



中国材料大会 2024

暨第二届世界材料大会

CMC 2024 & WMC 2024

July 8-11, 2024

Guangzhou, China

A01-能源转换与存储材料

**A01-Energy Conversion and Storage
Materials**

Organized by

Chinese Materials Research Society

Website: <https://cmc2024.scimeeting.cn>

A01. 能源转换与存储材料

分会主席：郭正晓、陈人杰、黄学杰、潘洪革、齐志刚、施志聪、贾礼超、武英

报告

A01-01

待定

郭正晓

香港大学

A01-02

富锂正极材料中 Li_2MnO_3 晶畴尺寸和表面结构调控

邱新平

南方科技大学

富锂层状氧化物 (LLOs) 材料, 通常可以表示为: $x\text{Li}_2\text{MnO}_3 \cdot (1-x)\text{LiTMO}_2$ (TM = Ni, Mn, Co 等), 因其高比容量 ($> 250 \text{ mAh g}^{-1}$) 和低成本等优势, 被认为是最具潜力的下一代锂电正极材料。LLOs 中过渡金属离子和氧离子的累积氧化还原促成了其极高的比容量。目前, 普遍认为 LLOs 由两个结构相干的纳米晶畴 (LiTMO_2 晶畴和类 Li_2MnO_3 晶畴) 组成, 类 Li_2MnO_3 晶畴中具有 Li-O-Li 构型的晶格氧可以参与电荷补偿[1-3]。尽管提供了高容量, 但是氧化还原过程不可避免会伴随着 O_2 分子的形成, 并引发材料性能衰减[4]。本制备出具有均匀分散且小尺寸的一类 Li_2MnO_3 晶畴和无序岩盐结构保护层的富锂正极材料, 其具有高度可逆的氧化还原和优异的结构稳定性, 在 0.1C 倍率下具有 276.5 mAh g^{-1} 的高可逆比容量, 且表现出优异的循环稳定性(在 1C 倍率下 300 次循环后容量保持率为 85.4%, 平均放电电势衰减速率仅为 $0.76 \text{ mV cycle}^{-1}$)。利用 XPS、EELS、XRD、AC-STEM 等系统地研究了 LNMO 的化学价态、表面结构及类 Li_2MnO_3 晶畴尺寸和分布情况。

A01-03

锂金属复合负极研究进展

邓永红

南方科技大学

锂金属电池 (LMBs) 是后锂离子电池时代的代表, 目前正处于从基础研究到商业化的过渡过程, 待解决的关键问题是锂枝晶、体积膨胀且界面不稳定。针对此问题, 我们可以从多个方面入手: (1) 原位 SEI 优化: 注入少量功能电解液, 电化学反应形成电解质/电极界面 SEI 膜, 阻碍锂枝晶生长。(2) 人工 SEI 层面: 具有自平滑机制的富锂反钙钛矿固态电解质界面膜可有效抑制锂枝晶生长; 具有自组织核壳结构的液态金属/锂复合负极可有效地抑制锂枝晶。(3) 三维复合锂负极结构层面: 三维亲锂 CuZn 合金集流体和零体积设计的三维中空锂集流体可以有效引导锂均匀沉积, 抑制锂枝晶生长和体积膨胀; 通过界面层与多孔层协同调控得到表现零体积膨胀三维中空锂复合负极, 解决锂金属负极的枝晶生长、界面不稳定、体积膨胀大的本征问题。

A01-04

锂离子电池富锂锰正极材料的改性策略及其在全固态电池中的应用

高明霞

浙江大学

锂离子电池层状富锂锰氧化物正极材料具有高于 280 mAh g^{-1} 的理论容量和大于 1000 Wh kg^{-1} 的高能量密度, 电压平台适中, 成本低, 是极具潜力的下一代高能量密度锂离子电池正极材料, 但其倍率性能差, 首次库伦效率低, 在循环过程中容量和电压持续衰减等问题严重阻碍了其商业化应用。本工作采用多种策略对富锂锰氧化物正极材料进行改性。通过对富锂锰氧化物进行表面还原和包覆处理, 构建了包含包覆层、层状-尖晶石异质层和表面氧空位的表面结构; 通过简单的在电极浆料制备过程中添加碱金属硫化物, 提高了表面氧空位浓度, 构建了对氧的可逆氧化还原对。通过上述措施, 有效抑制了富锂锰正极材料在循环过程中氧气的释放和层状结构向尖晶石结构的转变, 减少界面副反应的发生和过渡金属的溶解, 从而提高富锂锰正极的循环稳定性。实现了在 1C 下的首次容量达 234 mAh g^{-1} , 500 次循环后容量保持率达 96.2%。同时, 通过调控富锂锰材料的成分, 显著提高了其电子电导率, 首次将富锂锰正极材料用于全固态电池, 在全固态电池中在 0.5C 下具有 244 mAh g^{-1} 的高放电容量, 具有 853 Wh kg^{-1} 的高能量密度, 在 0.5C 电流密度下循环 1000 次后容量保持率高达 83%。

A01-05**基于离子吸附效应调控优化聚合物电解质的凝聚态结构和力电性能**

傅雪薇

四川大学

具备高离子电导率和高强韧性的聚合物电解质薄膜是未来固态电池的关键材料之一。然而，聚合物电解质与链段运动高度耦合的离子传导机制导致了这些性能之间的内在矛盾。我们通过调控高分子链、纳米填料或溶剂分子与离子之间的吸附效应，有效优化了聚合物电解质的凝聚态结构，全面提升了其导离子和力学综合性能。基于该策略，我们制备了一系列高导高强韧聚合物电解质薄膜，其表现出类似隔膜的机械性能（强度高于 20MPa，韧性高于 80MJ/m³（约隔膜的 4 倍）），以及接近 1mS/cm 的离子电导率，从而展现出优良的固态器件性能。具体而言，通过离子增容效果，强化 PEO 和 PVDF 之间的链吸附效应，制备了类神经网络梯度纳米相结构。此外，利用带电纳米填料和离子复合体之间的强静电吸附效应，在 PVDF 电解质中构筑了具有低传输能垒特性的溶剂化结构。最终，在上述体系中实现了超出常规的综合性能，包括高强韧性、高离子电导率和高锂离子迁移数等。研究成果有望为高性能聚合物电解质薄膜的设计和制备提供普适性策略和理论指导。

A01-06**氧空位 CoMn₂O₄/Mn₃O₄/MnAl₂O₄(OV) 尖晶石异质结构超电性能研究**

张嫒

台州学院

脱合金法制备的无粘结剂一体式微纳米多孔电极，引入含有缺陷的高活性物相，是实现高性能电极材料的一个有效策略。一方面，无粘结剂的独立电极，可以减少不可逆反应的发生，提高材料电荷传输能力以及循环寿命；另一方面，引入其他金属原子，可以形成更多的物相，诱导缺陷的形成，增加材料的导电性，增强反应位点的活性。本研究通过采用脱合金结合电沉积法，将 Mn 作为第二掺杂金属引入 CoO/CoAl₂O₄ 体系中，成功制备含有氧缺陷的 CoMn₂O₄/Mn₃O₄/MnAl₂O₄(OV) 纳米片尖晶石 c-c 异质结构阵列。结合 DFT 模拟研究物相转变、氧空位缺陷以及 CoMn₂O₄/Mn₃O₄(OV) 异质结构对于电化性能的作用机理。

