多尺度调控。首先，针对层状焦钒酸锌宿主的 Zn 位点进行熵增取代，利用同属 ds 区过渡金属的 Cu 元素进行固溶重构，制备出新型的固溶相焦钒酸铜锌材料，研究表明，Cu 的引入能够提升电化学性能的同时，不会使晶体结构发生明显的晶格畸变，保证了电池充放电过程中 Ca^{2+} 脱嵌反应的可逆性与循环稳定性。其次，针对层状 VOPO_4 材料进行有机分子插层，扩大层间距，从而减小了 Ca^{2+} 扩散的空间位阻，实现了良好的电化学 Ca^{2+} 存储能力。我们针对 Al^{3+} 载流子更高的极化强度，对普鲁士蓝类似物（PBAs）宿主晶体结构的阳离子位点分别进行中熵设计与空位引入。得益于对电子结构的调控，所提出的改进型 PBAs 具有更高的电子电导率的同时，能够有效地抑制 Jahn-Teller 畸变效应，从而有效地缓解了充放电过程中宿主结构的相变与应变，实现了长周期的、宽温域的电化学 Al^{3+} 存储。

FB02-02**双功能催化剂原子级调控及电化学性能**

王朋*

青岛科技大学

锂空气电池由于具有接近燃油的理论能量密度，成为后锂离子电池体系的最佳选择之一。然而基于多步骤、多电子氧化还原化学反应的锂空气电池由于其传质和表面反应动力学比较缓慢，这大幅制约了锂空气电池的电化学性能。开发兼具 ORR/OER 双功能催化动力学的正极材料是解决锂空气电池充放电极化和循环稳定性不佳问题的关键。碳基材料可以有效改善锂空气电池的电化学性能，但是其双功能催化活性受到 ORR/OER 在单一位点竞争的限制。因此本报告围绕提升荷质传输动力学和调控 Li_2O_2 形核、长大和分解路径这一主线实施高效催化剂的设计。从结构导向出发，构筑多级孔材料和纳米阵列结构，优化三相界面化学，提供充足 Li_2O_2 容纳空间。从催化导向出发，基于异质结构和缺陷策略，调控活性位点类型和位点分布，改善催化中心利用效率，诱导 Li_2O_2 有规律形核，调控其形貌、分布和晶体结构，提升 Li_2O_2 的分解动力学。本报告聚焦锂空气电池基础研究与前沿科学问题，针对双功能催化剂活性调控提出独特的研究视角，为推动锂空气电池产业化应用提供基础见解。

FB02-03**杂原子调控铜单原子催化型宿主材料用于促进水系锌硒电池的氧化还原反应**

徐慧婷、王洪海、刘加朋*

河北工业大学化工学院

水系锌硒(Zn-Se)电池其因为固有安全性和高比容量等优点而备受关注。然而，缓慢的氧化还原反应问题阻碍了水系锌硒电池的发展。因此，本工作合成了一种氮磷杂原子不对称配位铜单原子催化型宿主材料 ($\text{CuN}_3\text{P}_1\text{@C}$)。 $\text{CuN}_3\text{P}_1\text{@C}$ 宿主材料具有丰富的多孔结构、高的 Cu 单原子负载量和独特的不对称配位环境，显著降低了 Se 和 Zn 氧化还原反应的反应能垒，提高了水系 Zn-Se 电池的电化学性能。综上所述， $\text{Se/CuN}_3\text{P}_1\text{@C}$ 阴极在 0.2 A g^{-1} 时表现出 756 mAh g^{-1} 的高比容量，在 5.0 A g^{-1} 时具有 4000 次循环的稳定性

(每循环容量衰减率仅为 0.0044%)。同时,通过系统的表征和密度泛函理论计算详细地探讨了水系 Zn-Se 电池的转化机理。这项工作为通过杂原子调节单原子基宿主材料来促进水系 Zn-Se 电池的氧化还原反应开辟了一种新的方法。

FB02-04

构型设计与界面重构协同优化钠基层状氧化物正极的高倍率性能

张剑东、申燕、王鸣魁*

华中科技大学武汉光电国家研究中心

钠离子电池(SIBs)是一种极具潜力的快充技术。为实现 SIBs 的全面实际应用,亟需开发兼具高容量与高倍率长循环稳定性的正极材料。O3 型层状过渡金属氧化物(Na_xTMO_2 , TM 为过渡金属)因其具有充足的初始钠含量、高首周库伦效率和理论比容量,被认为是极具前景的 SIBs 正极候选材料。然而,多数 SIBs 在高倍率下会出现容量骤降现象,这主要归因于 Na^+ 传输动力学不足。其中,电极/电解质界面的电荷转移与电极内部的传质过程是影响 Na^+ 迁移的两个关键因素。因此,同步优化体相与界面的 Na^+ 传输行为对提升高倍率性能至关重要。此外,在快速且频繁的 Na^+ 脱嵌过程中,材料会发生复杂而剧烈的相变,导致容量保持率不佳。鉴于 O3 型层状氧化物存在容量与结构稳定性的权衡问题,如何协同优化 SIBs 正极在高倍率下的电化学性能与结构稳定性仍面临重大挑战。

本研究提出多维镧化策略,通过构建表面 LaCrO_3 异质结并在 NaCrO_2 中形成 Cr-O-La 构型来改善其性能。带电异质结构 LaCrO_3 诱导的内建电场可加速界面电荷转移;同时,过渡金属层中的 Cr-O-La 构型引发局部电荷聚集,削弱 Na-O 相互作用力并降低 Na^+ 迁移势垒。该策略显著提升了层状氧化物正极的电化学反应动力学和结构可逆性。实验表明,化学计量比为 $\text{Na}_{0.94}\text{Cr}_{0.98}\text{La}_{0.02}\text{O}_2$ 的电极在半电池中展现出优异的倍率性能(40C 倍率下容量 101.8 mAh g^{-1})和循环稳定性(20C 倍率下循环 2000 次容量保持率 83.1%),其全电池性能同样具有竞争力(2C 倍率下循环 500 次容量保持率 89.3%)。本研究为实现层状氧化物正极材料在高倍率下的容量发挥与保持提供了有效途径。