A01-07**高性能电池新材料及智能电池**

陈人杰

北京理工大学

高性能电池新材料及智能电池

A01-08**复合聚合物固态电解质**

王新东

北京科技大学

与传统液体电解质相比，固态电解质能搭配金属负极，提供更高的能量密度，同时不会泄漏，具有更好的安全性。复合聚合物电解质(CPEs)综合了无机固态电解质(ISEs)与聚合物固态电解质(SPEs)的优势，因其可加工性和高安全性是一类有广泛应用价值的固态电解质。然而，复合聚合物电解质还存在众多的挑战，本研究团队研究了多种新型 CPEs，将 Li_{6.4}La₃Zr_{1.4}Ta_{0.6}O₁₂ 纳米颗粒连接成 3D 骨架结构，通过表面构筑 LaRuO₃ 界面层，延长 Li⁺ 渗流路径，使 Li⁺ 具有三维传输网络，同时增加了无机填料与聚合物之间的相互作用位点；通过表面功能化策略构建烧绿石结构 La₂Sn₂O₇ 界面层在超离子导体中引入缺陷，加快锂离子传输，增加自由锂离子浓度，提高锂离子电导率。本报告将从室温下离子电导率不佳（10⁻⁸ 到 10⁻⁵ S cm⁻¹），与电极之间的接触不良，高电压兼容性差、抑制锂枝晶生长以及低温性能方面等问题出发，以电解质设计策略为手段，阐述填料的形貌、含量以及类型等对 CPEs 的影响，发展具有高离子电导率和长循环寿命的实用聚合物基电解质，推动固态电池技术的实际应用和发展。

A01-09**用于人体热管理的柔性热电器件**

吴波

HONG KONG CENTRE FOR CEREBRO-CARDIOVASCULAR HEALTH ENGINEERING

皮肤是人体面向外界环境的多功能窗口，它不仅是人体抵御有害物质的保护屏障，也是感知和与周围环境互

动的生物传感器。尽管皮肤非常重要，但其自我调节能力有限，尤其是体温调节能力，在高温和消防安全等不断变化和苛刻的场景中可能会出现。个人热管理器件集成环境感知、温度调节和能量捕获等功能，可以有效帮助人体应对极端的外部环境。在所有热管理解决方案的替代方案中，可穿戴热电器件因其可靠的温度感知和双向热电转换能力，已经被认为具备优异的人体热管理能力。在我们的工作中，系统地研究了基于纤维、薄膜等形态材料构筑柔性热电器件的基本策略，并探究其在人体温度感知、热能捕获以及通电制冷中的应用（*Adv. Funct. Mater.* 2024, 2402319; *Chem. Eng. J.* 2023, 453, 139749; *J. Alloys Compd.* 2023, 945, 169260; *Nano Energy.* 2021, 89, 106487; *Adv. Funct. Mater.* 2019, 29, 1900304）。此外，我们进一步将柔性热电器件与其他能源器件（光伏、电致变色）结合，探索热电材料及其器件更广泛的应用前景。

A01-10

硫族化合物纳米结构的设计构筑与热电性能调控

韩广

重庆大学

解耦载流子和声子输运并获得优异力学性能是热电材料与器件领域的重要难题。针对环境友好型金属硫族化合物，本研究发展了孪晶工程及纳米复合策略，实现热电输运性能及力学性能的协同提升。针对高丰度 Cu_5FeS_4 ，通过溶液化学法可控、宏量合成了具有特殊核壳结构的 Cu_5FeS_4 二十面体纳米晶，实现该纳米晶尺寸调节及高密度孪晶界引入，显著提升了该硫化物的热电优值和维氏硬度；采用原位纳米复合策略，实现 Ag_2Se 等硫族化合物的复合材料制备，实现晶格热导率降低、抗压强度增强及平均热电优值提升。二十面体孪晶工程及原位纳米复合策略为协同优化硫族化合物热电及力学性能提供了有效策略。

A01-11

新型固态电解质制备及其在固态电池应用

汤卫平

上海交通大学

在上届会议上本研究团队报道了以钠离子导体 $\text{Na}_3\text{Zr}_2\text{Si}_2\text{PO}_{12}$ 、 $\text{Na}_3\text{La}(\text{PO}_4)_2$ 为前驱体，采用离子交换的方法，成功地合成了新型锂离子固态电解质 $\text{Li}_3\text{Zr}_2\text{Si}_2\text{PO}_{12}$ （简称 LZSP）和 $\text{Li}_3\text{La}(\text{PO}_4)_2$ （LLPO）。本届会议上，将报告 LZSP 固态电解质在固态电池的应用。LZSP 可以用于制备复合固态电解质薄膜，得到的含有 60wt% LZSP 固含量的复合固态电解质薄膜显示了 0.7 mS 的离子电导率及其 300% 的机械拉伸率，以及良好的电化学稳定性，用该复合薄膜制备的软包电池显示了良好的充放电性能；同时 LZSP 也可以作为隔膜的涂层。使用 LZSP 涂层隔膜、NCM811/LFP 混合正极、锂金属负极的软包电池的能量密度超过 460Wh/kg，显示了良好的充放电性能和安全性。

A01-12

高性能钒基磷酸盐类电极材料的制备及其储能性能研究

孙志鹏

广东工业大学

钠离子电池因钠资源储量丰富、易于开采且价格低廉而成为一种极具应用潜力的规模储能技术。然而较大的钠离子半径导致其脱嵌动力学迟滞、电极材料体积膨胀严重，严重制约了钠离子电池的综合电化学性能。因此开发具有快速钠离子扩散通道和稳固晶体结构的电极材料是钠离子电池研究的关键。在众多储钠材料中，钒基磷酸盐类化合物具有钒离子价态多变且充放电过程体积变化小等优点，是一类重要的储钠电极材料。但是，这类材料的电子导电性较差、颗粒易于团聚以及循环过程中的形貌结构不稳定，导致其实际储钠容量低、循环性能差且倍率性能不佳。针对上述挑战，本研究通过复合结构设计，微观形貌调控，以及金属离子掺杂，大幅提升其储钠性能。

A01-13

考虑平均应力效应的燃料电池用质子交换膜蠕变-疲劳裂纹扩展行为研究

蔡亮

北京理工大学

该研究通过开展原位力学实验，探究了燃料电池用质子交换膜在相同应力幅值但不同应力比的循环载荷作用下的蠕变疲劳裂纹扩展行为。通过原位测量循环塑性区来量化疲劳损伤分量，同时通过原位扫描电子显微镜监测裂纹扩展过程中的尖端

形态。结果表明,在平均应力较高的循环载荷作用下,裂纹的扩展速率相对提高。此外,在不同的应力比下检测到相同的循环塑性区尺寸,这表明在一个循环内施加的疲劳损伤与应力幅度有关,而与平均应力水平无关。疲劳损伤和蠕变损伤的比例取决于平均应力水平。此外,高平均应力引起的蠕变损伤会导致裂纹前缘孔洞的频繁出现,从而加速裂纹的扩展。最后,基于损伤累积理论,提出了一个基于黏弹塑性材料本构损伤的裂纹扩展数值计算模型。该数值计算模型能够较好地预测不同应力比下的蠕变-疲劳裂纹扩展速率。该模型还证明了当应力比为 0.1 时,疲劳损伤占主导地位,而随着应力比的增加,蠕变损伤占比不断增加。

A01-14

新能源电池材料中关键性表征技术实例分享

余昆鹏

科学指南针

新能源电池材料中关键性表征技术实例分享

A01-15

金属锂 / 固体电解质界面研究

黄学杰

中国科学院物理研究所

金属锂 / 固体电解质界面研究

A01-16

废旧锂离子电池中锂化石墨负极的回收与再生利用

徐建铁

华南理工大学

高效回收废旧锂离子电池中锂化石墨负极不仅可以减少因石墨(锂)矿过度开采和高度提纯而导致的成本过高、环境污染过重等问题,还可以有效地缓解石墨(锂)的供需紧张关系。研发精确分离并高效回收锂和石墨的方法是发展电池回收技术的关键。水热法处理锂化石墨负极,在去除 SEI 膜并形成催化活性点的基础上利用水浸出提纯 Li_2CO_3 ,并同时实现了多孔石墨的转化。基于回收多孔石墨的丰富多孔结构和边缘缺陷等特点,利用多孔石墨为原料继续制备了一系列电化学性能优异的多孔杂原子(官能团)掺杂碳基电极(复合)材料和电催化剂。

A01-17

面向产业化的高性能硅基负极材料和预锂化策略研究

邵怀宇

澳门大学

开发出具备首次库伦效率高,结构稳定性强,制备成本低,体系兼容性强等特点的硅基负极对于提升动力电池的能量密度和使用寿命至关重要[1]。硅氧/石墨复合材料作为一种商业化可行性较高的负极材料既可以利用硅基材料的高可逆容量,又保留了石墨作为商业化负极的优势,成本低,循环性能好[2-3]。我们系统地研究了不同容量混合负极中硅基材料的膨胀行为对于石墨颗粒的影响。基于 XRD 的测试结果,随着混合负极中硅氧材料的比例提高,石墨的结晶度下降。SEM 中也观测到硅氧颗粒周围的石墨颗粒尺寸及表面形貌发生明显变化。XPS 的分峰解析表明了高硅氧比例导致石墨颗粒的 SEI 增多,表明了高强度的物理破碎引起了石墨颗粒 SEI 的反复再生更新。长循环 CV 曲线显示了石墨的嵌锂电位随硅氧比例的增加而偏移,表明石墨的嵌锂能力呈现出明显的退化。该研究证明了石墨和硅氧材料物理性质的不匹配引起的混合负极的性能变化,为解释混合负极循环后容量衰减的原因和开发具有更高容量混合负极提供了新思路。此外,我们开发出适配于硅基负极的具备常规环境稳定性的 Li_xSi 预锂化添加剂。基于 PFPE 与 Li_xSi 较低的吸附能,实现了 PFPE 对于 Li_xSi 纳米颗粒的原位包覆,构建了无机(LiF)-有机(Li-PFPE)混合界面保护。具有碳氟长链结构的 PFPE 表面自由能低,具有良好的疏水性。该预锂化添加剂 $\text{Li}_x\text{Si}@LiF/PFPE$ 在相对湿度为 40% 的湿空气中,表现出 800 mAh/g 的预锂化容量和 60% 以上的剩余容量百分比。通过预锂化添加剂 $\text{Li}_x\text{Si}@LiF/PFPE$ 进行预锂化的氧化亚硅负极,其首效和循环稳定性均有显著提升。该预锂技术对应的生产工序相对温和,操作简单,适配于目前电池企业的生产环境。

A01-18

Unlocking High-Voltage Lithium Metal Battery via Solvent Screening and Interfacial Manipulation

米宏伟

深圳大学

Parlous structure integrity of cathode and erratic interfacial microdynamics under high potential take responsibility for the degradation of solid-state lithium metal batteries (LMBs). Here, high-voltage LMBs have been operated by modulating the polymer electrolyte intrinsic structure through intermediate dielectric constant solvent and further inducing the gradient solid-state electrolyte interphase. Benefiting from the chemical adsorption between trimethyl phosphate (TMP) and the cathode, the gradient interphase rich in LiPF_xO_y and LiF is induced, thereby ensuring the structural integrity and interface compatibility of the commercial $\text{LiNi}_{0.8}\text{Co}_{0.1}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_2$ (NCM811) cathode even at the 4.9 V cut-off voltage. Such universal screening method of electrolyte solvents and its derived electrode interfacial manipulation strategy opens fresh avenues for quasi-solid-state LMBs with high specific energy.

A01-19

固态锂金属电池的“模型化”TEM 原位表征

王鸣生

厦门大学

固态锂金属电池因其有望实现更高的能量密度以及更好的安全性而备受业界关注。然而，固态电解质与锂金属的界面问题是目前困扰固态电池研发的最重要挑战之一，其中两个关键问题是：（1）锂枝晶渗透固态电解质而导致电池内部短路；（2）锂金属溶出过程中产生界面孔洞导致阻抗增加及电池极化。这些问题的解决有赖于先进的表征手段的介入，特别是需要高空间分辨率、可视化的表征技术为研究相关界面过程提供直接可靠的证据。本研究将选择有代表性的高离子电导的 LLZO 固态电解质，通过原位电镜技术构造出可供实时观察的各种 LLZO/Li 界面，为研究以上界面问题提供关键证据。此外，我们还将针对这些界面问题探索新的解决方案。如构筑三维锂金属负极宿主结构，以改变锂离子/原子在界面处的运输方式，消除界面处的有害应力积累，从而避免枝晶生成以及消除界面处的空隙。这些研究有助于揭示相关固态界面过程的一般性规律，并为推动下一代固态电池产业的发展提供有效的技术方案。

A01-20

锂电池超声波扫描技术及其在失效分析中的应用

沈越

华中科技大学材料科学与工程学院

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。

A01-21

光充电材料中的电子-离子耦合存储

阮秋实

东南大学

光充电半导体材料在能源转换与存储过程中发挥着重要作用，其中光诱导的电子-离子耦合存储过程十分关键。其作用体现在以下几个方面：首先，光照时产生的电荷能够通过光诱导的电子-离子耦合存储机制在黑暗条件下被稳定储存。这一特性使得光充电半导体材料能够在没有光照的情况下持续催化反应，实现太阳光和光催化反应的解耦。其次，通过光诱导的

质子-电子耦合存储，能够提升锂离子电池中光响应材料电极在光照条件下的储能容量。这意味着光充电半导体材料在储能方面具有更高的效能，可通过光能转化为电能并在储能设备中进行长时间的有效储存。报告人将汇报光充电半导体材料中的光诱导电子-离子耦合存储机制、动力学过程、稳定策略以及在暗反应催化及储能方面的关键作用。

A01-22

界面应力耗散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 mAh 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接触。有研究表明 LLZO 的机械失效是导致枝晶刺穿的主要原因，同时也是引起枝晶生长的主要原因。而 LLZO 的机械失效主要源于锂沉积时产生的局部高内应力。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。同时该 PTFE 膜的高柔韧性也有助于 LLZO 与 Li 的界面紧密接触，由此减少锂枝晶生长及界面阻抗。因此，在具有节点-纤维结构的 PTFE 缓冲层的协助下，LLZO 基锂对称电池可以实现 0.2 mA cm^{-1} 电流密度下超过 2000 小时的稳定循环，其临界电流密度可高达 5 mA cm^{-1} 。此外，组装的磷酸铁锂和高负载量的 NCM811 全电池也可实现较好的循环稳定性和倍率性能。

A01-23

锂离子电池磷酸锰铁锂正极材料的研究进展

洪晔

广东技术师范大学

新能源汽车产业的高速发展对锂离子电池的能量密度、功率密度、制造成本及安全性能提出了更高要求。得益于磷酸铁锂材料的商业化应用，具备高电压、高安全、低成本等优势橄榄石型磷酸锰铁锂正极材料成为锂离子电池材料未来发展的重要方向之一。针对该材料电子电导率和锂离子扩散系数较低的固有缺点，我们从体相结构设计和界面改性入手，实现材料微观结构的精细调控及导电界面的有效构筑，获得倍率性能及循环性能较优的复合材料。最后，探讨了磷酸锰铁锂正极材料的未来挑战。

A01-24

固态电池的界面研究

杨文

北京理工大学

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、电池内部的界面兼容性差，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 PEO 固态电解质-高压正极界面衰变问题，基于表面包覆-体相掺杂原则，设计出 $\text{LiNi}_{0.83}\text{Co}_{0.07}\text{Mn}_{0.1}\text{O}$ (NCM83) 表面包覆 $\text{LiNb}_{0.6}\text{Ti}_{0.5}\text{O}_3$ (LNTO) 层，同时体相掺杂 Nb/Ti 的高压正极材料 (CNCM83)，获得了稳定的全固态聚合物电解质-高压正极界面¹。这一策略掺杂包覆也可以适用于构筑 4.5V 硫化物固态电池。针对全固态电解质-锂负极界面锂枝晶生长问题，以 AgTFSI 为添加剂，改性 PEO 基固态电解质 (PEO-Ag)，原位构建出梯度亲-疏锂 SEI 膜，即底部为亲锂 Li-Ag 合金层，顶部为疏锂的富 LiF/Li₃N 无机层。富 LiF/Li₃N 无机层提高了 SEI 膜机械强度²。LiF 具有高界面能，Li₃N 具有高的锂离子扩散系数，两者协同诱导锂离子均匀沉积。采用 SEI 策略，我们也采用 Al、O 双掺杂提高 Li₃PS₄ 硫化物固态电解质的化学和电化学稳定性。得益于 Al、O 双掺杂的硫化物电解质与锂负极界面形成的包含 Li₂O 和 Li-Al 合金的界面层，确保了界面处锂离子的快速运输及均匀沉积³。