FB02-05

新型钾基储能技术关键电极材料制备

赵硕卿*

吉林大学

化石燃料的过度开发和锂矿资源成本的不断上涨促使研究人员们探索新型的电化学储能设备。钾是地壳中储量最为丰富、成本最为低廉的自然资源之一。发展新一代钾基储能技术,在未来大规模应用方面具有资源和环境方面的优势。为此,合理设计具有高比容量、长循环寿命的电极材料,明晰电化学过程中的储钾机制,有助于构筑高性能钾基储能设备,推进钾基储能体系的商业化应用。本次报告主要针对新型钾基储能设备正/负极材料的可控制备、改性方法和电极/电解液界面调控,结合多种原位测试技术,阐明电极材料微观结构、化学组分和结构相变同储钾机制之间的构效关系。开展从体系选择、器件设计优化到界面性质调控等方面的研究,设计并合成多种新型电极材料,为新型钾基储能设备的开发与应用奠定基础。

FB02-06

极性可调有机材料在钠/钾离子电池中的应用

王恒国*

东北师范大学

钠/钾离子电池(SIBs/PIBs)凭借丰富的钠/钾资源和与锂离子电池(LIBs)相似的物理/化学性质,成为最具商业化发展前景的储能系统(ESSs)。然而,传统的无机电极材料资源有限、生产能耗高,严重影

响其进一步发展。相比之下,有机电极材料具有对环境友好、资源可持续再生、合成能耗较低和可回收性等优势,成为发展下一代高性能电极材料的研究热点。其中,有机电极材料的氧化还原反应种类繁多,可将其分为 n 型(阳离子作为载流子)、p 型(阴离子作为载流子)和双极性(阳离子和阴离子都作为载流子)三种。n 型有机电极材料具有较低的放电电压,而 p 型有机电极材料虽表现出较高的放电电位,但表现出的比容量较低、容量保留率较差。因此,通过调整有机电极材料的极性来提高电化学性能,并进一步探索其在 SIBs/PIBs 中的应用和储能机制至关重要。近年来,由过渡金属离子与 π -共轭有机配体配位形成的二维 π -d 共轭金属有机框架材料(2D c-MOF)是具有拓扑多样性、高孔隙率和孔径可调等优点的多孔材料。其中,过渡金属离子与配体中心的可调性和多价性,使其具有连续存储阴、阳离子的双极性特征。基于此,我们报道了系列 2D c-MOF 的电化学应用,并通过实验表征和 DFT 计算确定了反应机理和性能,为极性可调有机储能电池电极材料的设计提供了新的策略。

FB02-07

生物质基无机/有机柔性组装纳米材料的构筑及其电化学储能应用

陈立锋*

中国科学技术大学

生物质基材料因其多级结构、可降解性、丰富官能团、成本低及本征柔性,在构筑高性能无机/有机柔性纳米组装体中具有独特优势。然而,这类材料仍面临界面相容性差、导电-柔性难以协同优化、规模化制备受限等挑战。鉴于此,我们课题组可控合成、宏量制备出一维、二维、三维无机纳米材料,并采用限域交联、离子渗透、诱导组装等策略,构建出柔性纳米复合材料且开发出电化学性能优异的系列可拉伸的电化学储能器件,包括离子热电池、光辅助固态金属电池、水系锌离子电池与超级电容器。同时,结合理论模拟与原位表征手段,揭示了界面相互作用对电荷传输、能量传递和力学性能的调控机制,建立了“制备-结构-性能”的定量构效关系,为柔性储能器件的关键材料设计与制备提供了新思路。本报告主要介绍生物质基柔性纳米组装体的设计方法、规模化制备工艺及其在新型柔性储能器件中的应用与构效关系解析。

FB02-08

钠离子电池功能性电解液设计

李林*

温州大学

钠离子电池由于其丰富的钠资源被认为是大规模储能系统的潜在候选者。电解液作为钠离子电池的重要组成部分,显著影响其电化学性能。本课题组近年来聚焦于功能性电解液设计,致力于高安全和宽温域电解液的研发和应用。提出了一种构建深共晶电解液的策略,以提升丁二腈(SN)基电解液的安全性和电化学性能。硫酸乙烯酯(DTD)的 S=O 与 SN 的 α -H 之间的强氢键增强了 SN 与 Lewis 碱的相容性和安全性。同时,DTD 参与了 Na^+ 的溶剂化鞘,削弱了 SN 的配位数。独特的溶剂化结构促进了梯度富无机电极-电解液界面膜的形成,并在宽温度范围内实现了稳定的半电池循环。同时,提出一种具有高电子亲和性的阴离子三氟乙酸(TFA^-),其可以在较宽的温度范围内通过调节溶剂化化学,从而降低 Na^+ 的去溶剂化能。强配位的 TFA^- 有利于构筑富阴离子溶剂化结构,有效提升低温电化学性能。

FB02-09

有机多孔储能材料在电池中的应用研究

陈远*

内蒙古大学

有机电极材料因其资源丰富、廉价和氧化还原官能团可调等优势吸引了人们的广泛关注。然而,其仍然存在易溶解、导电性低以及倍率性能差等问题。晶态有机多孔材料(如二维导电 MOFs 和 COFs),由于