A01-25

Sn 基储锂负极在低温快响电池中的应用基础

胡仁宗

华南理工大学

目前采用低嵌锂电位石墨作为负极的锂离子电池在低温充电时，由于电荷传输阻抗增大导致嵌锂电位降低，负极表面极

易析锂而导致电池性能衰减或安全问题。因此采用嵌锂电位高、无析锂风险的负极材料是提升电池低温充电能力的技术途径之一。我们研究发现具有适中嵌锂电位的金属 Sn 在低温储锂过程会转变为晶格致密度更低的 α 相, 更利于 Li^+ 在晶体内的快速迁移而降低低温充放电极化, 加以利用可进一步提升 Sn 基负极材料的低温储锂性能。我们拟利用该负极体系来构建具备 -40°C 下快速充电能力的电池体系与器件, 为实现低温转化电能在高比能电池体系中的快速存储提供支持。本报告将主要介绍上述研究进展。

A01-26

新一代高能量长循环锂金属软包电池

牛朝江

郑州大学

锂金属因具有“轻质高能”的优势 (比容量 3860 mAh/g , 质量密度 0.534 g/cm^3), 替代石墨负极 (372 mAh/g) 后, 可大幅提升电池的能量密度, 已成为研发新一代高能量密度电池的热门选择之一。虽然目前锂金属电池已取得很多优秀的研究成果, 但大多是基于实验室扣式电池测试的结果, 与高能量密度电池的实际条件有明显差距。报告人基于产业化标准的安时级软包电池开展了系统研究。2019 年, 揭示了锂金属软包电池的容量衰减机制, 在 300 Wh/kg 、 1.0 Ah 锂金属软包电池中实现了 200 次稳定循环。2021 年, 提出了高能量密度锂金属电池极限平衡调控机制, 首次在 350 Wh/kg 、 2.0 Ah 软包电池中实现了 600 次长循环。

A01-27

硅基锂离子电池负极材料

周亮

武汉理工大学

硅基负极材料, 如单质硅、氧化亚硅, 具有理论容量高、储量丰富、廉价、环境友好、合成简易等优点, 是下一代高能量密度锂离子电池的首选负极材料。然而, 单质硅、氧化亚硅等材料充放电过程中体积膨胀大、本征导电性差、首次库伦效率低, 严重限制了其在锂离子电池中的实际应用。针对硅基负极材料体积膨胀大、导电性差等瓶颈, 报告人发展了构筑亚纳米复合结构、构筑复杂中空结构、表面改性等策略。理性的结构设计有效缓解了材料的体积膨胀, 提高了材料的导电率, 大幅提升了硅基负极材料的循环稳定性。

A01-28

金属锂电池功能复合界面的微尺度研究

刘育京

浙江工业大学

本报告将围绕高比能金属锂电池中功能复合界面的微观构效关系研究, 针对界面功能复合结构的形成机理与演变规律等关键科学问题, 从纳米尺度讨论并揭示金属锂二次电池中功能复合界面作用机制, 展示敏感电池材料微观解析及调控的特色系列研究: 1. 建立了自组装单分子层构筑高稳定性锂阳极界面的普适性方法, 首次发现长程有序分子还原电解质的界面催化作用, 解决了电解质不可控分解的突出难题[1, 2]。2. 发展了敏感高分子及金属锂界面纳米尺度可视化的表征方法, 率先以实验验证了近 50 年的聚合物固态电解质界面结构的理论预测[3, 4]。3. 提出了功能复合结构对界面的稳定机制, 获得了最高循环稳定性之一的高比能金属锂电池[5]。

A01-29

新型锂盐赋能极端条件高性能电解液

刘凯

浙江工业大学

高能锂电池的倍率性能受制于电解液。我们设计了一类新型功能锂盐, 它的特殊分子和超分子结构能够使得碳酸酯电解液具有大的表观给体数 (DN) 和 Li^+ 转移数, 这赋予了其新颖的 SEI 成膜机制, 产生富无机物种的致密膜结构、高质量的 CEI 电解质界面层, 因此赋予了高能锂金属电池的高循环性和超快速充电/放电性能。本报告中, 我们将介绍其他一系列新型功能锂盐的设计原则及性能和机理研究, 揭示新型锂盐分子构型-超分子结构的重要性。同时, 也将介绍其他系列新型高倍率电解液体系的设计和结果。

A01-30

杂化氮唑框架-电池隔膜及应用

黄文欢

陕西科技大学

杂化氮唑框架-电池隔膜及应用

A01-31**固态锂电池电极界面设计与性能研究**

何平

南京大学

全固态锂电池采用固态、不挥发、不易燃电解质代替传统的有机液态电解质，在开发高能量、安全、宽温度范围的储能器件方面具有很大的优势。然而，在这类电池中电解质/电极材料的界面出现的化学/电化学不稳定性、接触阻抗大、机械应力失效、空间电荷层等问题限制了电池系统的实用化。本报告介绍了近年来本课题组针对以上固态电池普遍存在的科学问题所开展的固-固界面组成、结构设计和运输机制研究，包括无碳无粘结剂的锂合金固态负极，弹性电解质，金属锂表面 SEI 层原位构筑，固-固界面的限域溶解化学机制，固-固界面空间电荷层对锂离子运输特性影响的观测以及固-固界面光热增强效应。这些工作在很大程度上加深了人们对固固界面运输过程的理解，提升了金属锂基负极全固态电池的容量的界面稳定性。

A01-32**电催化 CO₂ 制甲酸体系研究**

陈洲

厦门大学

可再生能源驱动的电催化 CO₂ 还原反应 (CO₂RR) 对碳资源的高效清洁利用具有重要意义，是实现双碳目标的重要举措。甲酸是皮革，农药，制药和橡胶等化工过程的关键原料，还可应用于燃料电池以及氢能存储介质等领域，具有可观的经济价值。我们从催化材料的表面电子结构设计和反应分子的可控活化展开研究，提高电催化 CO₂RR 制甲酸产物的催化活性。催化剂材料表面电子结构微环境显著影响 CO₂RR 活性、选择性和稳定性，我们通过发展纳米材料可控合成方法，精准设计电催化 CO₂ 还原纳米材料结构，促进 CO₂ 活化和降低反应中间体生成能，提高电催化 CO₂RR 制甲酸选择性和稳定性。结合多种原位/准原位的结构和谱学表征，深入研究 CO₂RR 催化剂重构过程，为深刻理解不同反应条件下催化剂表界面真实催化活性位点的动态演变提供实验依据，同时，借助密度泛函理论研究催化反应机理，为建立催化剂真实活性位点与催化反应性能之间的构效关系提供理论依据。

A01-33**电解质原位固化技术在锂/钠金属电池中的应用**

沈之川

广东工业大学材料与能源学院

储能产业是我国新能源领域的重要支撑力量，也是世界各国竞相争夺的战略性新兴产业，而锂/钠电池在该领域的应用中占据着优势地位。锂/钠金属因具有高的理论比容量而为电池负极材料的设计提供了潜在的机遇，研究者借此开发出适合储能行业需求的锂/钠金属电池，其在发电侧储能、输配电侧储能以及用电侧储能细分场景的应用能够加强我国能源供应链的安全性。然而，基于液态电解质的锂/钠金属电池在普及过程中也面临着严峻的安全问题，因此，为了获得能够在不同电流密度条件下稳定运行的锂/钠金属电池，对电解质进行原位固化处理将是一个有效的策略。同时，通过设计合理的改进措施，构筑能够在不同电流密度下稳定长循环的锂/钠金属电池，阐释相关的电池运行行为机制，有利于推动电解质原位固化技术在储能电池领域中的商业化进程，对于保障我国能源供应和产业安全具有重要意义。