其高度有序的孔隙结构，精确可调节的孔径和丰富的表面活性位点，其在储能电池领域具有独特的优势。有序的孔隙不仅可以作为高效的离子传输通道，还可以增强电解质的润湿性，促进电极-电解质界面的电荷转移动力学；聚合物骨架结构可以防止充放电过程中电极材料的溶解，保证循环稳定性。近年来，我们发展了系列高性能多孔有机储能材料，通过利用金属与有机配体之间的 π -d 共轭相互作用，构筑了具有高电导率和高性能二维导电 π -d 共轭配位聚合物电极，并精确揭示了其内在的储能机理。此外，我们还通过扩大 π 共轭系统，设计系列高性能的 COFs 电极，利用协同配位策略，提升了电池存储电荷的稳定性。

FB02-10

基于空间电荷储能机制的快充过渡金属硫化物负极构建策略

韩美胜、赵天寿*

南方科技大学

为了适应季节性和日常温度的波动对锂/钠离子电池快充性能和能量密度的影响，开发宽温区快充且兼具高能量密度的锂/钠离子电池是目前研究热点。影响钠离子电池宽温区快速充电性能的关键因素之一，尤其在低温下，是锂/钠离子能否快速从负极材料中插入和脱出。在低温下，实时表征锂/钠离子在负极中的存储和转移机制是极其困难的，这使低温下调控锂/钠离子从负极中快速插入和脱出成为了当前研究难点。随着近三年原位电化学磁谱技术的发展，其为宽温区，尤其是低温下，探究锂/钠离子在负极中的存储和转移机制带来了新的视角。本报告以过渡金属硫化物为代表性材料，介绍原位磁谱技术在宽温区锂/钠离子电池中如何观测锂/钠离子存储和转移，且证明了原位磁谱技术在宽温区锂/钠离子电池应用研究中的实用性。

FB02-11

低成本高比能钠离子电池正极材料研究进展

陈明哲*

南京理工大学

近年来，作为电网调峰削谷的重要手段之一，大规模电化学储能越来越受到研究者的重视和广泛关注。钠离子电池因其近乎取之不尽用之不竭的钠资源，被认为是大型储能装置的最优解决方案之一。聚阴离子型正极材料与其它正极材料相比，具有循环稳定性好，热稳定性佳，充放电电位较高等优点，因此近年来受到研究者的广泛关注。但因其质量比容量较低，制约了该类材料进一步发展。基于以上科学及经济考虑，低成本、高电位聚阴离子型正极材料领域亟需系统性的研究，包括新材料和新方法的研究与开发及核心技术：（1）报道了一种新型铁基钠离子电池聚阴离子型正极材料，丰富了该类铁基材料的化学组成；（2）在聚阴离子型/碳基复合材料微结构方面做出了创新性的工作；（3）设计和制备了具有三维离子扩散路径的高比表面的铁基聚阴离子型纳米颗粒正极材料，提出并发展了新型钠离子超快导体的新定义，扩展了该类新型钠离子超快导体的可选范围和应用前景；（4）发展了一种新型阴离子掺杂技术，丰富了钒基/钛基材料的电化学行为，大幅度提升了其现有工作电位；（5）对于钒基多电子行为在高价态条件下的可逆氧化还原反应进行了深入探究，阐明了高价态钒 电对在一定区间范围内的激发机制，实现高比能电极材料的突破。

FB02-12

氧化还原媒介调控下的硫电极反应动力学研究

叶华林*

南京师范大学

硫基电池在能量密度和成本上具有突出优势，被认为是下一代最具潜力的储能电池之一。然而，目前报道的硫基电池的实际能量密度要显著低于其理论值，其中一个很重要的原因是需要使用大量的电解液 (>10 μ l/mg)。在贫电解液条件下 (<5 μ l/mg)，硫电极的动力学反应速度极其缓慢，而且充放电固体产物会

在电极内部不断积累，导致电极失活。针对这一挑战，本研究提出了一种氧化还原媒介辅助催化途径，其中固体正极催化剂与可溶性氧化还原媒介一起协同催化，极大的提高了硫的电化学反应动力学速度和转化率。这种媒介辅助催化策略能够在贫电解质 ($\sim 5.0 \mu\text{l/mg}$) 条件下，将高负载锂硫电池 ($\sim 5.6 \text{ mg/cm}^2$) 的硫利用率从 $\sim 44\%$ 提高 $\sim 61\%$ ，可以作为一种硫催化转化的新途径，显著提高硫电极的动力学反应速度和硫利用率。

FB02-13

热电池关键材料设计及性能研究新进展

曹勇*

中国工程物理研究院电子工程研究所

作为热激活式贮备电池，热电池具有快激活、高功率、长贮存寿命等优点，而被广泛应用于装备中。但是，热电池也存在比能量低等缺点，成为限制装备轻质发展的主要瓶颈问题之一。通过发展热电池新的电池材料设计及性能提升方法，是提升热电池比能量、减小体积的关键途径之一。基于此，本研究通过电化学体系材料设计、界面调控、新工艺应用等方法，以适用于热电池性能提升的材料研发入手，实现热电池单体电池电化学性能的提升。

FB02-14

硫化物全固态锂电池正极界面失效机制与解决策略

马君*

中国科学院青岛生物能源与过程研究所

硫化物全固态锂电池具有高能量密度和高安全性的优点，被认为是下一代动力电池的关键储能技术。但是，层状氧化物正极/硫化物固态电解质界面的电化学-机械力学失效导致电池内阻增大、结构破坏，严重制约了电池能量密度、倍率性能和循环寿命的提升。针对上述问题，利用原位扫描透射电镜差分相衬成像技术、同步辐射 X 射线断层扫描成像技术等从“颗粒-电极-电池”多尺度揭示了固-固界面锂离子传输失效新机制。基于对全固态电池失效机制的认识，提出了在正极材料表面修饰双向兼容快离子导体层、铁电层以及优化复合正极微结构的解决策略。硫化物全固态锂电池正极界面失效机制与解决策略的研究工作为提升全固态电池性能奠定了研究基础。

FB02-15

锂离子电池有机正极材料开发及精准性能调控

王建德*

湖南大学

锂离子电池正极材料是面向 2035 新材料强国战略中国防军工、新能源汽车以及未来大规模储能等国家支柱型产业的关键核心材料。针对传统无机正极材料原材料供应不均、能量密度低等挑战，开发具有环境友好、原料广泛、能量密度高等优点的正极材料是贯彻“碳达峰碳中和”战略并实现“绿色出行”的重要举措。有机正极材料具有环境友好、原料广泛、可设计性强、能量密度高等优势，是未来动力电池及大规模储能领域的重要潜在材料。然而，有机正极材料电子电导低、电压低、溶解度高，且存在预锂化困难、稳定性差等难题。因此，开发新型稳定的预锂化有机正极材料，深入揭示预锂化有机正极氧化还原机制，探索提高空气稳定性的新方法，是突破上述瓶颈并推动进一步商用的关键。

报告人将介绍两类新型预锂化有机正极材料——共轭磺胺和共轭酮肟，阐述这两类正极材料的氧化还原机理，探讨这两类新型正极材料在碱金属电池（锂、钠和钾）中的性能和应用前景，研究有机正极材料充放电极化、氧化还原电位、电子电导和溶解度等的调控方法；报告人还将深入讨论两类材料的设计思想、

研究方法、创新理念及解决的问题，同时剖析这两类材料和整个领域还存在的问题和挑战，展望有机正极材料在未来产业结构转型过程中的潜在应用价值。

FB02-16

双离子电池阴阳离子协同存储设计及机理研究

潘庆广*

中国科学院深圳先进技术研究院

在全球气候治理与碳中和战略的驱动下，开发兼具成本效益与高性能的储能技术已成为全球科研攻关的核心命题。双离子电池（DIBs）作为突破传统锂离子电池“摇椅式”储能机理的新型体系，凭借其独特的阴阳离子协同储能机制（正极阴离子插层/负极阳离子脱嵌），展现出高工作电压窗口优势。不仅突破了传统储能体系的电压瓶颈，更为开发可持续能源存储系统提供了新范式。然而产业化进程仍受制于三大技术壁垒：①电极材料受限的离子存储位点导致容量衰减；②正极阴离子插层反应动力学迟滞；③插层膨胀引发的结构坍塌问题。针对上述挑战，本团队创新性地提出了多项解决方案：（1）通过定向输运阴离子策略，显著提升阴离子扩散动力学；（2）创新 π 共轭结构基序双延长策略，增强有机分子结构稳定性并提升储阴离子容量；（3）借助小分子、多活性位点及高效离子通道的有机结构设计，优化了金属离子的存储性能；（4）利用 π - π 叠加效应与 π 共轭系统的精妙调控，增强储能材料的循环稳定性；（5）通过构建平面-锯齿状异质界面与 p-n 异质结，双重提升了离子存储的动力学性能及结构稳定性。这些研究成果为双离子电池电极结构设计提供了新思路。

FB02-17

电解液的离子去配位能调控

孔龙*

西北工业大学

锂离子的去配位能垒占据整个锂离子反应能量的一半以上，低温下甚至达到 90%。如何精确评价离子的去配位能力，以及离子的配位结构对界面的电荷传输机制，是理性设计低温锂电池电解液的关键。本报告从离子的脱配体概念出发，分析了脱配体和脱溶的区别，强调了阴离子在离子配位过程中对界面电荷的影响规律，阐述了接触离子对和聚集体锂离子结构对低温金属锂电池的影响。

FB02-18

通过调节层状氧化物正极的局部电子结构实现高性能钠离子电池的可逆阴离子氧化还原

王亮华¹、袁明亮^{1,2}

1. 中南大学资源加工与生物工程学院
2. 中南大学矿物材料及其应用湖南省重点实验室

随着清洁能源需求的不断增长，钠离子电池因其与锂离子电池类似的工作原理、钠资源丰富且成本较低而备受关注。然而，由于钠的较高原子质量及其较高的氧化还原电位，钠离子电池的能量密度仍低于锂离子电池。正极材料是影响电池性能和成本的关键因素，因此开发具备高比容量和良好循环稳定性的钠离子电池正极材料尤为重要。传统正极材料容量受限于过渡金属的氧化还原，近年来，引入氧离子提供电荷补偿成为提高材料容量的有效策略。自 2000 年首次在富锂锰基材料中发现阴离子氧化还原反应以来，研究者已在富锂和层状钠离子电池正极材料中观察到氧的阴离子氧化还原反应。然而，高电压下阴离子氧化还原反应易引发晶格氧损失，导致结构破坏与性能衰减。因此，如何在深度脱钠过程中抑制氧损失，提升正极容量与循环稳定性，成为当前亟待解决的科学问题。本研究通过 Li/Ti 共掺杂策略，成功在 O3-NaLi_{0.1}Ni_{0.3}Fe_{0.1}Mn_{0.45}Ti_{0.05}O₂ (LNFMT) 正极中实现了 O2p 与 TM 轨道之间电子结构的精确调控，实现了高度可逆的氧阴离子氧化还原反应，并系统阐明了局部电子结构与阴离子氧化还原之间的内在机制。