A01-34**热等离子体过程强化制备硅基材料及其负极性能研究**

杨宗献

河南大学

热等离子体具有高温、高能量密度、高化学活性等特点，可以有效促进材料制备中的传热、传质和化学反应过程，被称为“等离子体过程强化”。借助热等离子体可实现低维、致密、均一的 Si 纳米材料的可控制备，满足锂离子电池对高性能负极材料的迫切需求。

基于热等离子体强化蒸发-冷凝过程，以微米级 Si 为原料，通过调节热等离子体温度场分布，选择性合成零维 Si 纳米球 (Si NSs) 以及一维 Si 纳米线 (Si NWs)^[1]；以微米级 SiO 为原料，实现一维 SiO NWs 的制备，结合表征数据和理论模拟揭示了其自晶种催化生长机制^[2]，接着通过对温度场，气体、物流场进行调控，实现三维 SiO 纳米网 (SiO NNs) 的制备^[3]；进一步地，将冶金 SiO 与冶金硅以不同比例球磨混合后，利用热等离子体实现不同硅含量的 SiO_x NWs 的制备^[4]。

基于热等离子体强化化学反应过程，以热等离子体 Si NSs 为硅源、乙醇为碳源，利用热等离子体“高温、骤冷”瞬态过程，使乙醇气化裂解并与纳米硅发生反应，在纳米硅表面生成薄 SiO_x/SiC 非晶层并通过该非晶层原位生成石墨烯纳米片 (GNSs) 包覆层制备了 Si@GNSs^[5]；以 SiCl₄ 为原料，通过氢热等离子体强化还原过程，制备了直径约 90 nm 的 Si NSs，并揭示了氢热等离子体强化 SiCl₄ 还原制备 Si NSs 的生长机制^[6]。

A01-35

金属电池界面化学行为调控

王骞

太原理工大学

当下，锂离子电池在消费类电子产品以及电动汽车中得到了广泛的应用。然而，现有的锂离子电池体系受到正负极材料理论容量的限制，其能量密度很难突破 300 Wh kg⁻¹。随着市场/消费者对电池能量密度和安全性的不断追求，金属电池受到了研究者的青睐，尤其是高比能的锂金属电池和高安全的锌离子电池，被认为是最具有前景的下一代电池体系。然而，现阶段金属电池在循环稳定性和安全性方面还面临着巨大的挑战，特别是电极/电解液界面相容性较差、副反应严重。

基于此，我们围绕金属电池界面化学展开系列研究，取得了一系列创新结果。主要有：1) 基于小分子的界面重构策略；2) 基于电解液的优化与设计；3) 苛刻服役环境下电池界面化学研究。

A01-36

锂离子电池硅负极材料的常温固相包覆

刘辉

湖南农业大学化学与材料科学学院

高能量密度锂离子电池硅负极的实用规模化推进，需解决硅材料的体积膨胀以及其与电解液的界面稳定性问题。当前主流方法是对硅负极材料进行碳包覆。碳包覆不仅构建导电网络增加硅材料的导电性，同时可避免硅材料与电解液的直接接触，减弱了电解液与水的副反应产物 HF 对硅材料的腐蚀。目前较为常用的碳包覆方法是将大分子有机物分散在硅材料表面，再通过高温烧结碳化的方法进行包覆。然而，硅材料在高温碳包覆过程中再结晶长大粗化，最终会降低其循环稳定性。

本工作旨在解决避免硅材料再结晶长大粗化的前提下进行包覆的问题。首先，采用课题组自主开发的常温纳米包覆机对硅材料进行包覆；此外，为兼顾常温包覆可行性以及硅材料的导电性，选定快离子导体纳米材料 TiN 作为包覆材料。常温固相包覆可避免硅合金中的非晶/纳米硅在高温下晶粒再结晶长大现象，且包覆 TiN 后的硅材料表现出更小的阻抗，和较高的锂离子扩散速率，从而表现出更优异的循环稳定性及倍率性能。在 55°C 的工作温度下，包覆后的材料也展现出更稳定的电化学性能。电化学测试结果表明，包覆材料在 100 次循环后任剩余 850.0 mAh g⁻¹ 容量；电池的恢复性较好，经不同倍率测试后回到 0.2 C 时任剩余 850.3 mAh g⁻¹ 容量；循环后经 TOF-SIMS 进行界面分析结果表明，包覆材料具有良好的界面稳定性，生成了较薄的无机组分占比更多的 SEI 膜。

A01-37

Approaches Towards High-Energy-Density Anode-Free Lithium Metal Battery

曹译丹

清华大学深圳国际研究生院

A01-38

高比能锂硫电池设计和优化

方如意

浙江工业大学

锂硫电池是实现 500Wh kg⁻¹ 能量密度的有效途径之一。但是由于硫正极的低电导率、体积膨胀、穿梭效应等诸多问题，制约了锂硫电池的发展。本论文为了改善 Li-S 电池电化学性能，通过引入 Se，并将 Se_{1-x}S_x 封装在具有三互连多孔结构 (NC@SWCNTs) 的氮掺杂碳框架中，制备了自支撑正极。其中 Se_{1-x}S_x 通过 CO₂ 超临界辅助技术均匀分散在三维多孔碳基

质中, NC@SWCNTs 宿主不仅为 $\text{Se}_{1-x}\text{S}_x$ 提供空间限域效应和中间体的有效物理/化学吸附, 而且还提供高导电框架以促进离子/电子传输。所制备的硒-硫固溶体 ($\text{Se}_{1-x}\text{S}_x$) 正极, 具有比 S 更高的电子电导率和比 Se 更高的放大比容量比容量, 是一类有前途的高性能正极材料。得益于合理的结构和化学成分设计, NC@SWCNTs@ $\text{Se}_{0.2}\text{S}_{0.8}$ 正极表现出优异的循环稳定性 (0.2 A g^{-1} 下 200 次循环后放大比容量为 632 mA h g^{-1}) 和优异的倍率性能 (2.0 A g^{-1} 下为 415 mA h g^{-1})。NC@SWCNTs@ $\text{Se}_{0.2}\text{S}_{0.8}$ 自支撑正极不仅提供了高性能正极的新设计策略, 而且为制造自支撑正极以实现高能量密度锂电池的实际应用提供新方法, 有望构建新一代高比能、高性能锂硫电池

A01-39

基于原子局域调控的趋于常温吸放氢 Mg 基储氢合金

朱敏

华南理工大学

基于原子局域调控的趋于常温吸放氢 Mg 基储氢合金

A01-40

Thermodynamic Tuning and Database Construction on New Energy Materials

孙立贤

桂林电子科技大学

The rapidly increasing consumption of fossil fuel resources and the resulting environmental concerns have become the most important issues in the world. Therefore, an efficient, clean and renewable energy source to replace the fossil fuel resources is urgently needed. Energy storage and conversion technology is an important part of modern energy system, which involves a variety of physical and chemical processes. Through the theoretical calculation and experimental methods of thermodynamics tuning, most of the problems of energy storage, release and conversion can be solved efficiently. At the same time, the accelerated research and development of high-density hydrogen-storage materials are critical to the transition of the energy economy and the realization of the carbon peaking and carbon neutrality goals. The data-driven research paradigm-integrated high-throughput calculations, database, and machine learning is appealing to accelerate new material development. In this talk, I will summarize the recent research on thermodynamic tuning and database construction of new energy materials in my group.