首先, 低价态的 Li 掺杂诱发形成非键合的 Li-O-Na 结构, 激发氧的氧化还原活性, 提供了额外的容量, 同时抑制了 TMO₂ 层的滑移, 增强了结构稳定性。然而, 单独 Li 掺杂不足以实现高度可逆的阴离子氧化还原反应。因此, 引入适量的 Ti 掺杂形成强共价的 Ti-O 键, 增强氧原子的电负性, 可以抑制高电压下氧的过度氧化。改性材料 LNFMT 在 0.1C 电流下表现出 163.5 mAh g⁻¹ 的高容量, 在 1C 下循环 200 次后容量保持率达 81.7%, 在 5C 下循环 500 次后容量保持率仍达 90.2%, 表现出优异的倍率与循环稳定性。原位 XRD 测试表明, LNFMT 在钠离子脱嵌过程中晶胞参数变化极小(晶胞体积变化率仅为 0.95%)。循环伏安、电子顺磁共振、X 射线光电子能谱、微分电化学质谱及氧空位形成能等多种表征手段共同揭示了氧氧化还原过程及调控机理。结果表明, 非键合的 Li-O-Na 构型激活并增强了 O²⁻→(O₂)ⁿ 反应的可逆性, Ti 的掺杂增强 TM-O 键, 调控晶格氧, 进而实现高度可逆的阴离子氧化还原反应。密度泛函理论及部分态密度计算进一步揭示了局部电子结构对阴离子氧化还原反应的调控机制。Li/Ti 共掺杂使 O-2p 轨道能带上移并且接近费米能级, TM-3d 能带分裂并上移, 生成低能态的 Mn eg* 及 Ni eg* 轨道, 增强了 O-2p 与 Mn eg* 及 Ni eg* 轨道间的重叠, 促进 O2p 非成键电子的转移, 进而实现高度可逆的氧阴离子氧化还原反应。组装的全电池在 1C 下实现了 214.7 Wh kg⁻¹ 的高比能量, 且在 150 次循环后容量保持率达 76%, 展现了良好的实际应用潜力。该研究不仅揭示了 O3 型正极中局部电子结构与阴离子氧化还原反应的内在关联机制, 还为高性能钠离子电池正极材料的设计与开发提供了理论依据与实践路径。

FB02-19

电池中多物种输运问题研究

谈鹏*

中国科学技术大学

二次电池具有容量高、绿色环保等优点, 近年来引起了学界的广泛关注。作为一个集多个物理化学过程于一体的复杂系统, 电池性能的提升需要研发高效的电极材料以及深入理解和提升电池内部的多物种输运与能量转化特性。本工作针对锂空气电池、锌基电池和锂离子电池中具有共性的多物种输运问题展开研究。对于锂空气电池, 探究了从多孔电极传质规律和全电池设计优化; 对于锌空气电池, 探索了锌电极上的枝晶、钝化等现象、空气电极三相界面变化和空气电极上的气体析出现象; 在锂离子电池中, 通过不同尺度模型的结合, 研究从单粒子属性到电极结构对性能的调控机制。工作加深了对电池中多孔电极上多物种传输的科学认识, 为电池的结构设计和运行条件优化提供有效指导。

FB02-20

苯氨基聚合物的制备及电化学性能研究

吕海明*

香港城市大学

水系电池因其极致高安全性、低成本和环保性等特点, 在大规模储能领域受到广泛关注。然而, 传统的水系电池金属负极材料缺乏酸碱共耐性, 甚至在循环过程中存在枝晶、钝化和腐蚀等问题。苯氨基聚合物具有良好的电化学性能, 同时具有耐酸甚至耐碱的性能, 是一类很有前景的电极材料, 其结构由可设计的活性基团 (N=N, C=N, -N=等) 和精细拼接的有机分子结构组成。可以通过改变分子结构, 调节 HOMO 和 LUMO 能级, 实现对氧化还原电势的调控, 设计出既可以做水系电池的正极材料又可以作为电池的负极材料。本文主要是以苯胺为原料制备各种用于水系电池的电极材料, 包括正极和负极材料, 实现电池的长寿命, 高容量性能。

FB02-21

富 π 电子催化剂促进界面 Zn²⁺ 脱溶动力学研究

左银泽、张久俊*

福州大学

水系锌离子电池 (AZIBs) 因其高安全性和低成本而备受关注, 但锌负极的枝晶生长和副反应 (如析氢和腐蚀) 严重制约其发展。负极表面涂层作为有效策略被用来保护锌负极免受电解液的侵扰, 抑制副反应。另外, 负极表面涂层可以通过孔径筛分和化学锚定等方式引导锌离子快速去溶剂化, 调控水合锌脱溶和沉积动力学。然而, 界面涂层在去溶剂化过程中与水合锌离子的电子相互作用和水合锌离子溶剂化结构动态演变依旧不明。本课题组 (福州大学张久俊院士, 左银泽副教授课题组) 利用 COP 涂层作为研究模板, 通过设计界面电子结构, 提出界面催化去溶剂化思路来引导界面快速去溶剂化, 并且通过先进的原位表征及理论计算揭示了相关电子相互作用和溶剂化结构的动态演变规律。重点探讨 COP 中 π 电子结构所衍生出的邻位协同作用来引导水合锌离子去溶剂化过程, 及其在界面处的溶剂化结构解析, 通过分析溶剂化结构演变与沉积动力学的关联性, 揭示了聚合物涂层在优化界面离子传输路径和提升锌负极循环稳定性中的关键机制。

FB02-22

高功率钠离子电容器

魏湫龙

厦门大学

钠离子储能技术具有资源丰富、可持续、低成本等优点, 是规模化储能的理想选择之一。由于钠离子具有比锂离子更大的半径, 使得钠离子在活性材料中扩散缓慢, 且在嵌入/脱出过程中伴随电极材料的结构劣化, 导致电极材料倍率性能差、循环寿命短。为解决上述问题, 具有快速充放电速率及高比容量的赝电容储钠反应机理实现了兼顾高比容量、高倍率与长循环稳定的性能。将赝电容储钠反应机理用于开放新型的钠离子电容器, 通过引入法拉第反应电极提高器件的容量与工作电压, 兼具了电池的高能量密度和超级电容器的高功率密度与长寿命等优点, 为发展低成本、高功率的钠离子储能技术提供了新思路。

FB02-23

水系电池界面化学调控机制

赵瑞正

郑州大学

高比能蓄电池是新能源汽车、分布式储能等国家战略新兴产业的“核心动力单元”。高安全性则是所有电池体系实际应用的首要前提。近年来, 广受青睐的高比能有机系锂离子电池所带来的安全隐患日益凸显。例如, 搭载锂离子电池的手机、电动车、储能电站等频繁发生自燃、爆炸事故, 已严重威胁人们的生命财产安全。相较之下, 水系电池凭借其固有的高安全性、低成本、快充特性及简易的制造工艺等优势, 成为下一代安全电源及大规模储能器件的重要候选。然而, 与已广泛应用的有机锂离子电池相比, 当前商用水系电池面临的核心挑战在于比能量偏低。提升水系电池能量密度的关键在于: 一、提高电极材料的比容量; 二、拓宽电化学稳定窗口。为突破现有电极体系及设计方案的局限, 本报告将系统阐述团队通过构建新型高容量/高电压反应电对、调控电解液溶剂化结构、稳定水-金属界面等水系电化学策略所取得的研究进展, 旨在为高比能水系电池的设计提供系统性器件解决方案。

FB02-24

长寿命钠离子储能电池

张凯*

南开大学

储能电池可有效解决风光发电的峰谷波动问题, 在新型电力系统中发挥着重要作用, 对于我国能源结构变革具有重要意义。国家发展改革委和国家能源局印发的《“十四五”新型储能发展实施方案》中专门强调, “要开展钠离子电池等关键核心技术、装备和集成优化设计研究”。至 2023 年底, 我国储能电池装机规

模已从 2017 年的 0.3 GWh 增长到 33.6 GWh；预计到 2030 年，其装机规模将超过 200 GWh。目前，以锂离子电池为主导的储能电池存在上游资源锂、钴、镍等资源严重依赖进口以及成本较高等问题，给我国能源安全造成潜在威胁。因此，面向未来规模储能的巨量需求和发展新质生产力的实践要求，开发以钠离子等丰产元素为载流子的非资源限制型储能电池新体系具有重要意义。

FB02-25

氮化物固态电解质研究进展

李维汉、孙学良

宁波东方理工大学

固态电解质与锂金属之间的界面不稳定性与锂离子输运效率低下，长期以来是制约全固态锂金属电池实现高性能应用的核心瓶颈。针对当前主流氧化物、硫化物和卤化物固态电解质在热力学上对锂金属普遍不稳定的问题，报告人基于反应热力学稳定性理论，系统性开发了兼具高锂相容性和高离子导率的氮化物固态电解质，有效解决了界面副反应剧烈、阻抗累积快及循环不稳定等关键问题。通过构建协同 Li/N 空位机制，报告人成功设计并合成了空位富集型 $\text{Li}_3\text{N}_2\text{Cl}_3$ 和 $\beta\text{-Li}_3\text{N}$ 电解质，显著降低了锂离子迁移能垒并提升了有效载流子浓度，分别实现了 40~100 倍的室温离子导率提升，达到了 $2.14 \times 10^{-3} \text{ S/cm}$ （为氮化物体系当前文献最高值）。结合同步辐射 XRD、PDF 与中子衍射等手段，系统量化了空位结构分布与离子输运之间的构效关系，辅以分子动力学模拟，深入揭示了空位调控对能垒降低与迁移速率提升的本征机制。空位富集的氮化物电解质还显著增强了氮化物电解质的界面与环境稳定性。以 $\beta\text{-Li}_3\text{N}$ 为例，其在低湿度大气条件下可稳定维持 $>1 \times 10^{-3} \text{ S/cm}$ 锂离子电导率超过 150 小时，表面原位生成的 LiOH 钝化层有效阻止进一步分解，突破了氮化物空气稳定性差的传统认知。在 Li 对称电池中，该材料实现了迄今报道最高的 45 mA/cm^2 沉积/剥离电流密度与 10 mAh/cm^2 容量密度，显著优于同类固态电解质。此外，报告人结合同步辐射 XAFS 与 XCT 等原位技术，实时监测氮化物电解质与锂金属界面的演化行为，揭示了其在循环过程中界面阻抗抑制与化学稳定性的关键机制。在此基础上，构建的多类型全固态锂金属电池展现出优异的综合性能：实现 5000 圈（1C）长寿命循环，单次充电时间缩短至 12 分钟，并实现面容量 $>5 \text{ mAh/cm}^2$ ，全面超越实用化电池的核心指标要求（ $>3 \text{ mAh/cm}^2$ ， $<15 \text{ min}$ 快充）。该系列工作为氮化物固态电解质的设计、构效调控及工程化应用提供了系统性理论支撑与实验验证，推动了全固态锂金属电池在高能量密度与长寿命方向的技术进步。

FB02-26

中子散射技术在钠离子电池材料研究中的应用

李正耀

中国原子能科学研究院（中子散射研究室）

当前，全球能源结构正在向绿色低碳转型，电池技术是储能领域的核心技术之一。锂离子电池一直占据主导地位，但锂资源瓶颈促使行业寻求替代方案。在可持续能源技术的探研中，钠离子电池因钠资源丰富、成本低廉而被认为是锂离子电池的有力替代者。随着新能源行业的不断发展以及储能市场的持续需求，开发具有高能量密度和长循环寿命的钠离子电池正极材料迫在眉睫。此外，结构决定性能。因此材料结构表征在材料研发中具有非常重要的地位。与 X 射线技术相比，中子呈电中性，穿透力强，因此可探测更深处的体相结构信息；不同元素的中子散射能力不同，散射能力与原子序数完全无关，因此中子可以有效区分近邻元素（如 Mn、Ni、Co 和 Fe）、对轻元素特别敏感（如 Li、Na、O 与 H）、以及能够有效区分同位素（如 H-1、H-2 与 H3；Li-6、Li-7）等优点。因此中子散射是研究电池材料的有力手段技术之一。层状过渡金属氧化物正极材料因其高理论比容量、制备简便和组分设计灵活等优点而备受关注。但高电压下的不可逆相变、Mn 基材料的 Jahn-Teller 结构畸变、缓慢的钠离子扩散动力学等严重制约着层状正极材料的电化学性能。研发高性能正极材料是提升电池性能的首要任务，但如何优化材料结构、设计出高性能材料依然具有挑战性。层状氧化物的过渡金属层容易形成有序结构，但一般认为超结构有序不利于材料的