(1) To solve the above problems, NiTiO_3 @h-BN and CoTiO_3 @h-BN prepared for the first time are introduced into LiAlH_4 by ball milling. LiAlH_4 doped with 7 wt% NiTiO_3 @h-BN, selected as an optimal doping sample, starts to release hydrogen at $68.1 \text{ }^\circ\text{C}$, and the total amount of hydrogen released is 7.11 wt% below $300 \text{ }^\circ\text{C}$. The activation energies (E_a) of the two-step hydrogen release reactions are 55.93 and $59.25 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$, which are 45.8% and 69.0% lower than those of as-received LiAlH_4 , respectively. Under 30 bar hydrogen pressure and $300 \text{ }^\circ\text{C}$ constant temperature, LiAlH_4 doped with 7 wt% NiTiO_3 @h-BN after dehydrogenation can absorb ≈ 1.05 wt% hydrogen. Based on density functional theory calculations, AlNi_3 and NiTi , in situ formed nanoparticles during ball milling, can decrease the desorption energy barrier of Al-H bonding in LiAlH_4 and accelerate the breakdown of Al-H bonding due to the interfacial charge transfer and the dehybridization. Furthermore, NiTi can enhance the adsorption and splitting of H_2 , promoting the activation of H_2 molecules during the rehydrogenation process.

(2) A novel homogeneity reinforced carbon aerogel with a well-interconnected porous structure was constructed by combining a flexible carbon resource from biomass guar gum with hard-brittle carbon from polyimide, to overcome severe shrinkage and poor mechanical performance of traditional carbon aerogel. The supporting carbon aerogel-encapsulated PEG produced the novel composite PCMs with good structure stability and comprehensive energy storage performance. The results showed that the composite PCMs displayed a well-defined 3D interconnected structure, and their energy storage capacities were 171.5 and 169.5 J/g , which changed only slightly after 100 thermal cycles, and the composites could maintain the equilibrium temperature at $50.0\text{--}58.1 \text{ }^\circ\text{C}$ for about 760.3 s. The thermal conductivity of the composites could reach $0.62 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, which effectively enhanced the thermal response rate. And the composite PCMs exhibited good leakage-proof performance and excellent light-thermal conversion.

(3) A novel CSE membrane is proposed, that consists of interwoven garnet/polyethylene oxide-Li bis(trifluoromethylsulphonyl)imide (LLZO/PEO-LiTFSI) microfibers. This CSE exhibits high Li-ion conductivity and exceptional Li dendrite suppression capability, which can be attributed to the uniform LLZO dispersion in PEO-LiTFSI and the vertical/horizontal anisotropic Li-ion conduction in the CSE. The uniform LLZO particles can generate large interaction regions between LLZO and

PEO-LiTFSI, which thus form continuous Li-ion transfer pathways, retard the interfacial side reactions and strengthen the deformation resistance.

(4) We show our results on establishing a Materials Genome Initiative database and the property prediction based on machine learning for hydrogen-storage materials. The datasets are constructed from published papers, Materials Genome Initiative databases, and high-throughput first-principle calculations. A hydrogen-storage materials database was established and hydrogen property predictions are carried out by using machine-learning methods. We believe that the accelerated development of new hydrogen-storage materials would be benefited from our database and platforms.

A01-41

高负载率碳纳米限域镁基储氢材料的原位合成及储氢性能研究

刘彤

北京航空航天大学

高负载率碳纳米限域镁基储氢材料的原位合成及储氢性能研究

A01-42

Development of Solid-state Electrolytes and Cathodes for Mg-ion Battery

严义刚

四川大学

Mg-ion battery is attracting increasingly attention, due to the high natural abundance (2% in the Earth's crust) and high theoretical volumetric capacity (3832 mAh cm⁻³). However, key issues, such as the shortage of suitable electrolytes and electrodes, remain unsolved, hindering the development of a competitive Mg-ion battery (MIB). One of major reasons is the slow diffusion in solid state, originated from the bivalent nature of Mg²⁺ cations with high charge density. For the electrolyte, the Mg²⁺ ion conductivity in solid form could be improved to the order of 10⁻⁴ S cm⁻¹ at 298 K in Mg(BH₄)₂·xNH₃ by incorporating oxygen vacancy-rich metal oxide nanopowders [1]. Results of AIMD simulation indicate that the surface oxygen vacancy can capture the [BH₄]⁻ anion in Mg(BH₄)₂·xNH₃ and promote the fast migration of Mg²⁺ cations on the solid/solid interface. For the electrode, doping of Fe could accelerate the Mg²⁺ diffusion and enhance the structural stability of MnO₂, which exhibits a high specific capacity of 205.9 mA h g⁻¹ at 0.1 A g⁻¹ and a capacity retention of 85.2 % at 2 A g⁻¹ up to 1000 cycles [2].

A01-43

阴离子调谐提升 2LiBH₄-MgH₂ 的循环稳定性

马仲亮

复旦大学材料系

2LiBH₄-MgH₂ 是一种潜在的储氢材料, 理论储氢容量高达 11.5%, 但 MgB₂ 形核诱导期较长和部分脱氢产物可逆性差严重限制了其进一步应用。与传统关注阳离子的催化作用不同, 本文提出了一个以前常被忽视的新视角——阴离子调谐。即引入过渡族金属硫化物作为添加剂, 其中 S²⁻ 在 2LiBH₄-MgH₂ 的脱氢/加氢循环过程中桥接 Li₂S 和 MgS 的可逆转化, 这种转化不仅增强了 Li⁺ 的迁移, 导致 B-H 键的快速失稳, 显著缩短 MgB₂ 的形核孕育期, 而且还明显提高了 2LiBH₄-MgH₂ 的循环稳定性, 即使在 50 次循环后储氢容量保持在 90% 以上。最后, 验证了过渡族金属硫化物调谐的通用性, 以及相应的过渡金属阳离子的匹配标准。该研究结果强调了添加剂中阴离子的作用, 将阴离子调谐从幕后推向了台前, 并最终拓宽了 2LiBH₄-MgH₂ 体系中催化剂的选择范围。

A01-44

共轭碳基材料的柔性储能

赵扬

Beijing Institute of Technology

新型储能器件的开发正朝着尺度多样化、轻质柔性化及微纳集成化等方向不断探索。具有共轭结构的碳纳米材料可为该类器件的进一步发展提供理想的材料平台。然而以共轭碳基材料为基元构筑电极结构时, 组装结构内各组分力学性能差异会引发内应力, 造成共价分子骨架断裂、分子构象转变(如弯曲、拉伸或扭转)或分子间有序结构崩坏等问题, 使分子内和分子间电子传输路径受阻, 进而导致储能器件性能降低甚至失效。因此, 精准调控共轭碳组装结构的内部应力并揭示应力耗散

对储能性能的影响机制对提升储能性能、稳定性及开发下一代柔性储能器件具有十分重要的意义。为此，我们针对共轭碳材料，在分子内、分子间、组装体微结构和宏观界面的不同尺度下对电极材料进行结构设计，发展了力学适配电极界面、内应力动态耗散微结构、常态化内应力模型，实现了共轭分子内、分子间以及界面的电子运输特性的精确调控，阐明了应变原位活化机制，成功实现了高导电、柔性电极材料的构筑，并探索其在智能、生物兼容等柔性储能领域的应用。该报告将介绍我们在碳基材料的多维加工方法、图案化制备，以及新型柔性储能器件领域所取得的进展。

A01-45

具有功能性的液晶添加剂用于稳定锌离子电池

欧阳柳章

华南理工大学

锌离子电池由于具有成本低、安全性高的优势，被认为是固定能量存储系统的理想候选者。然而，不可逆的锌剥离/沉积会导致严重的枝晶生长，导致电化学性能快速下降，进而使电池快速失效，从而限制了其大规模应用。并且，对于锌基高能电池来说，控制锌沉积行为是一项具有挑战性的任务。通常，锌沉积过程由离子传输、浓度梯度、局部电场动力学因素控制。目前，已经开发了多种策略来调节均匀化动力学。向列相液晶电解质由于其体积畸变和锚定自由能而能够引入额外的过电位，在促进离子传输和增强反应动力学方面具有巨大潜力。