电化学性能。因此提升超晶格结构稳定性及设计超结构有序层状材料对于改善正极材料电化学性能至关重要。利用中国先进研究堆中子衍射技术研究了 Li 离子等不同元素掺杂对材料结构的影响，设计出不同的有序结构材料。与 X 射线衍射相比，中子衍射及结构精修表明在过渡金属层中形成的蜂窝状超晶格有序；电化学性能测试表明掺杂的材料具有良好的电化学性能。

FB02-27

阴离子活化正极结构调控

李翔

郑州大学

阴离子活化正极材料通过激活阴离子氧化还原反应 (O^{2-}/O_n^-)，突破了传统正极仅基于阳离子氧化还原机制的容量限制。然而该类材料面临三个核心瓶颈：一是氧活化不可控，通常伴随氧析出和结构重构；二是电压衰减；三是循环稳定性较差。目前关于阴离子活化的演变还尚有争论。本次研讨会，汇报人聚焦阴离子氧化还原不可控、电压降及循环稳定性差等关键科学难题，进行如下汇报：通过晶格调控工程抑制电极电压降，发展了岩盐相、超晶格调控等策略，抑制了离子迁移，从而设计了电压稳定的阴离子活化正极；进一步从化学键层面提出了键合工程以调控电极的长循环，发现了金属-氧键的键合与正极相变的演化规律，构建了寿命 2000 圈以上的阴离子活化正极。

FB02-28

揭示含钾聚阴离子材料储钠机制——离子交换&柱撑化学

刘文燚

中南民族大学

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，本工作设计了无干扰 $KTiOPO_4$ 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。

FB02-29

层状钠离子电池正极材料的结构演变规律

肖必威

有研（广东）新材料技术研究院

层状氧化物正极材料的电化学性能与其组成元素及微观结构高度相关。相对于锂离子电池，钠离子电池层状正极材料的结构更加复杂，电化学过程中表现出更剧烈的相变。本次报告将从层状正极材料中结构

相变、元素迁移、界面反应及结构设计等方面讨论高性能的实现方式及产业化研究成果。

FB02-30

锂离子电池储能系统运行安全研究

肖鹏

国网江苏省电力有限公司电力科学研究院

实现“碳达峰、碳中和”目标，努力构建以新能源为主体的新型电力系统，是党中央、国务院作出的重大决策部署。当前电化学储能电站主要采用锂离子电池技术，由于其本征安全问题，近年来国内外储能火灾事故时有发生，影响行业平稳健康发展。自 2018 年起，国网江苏电力开始储能系统运行安全研究。通过一系列不同层级电池热失控实体实验，明确热失控触发及蔓延机制，提出了基于特征气体监测的安全预警新策略，研发了气体探测器、集控单元和监控软件，获得了国家输配电安全控制设备检验检测中心认证。2021 年起，创新结合了声—光—力—气多参量耦合监测技术，进一步提升热失控预警时效性和可靠性。相关研究成果已广泛应用于国网江苏电力在运储能电站，至今保持安全稳定运行记录。

FB02-31

多尺度空旷结构高性能储能材料创制

董武杰

上海交通大学

晶体结构决定电化学特性是储能材料设计的基本逻辑。为了追求高容量、高倍率和高稳定性，研究者已开发出数千种电极材料。然而，深入理解不同材料的性能差异以及定量设计和构建高效储能材料的晶体结构，仍然是一个巨大的挑战。晶体结构堆积方式是决定材料电子导电和离子存储/传输功能特性的重要因素。作者为了量化晶体结构空旷度，首次提出电化学储能材料晶体堆积因子（PF）模型，并对不同结构类型电化学储能材料、同质多晶体相、同构异质等进行了晶体结构堆积因子比较分析，阐明了晶体结构空旷度对材料电子/离子电导率及储能性能的影响。此外还提出了结构堆积因子的扩展概念，在宏观、介观和微观等多层次更好地理解各种储能材料中的电荷存储和传输行为。基于上述理念，作者设计发展出了一系列不同尺度低结构堆积因子的高性能储能电极材料，如高压层状正极、极高倍率嵌入型负极以及高容量高稳定负极等。结构堆积因子模型为理解电化学储能材料的本征电化学性能提供了新的见解，并为设计更好储能陶瓷材料提供理论指导，具有重要意义。

FB02-32

有机卤素电解液添加剂稳定锂金属负极研究

徐英

兰州大学

卤素元素在稳定锂金属负极方面具有诸多优势，如氟元素有助于在锂负极表面形成富含 LiF 的 SEI 层，而碘元素则可通过正负极之间的氧化还原反应清楚锂负极表面的死锂，维持锂负极界面稳定。此外，鉴于单纯的无机 SEI 层受无机物自身机械脆性的特定在电池循环过程中难以适应电极的体积变化，因此我们采用氟辛烷作为电解液添加剂，在锂负极表面形成有机-无机的双层 SEI，其中无机层的 LiF 抑制枝晶生长，而有机层则有利于维持 SEI 层稳定。由此提升锂金属电池稳定性，其修饰的对称电池可在 $1\sim 5\text{ mA cm}^{-2}$ 条件下循环稳定超过 15,000 小时，而其对应的软包全电池也表现出良好的循环稳定性。其次，我们还将碘辛烷作为电解液添加剂，其中碘离子的氧化还原反应消除了锂负极表面的死锂，长时间维持负极界面稳定，基于此，其对应的对称电池也可稳定循环超过 10,000 小时。有机卤素电解液的添加剂可从多方面缓解锂金属负极存在的问题，利于锂的均匀沉积，由此促进高安全性、高能量密度锂金属电池的发展。