在此，我们提出了一种具有向列相的液晶材料-5CB 作为功能性电解液添加剂。这种具有极化行为的添加剂具有流动性，可以动态调节锌离子沉积，实现锌离子局部集中分布，从而抑制锌枝晶生长并调控 Zn 沉积行为。液晶材料 5CB 引入额外的过电位可以加速锌离子的迁移，缓解负极/电解质界面上离子/电子分布不均匀，从而促进 Zn²⁺ 的均匀沉积和剥离。添加 5CB 的有机电解液在一系列电化学性能测试中表现出优异的循环稳定性，如 Zn||Zn 对称电池在 0.5 mA cm⁻² 可以稳定循环 2000h、增大电流密度 (1mA cm⁻²) 后可以稳定循环 800h。在 Zn-Cu 半电池稳定循环超过 400 次、并且在低温下使用该电解液的 Zn-Zn 对称电池也可以稳定循环超过 400h、使用聚苯胺 (PANI) 正极的全电池也显示出优异的电化学性能

A01-46

基于镁基材料的制氢及储氢技术研究

朱云峰

南京工业大学

氢能因其清洁、可循环和高能量密度的特性，被视为理想的低碳能源。高效低成本制氢及储氢技术是氢能开发利用的关键。镁基材料由于具有较高的储氢容量、便捷的水解制氢能力、以及丰富的资源和环境友好性，是一种有前途的固态制、储氢候选材料。本团队近期针对镁基材料制储氢展开了相关研究工作。首次将 Mg-Mg₂NiH₄ 复合体系用于水解制氢研究，借助 Mg₂NiH₄ 快速水解生成的超细纳米 Ni 与 Mg 形成的微原电池，加速 Mg 的电化学腐蚀，进而显著提升 Mg 的水解制氢性能。同时，通过控制球磨时间，水解盐溶液浓度，溶质添加方式等成功调节了 MgH₂ 制氢速率和制氢容量，实现了 MgH₂ 的可控制氢，并提出了基于溶液中阴离子和阳离子共同作用的“溶液离子效应”机制。此外，开发了一种用于镁基材料水解制氢的高效催化剂 Ni₃Fe/rGO，借助 Mg 与 Ni、Fe 之间的电化学势差以及 Ni、Fe 之间的协同催化作用，显著增强了 Mg 的水解制氢性能。在气态储氢方面，系统研究了多晶型 Mg₂NiH₄ 空气暴露后表面的物相组成与微观结构，揭示了内建电场对 Mg₂NiH₄ 脱氢动力学性能的影响机制。上述工作对构筑高性能镁基制氢及储氢材料提供了新的见解。

A01-47

镁基硼氢化物的低维化改性及其中低温可逆储氢机制

陈立新

浙江大学

镁基硼氢化物的低维化改性及其中低温可逆储氢机制

A01-48

基于电催化氨氧化反应的在线制氢技术

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限制。为了开发高效、安全、低成本的储氢技术，我们尝试电催化氨氧化 (EAOR) 来进

行在线制氢。理论上, EAOR 可在常温常压条件下产生 17.7 wt% 氢气, 获得~95% 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 EAOR 的动力学能垒很大, 尚缺少高效、稳定、便宜的电催化剂, 限制了该技术的实际应用。本报告中, 我们将剖析 EAOR 的动力学能垒根源, 介绍在催化改性方面的研究进展以及研究过程中需要注意的事项。

A01-49

中高熵合金催化剂对镁基储氢材料的动力学性能调控

王一菁

南开大学

镁基储氢材料具有储氢容量高、吸放氢可逆性好、成本低廉等优势, 但其放氢温度高、吸放氢动力学性能差的问题, 在传统储氢领域应用受限。目前, 中、高熵合金催化剂可以通过电子转移、表面重构等多种机制促进氢分子的吸附和解离, 从而提高氢转移反应速率。基于此, 我们开发设计出温和条件下制备稀土基中熵合金及碳包覆高熵合金纳米催化剂材料, 通过调控合金组分、合成温度, 优化制备条件, 实现对镁基储氢材料的动力学性能的改善。机理探究表明, 中、高熵合金催化剂通过机械球磨与镁基储氢材料复合, 能够显著提高镁基材料的表面活性, 加速氢分子的吸附和扩散。中、高熵合金催化剂中包含的过渡金属元素 (如 Ni、Co、Fe 等) 具有优异的催化活性, 多种活性元素能够有效催化 MgH_2 的放氢反应, 降低脱氢温度, 提高放氢速率, 可以显著降低镁基材料的吸放氢反应活化能, 提升其动力学性能。

A01-50

机器学习加速镁基储氢/储热材料设计

吴震

西安交通大学

机器学习加速镁基储氢/储热材料设计

A01-51

功能化 MXene 纳米复合材料的制备及其储氢性能研究

蓝志强

广西大学

氢能被视作是 21 世纪解决能源危机和环境污染的潜在解决方案。目前, 氢能商业应用的最大技术难题是如何有效地储存和运输。镁基储氢材料凭借其安全性、便利的运输性、高的可逆储氢容量以及丰富的地球储量等优点, 成为极具潜力的储氢介质候选者。然而, 要实现 MgH_2 商业化应用, 仍需克服脱氢温度过高 (300°C) 以及氢吸附/解吸速率缓慢等困难。为了改善镁基材料的储氢性能, 本研究利用 TMO (MnO_2 、 Cu_2O 以及 Nb_2O_5 等) 对 MXene 材料进行改性。通过构建拥有优异空间结构的 TMO 复合材料 ($TMO@MXene$), 利用 TMO 和 MXene 组成的多相复合体系以及它们之间的协同催化作用来改善镁基材料的储氢性能。研究发现, 经过 $TMO@MXene$ 催化改性的镁基材料具有良好的吸放氢性能, 在室温下即可吸收氢气, 并且在 180°C 左右即可释放出氢气。此外, 它们还能提升镁基材料的吸放氢动力学性能和循环稳定性。

A01-52

水系储能材料的表面微环境优化策略

郭威

西北工业大学

水系电化学储能器件具有使用安全、功率密度高和循环寿命长等优点而富有潜力, 围绕其电极材料的设计开发是当今的研究主流之一。但值得关注的是, 现阶段涉及的电极多数载量不足 5 mg cm^{-2} , 使其在储能器件中的活性占比极为有限, 最终实际性能大打折扣。推动该领域高质量发展的重要一环是构建满足应用需求的高担载量电极材料 (10 mg cm^{-2}), 并解决担载量成倍增长后的动力学难题。围绕该研究方向, 我们前期综述了高载量电极在离子传输和电子传递方面的挑战, 评述了现阶段富有潜力的高载量电极合成与改性策略, 并展望了高载量电极发展的多种机遇和可能性 (*Energy Environ. Sci.* 2021, 14, 576-601) [1]。在此基础上, 我们近两年开展了多种高载量电极的方法学研究: 通过 NH_4^+ -F⁻ 离子对协同的策略, 突破了 $Ni(OH)_2$ 沿厚度方向的生长局限 (厚达 700 nm), 实现了其在碳基底上高达 29.8 mg cm^{-2} 的超高载量集成, 并最终获得了高达 7144 mC cm^{-2} 的面积比容量 (*Adv. Mater.* 2023, 35, 2211603) [2]; 以超长 $MnOOH$ 纳米线为前体, 在界面改性和科根达尔效应的双作用下, 将其原位拓扑转化为具有高长径比的 $\alpha\text{-MnO}_2/\delta\text{-MnO}_2$ 异质结构, 该结构展现出良好的抗堆叠型且可与碳材料组装为载量达 30 mg cm^{-2} 的自支撑膜材料, 而强界面作用显著增强了外层 $\delta\text{-MnO}_2$ 的传质传荷行为 (*Adv. Energy Mater.*