FB02-33**功能性微纳纤维的构筑及其在全固态锂电池中的运用研究**邓南平¹, 康卫民², 程博闻²

1. 天津工业大学纺织科学与工程学院, 先进分离膜材料全国重点实验室
2. 天津科技大学生物基纤维材料全国重点实验室

在“碳达峰碳中和”背景下, 新型清洁能源的开发与应用势在必行。传统锂离子电池的能量密度已经接近理论极限, 且相关电池的安全事件也频繁发生。而全固态锂金属电池具有高能量与高安全性密度等优点, 并且其可匹配金属锂负极和高压正极。尤其国务院在《新能源汽车产业发展规划(2021-2035年)》中明确提出要加快全固态电池技术的研究与开发, 因此高安全高比能的全固态锂电池被认为是下一代二次电池的新技术, 也是将来储能技术的潜在发展方向。全固态锂电池中固态电解质的性能直接影响最终全固态锂电池的循环稳定性、安全性和运用温域等关键性指标。因此, 设计与制备高性能的全固态电解质, 并开展相关的理论和基础研究, 已成为国内外学术界和工业界的共同认识。众所周知, 静电纺丝及静电溶吹纺丝技术是制备高性能的微纳纤维的有效方法之一, 所制备的一维纳米线或纳米纤维表现出优异的比表面积和大的长径比, 将其所构筑的三维网络骨架纤维膜运用在聚合物复合电解质中, 纤维膜能形成互连通长程连续锂离子传输通道, 且可形成更为丰富的有机无机界面相, 这将能为锂离子的传输提供便利的传输通道, 尤其将耐高温高强的高性能纳米纤维膜运用在复合电解质中时, 其能显著改善复合电解质的机械性能、耐高温及阻燃性等性能。综合上述优势, 当将所构筑的高性能复合电解质引入全固态锂电池中, 电池电化学性能与安全性能均得到显著地提高。

FB02-34**用于宽温域高安全锂金属电池电解液设计与研究**徐巾婷¹, 闵宇霖¹

上海电力大学...

锂金属阳极在因其超高的理论比容量, 被视为电池技术的“圣杯”。然而, 锂金属阳极的低库仑效率和树枝状生长等问题限制了锂金属电池的性能, 尤其在低温下更为明显。此外, 锂金属电池高温安全问题始终限制着其大规模应用与发展。为此, 课题组在宽温域高安全锂金属电池材料设计进行了一系列研究。首先在第一个工作中, 我们报道了一种对于铜集流体的改性策略, 通过在铜基底上镀上了一层 2,4,6-三羟基苯磺酰氟(TSOH)活性涂层, 以稳定阳极/电解质界面反应。在 Li⁺向阳极迁移的过程中, TSOH 的亲锂 -SO₂ 和 -OH 基团降低了阴离子的还原电位, 加速了 Li⁺离子的脱溶。因此, 所形成的 SEI 中富集了 LiF 和 Li₃N, 显著降低了 Li⁺的界面传输电阻, 并产生无枝晶的锂阳极。此外, 我们还报道了一种基于弱溶剂化甲基叔丁基醚(MTBE)的新型电解质。四氢呋喃(THF)用于平衡 MTBE 的溶剂化能力, 破坏 AGGs, 形成以 CIPs 为主的溶剂化结构。该电解液显著提高离子电导率的同时保持了弱键合的优势, 形成了稳定的阴离子驱动的固体电解质界面(SEI)。所组装的 1.2 Ah 的磷酸铁锂软包电池, 在 -20 °C 和 -40 °C 下, 成功保持其室温容量的 82% 和 69%。最后针对醚基电解液低温性能好但高压高温稳定性差的问题, 我们开发了一种由 THF、三氧杂环己烷(TO)和 LiFSI 组成的热响应性电解质, 以确保锂金属电池在宽温范围内(-60 至 60 °C)内安全稳定运行。TO 的加入降低了 Li⁺与 THF 之间的结合能, 从而改善了低温下的离子传输动力学, 并促进了在 CEI 和 SEI 中锂聚甲醛(LiPOM)的形成。在高温下, TO 引发 THF 的阳离子开环聚合, 形成以 AGGs 为主的溶剂化结构, 并原位生成聚醚, 从而提高高温性能和安全性。

FB02-35**钠离子电池普鲁士蓝正极及功能性电解液的设计及性能研究**乔芸*, 陈建, 樊思伟, 高云, 常相雾, 刘逸杰, 徐春梅, 郭旭峰, 刘阳*
上海大学

钠离子电池具有资源丰富、成本低廉以及环境友好等优点，被认为是最有希望的下一代储能技术之一。在众多正极材料中，普鲁士蓝类似物具有开放的 3D 框架结构，丰富的氧化还原位点和成本低等优点。然而，普鲁士蓝类似物存在大量的晶格缺陷和结晶水、振实密度低、导电性差和结构不稳定等问题。因此，需要进一步通过技术创新和结构调控等策略提高其储钠特性。^[1-5]此外，电解液作为电池的血液，对电池的性能起到至关重要的作用。设计耐高温、耐高压、阻燃型及宽温域的电解液，能够有效地进一步提高电池的本征安全性及储钠特性，推进钠离子电池的商业化应用。