2023, 13, 2300224) [3]; 此外, 我们在非贵金属层状材料的界面组装和电化学调控方面开展了深入研究, 提出了“杂化重构”、“纳米剪裁”等多种原位改性理念, 丰富了相关电极材料的合成方法学 (Nat. Commun. 2022, 13, 1409; Matter 2021, 4, 2902-2918; ACS Nano 2023, 17, 25357-25367) [4-6]。在上述研究积累下, 近期我们采用阴离子置换辅助的电化学重构技术, 在 NiCo 层状 (羟基) 氧化物表面成功引入了聚阴离子和空位的协同作用, 使其在 20 mg cm^{-2} 的高载量下实现 10.9 C cm^{-2} 的记录级面积比容量, 且在电流密度提升 100 倍后保持率可达 72%。通过原位实验和理论计算, 我们证实了表面的聚阴离子可促进氧缺陷的形成, 且二者可协同提升活性主体的电子导电性, 并可调控其 d 带和 p 带中心, 进而改善近邻 Ni 位点表面吸附/传输离子的动力学行为。该研究所提出的表面缺陷和聚阴离子协同工程新思路, 将对于高载量电极材料本征活性的增强提供借鉴, 可在一定程度上推动储能器件的发展应用 (Adv. Funct. Mater. 2024, DOI:

A01-53

纳米限域催化镁基复合储氢材料的吸放氢机制研究

邹建新

上海交通大学

纳米限域催化镁基复合储氢材料的吸放氢机制研究

A01-54

固态储氢技术发展前沿分析

李海文

合肥通用机械研究院

固态储氢技术发展前沿分析

A01-55

A5B19 型 La-Y-Mg-Ni-Al 储氢合金的电化学性能与衰减机制

李媛*、王晴、韩树民

燕山大学

A_5B_{19} 型 RE-Mg-Ni 系储氢合金易活化、电化学容量高, 被认为是金属氢化物/镍电池理想的负极材料, 然而其循环稳定性不理想。本文通过感应熔炼法与后续的退火处理制备了具有不同相结构的 La-Y-Mg-Ni-Al 储氢合金。研究表明由 $\text{Pr}_5\text{Co}_{19}$ 、 $\text{Ce}_5\text{Co}_{19}$ 和少量 LaNi_5 组成的多相合金具有优异的高倍率放电性能与低温放电性能, 6C 放电电流密度下的高倍率放电性能可达到 68.3%, -40°C 的放电容量达到 $240.5 \text{ mAh} \cdot \text{g}^{-1}$ 。 $\text{Pr}_5\text{Co}_{19}$ 单相储氢合金具有良好的循环稳定性, 200 次充放电循环后容量保持率仍在 80% 以上。对单相合金循环前后的结构演变进行了分析, 发现充放电循环后的亚单元膨胀差异较大, $[\text{AB}_5]-1$ 与 $[\text{AB}_5]-2$ 亚单元之间的体积失配明显高于 $[\text{A}_2\text{B}_4]$ 与 $[\text{AB}_5]-1$ 亚单元的体积失配, 这可能是造成 La-Y-Mg-Ni-Al 合金容量衰减的主要原因。

A01-56

纳米金属团簇对 MgH₂ 脱、吸氢的作用机制

张耀*、章明强

东南大学

氢储存一直是氢循环经济中的重要一环, 也是亟待解决的瓶颈。近年来人们提出了多种储氢策略来应对这一挑战。在固态储氢中, MgH_2 因其出色的重量和体积储氢密度而成为富有前景的储氢材料, 但其实际应用仍受到过高的热稳定性和缓慢的动力学特性的限制。

本课题组针对 MgH_2 动力学的问题, 提出金属团簇/单原子对 MgH_2 的改性策略。首先通过一锅溶剂热合成方法制备了 Pd 金属烯, 揭示了其独特的高度弯曲的层状结构, 厚度约为 1.6nm。其原位生成的 Pt 原子团簇和单原子协同作用, 有效提升了 MgH_2 脱吸氢性能。在此基础上, 我们又合成了 PdNi 双层金属烯, MgH_2 -PdNi 系统实现了较低的起始脱氢温度 422 K, 比之前报道的最低温度低了大约 20 K。同时, 该系统还具有较高的储氢容量 (6.36 wt.%)、较快的吸氢速率 (在 480 K 和 3.5 MPa 下 200 秒内吸氢 4.3 wt.%) 以及良好的循环稳定性。我们发现, 球磨后双层金属烯结构会原位重构为 PdNi 合金团簇、Pd/Ni 团簇和 Pd/Ni 单原子, 形成多样化的活性物种, 这些物种在整个脱/吸氢循环中都会持续存在。我们首次阐明了金属催化剂-MgH₂ 系统工作条件下的原子级活性位点识别。电子结构研究揭示了 PdNi 合金团簇在 MgH_2/Mg 上的 d 带中心比其他团簇和单原子更合适, 从而促进了氢原子的吸附/脱附。这项关于原子级结构-性能关系和多尺寸活性位点的 d 带中心效应的基础研究, 可以为未来高效储氢催化剂的设计提供借鉴。

A01-57**贮氙氙材料最新研究进展**

桑革

中国工程物理研究院材料研究所

贮氙氙材料最新研究进展

A01-58**光电析氢催化材料的原子级调控**

崔小强

吉林大学

氢能综合利用是当前国际研究热点，也是实现国家“碳达峰、碳中和”目标的关键技术。报告将介绍电催化析氢和光催化析氢技术中核心催化材料的制备及原子级调控研究，同时介绍这些研究中材料分析测试技术的关键作用。主要研究内容包括：①通过应力诱导二维材料局域相变新方法，在亚稳态 1T-MoS₂ 表面构建系列非贵金属（Co、Fe、Ni）单原子阵列催化剂，展现出媲美商业 Pt/C 析氢活性和高稳定性；②提出氢原子降低亚稳态二维金属烯生成焓的新机理，并发展甲醛原位释放氢和一氧化碳的限域合成新方法，制备系列高活性二维金属烯催化新材料（RhPdH、PbPdH、PdHx@Ru 等），并在原子尺度阐明氢与金属间强电子相互作用激活大量超 Pt 活性位点的机理；③提出湿化学制备 H-TiO₂ 催化剂新方法，发展异相同质结、双 S 型异质结等新策略，有效增加光吸收范围和光生载流子分离效率，大幅提升光催化分解水制氢速率，为高效析氢催化剂研究提供新思路、新机制、新方法。

参考文献

1. X. Cui* et al., Nat. Commun. 2019, 10, 5231;
2. X. Cui* et al., Nat. Commun. 2019, 10, 28;
3. X. Cui* et al., Nat. Commun. 2019, 10, 4472;
4. X. Cui* et al., Adv. Mater., 2024, 36(9), 2309199;
5. X. Cui* et al., Adv. Mater., 2023, 35(28), 2305285;
6. X. Cui* et al., Adv. Mater., 2023, 35(6), 2209141;
7. X. Cui* et al., J. Am. Chem. Soc. 2023, 145, 5710;
8. X. Cui* et al., J. Am. Chem. Soc. 2020, 142, 3645.
9. X. Cui* et al., Angew. Chem. Int. Ed. 2024, 63, 1002/anie.202403203
10. X. Cui* et al., Angew. Chem. Int. Ed. 2023, e202318246;
11. X. Cui* et al., Angew. Chem. Int. Ed. 2022, 61, e202207512;
12. X. Cui* et al., Chem 2021, 7, 436;
13. X. Cui* et al., Matter, 2022, 5, 1;

A01-59**碱性电解水的关键材料与替代技术**

晏宁

武汉大学

自 1888 年俄国物理学家 Dmitry Lachinov 将碱性电解水过程成功运用到工业生产中，这一古老的技术一直是现代电解水制氢最关键方法。与基于质子交换膜的电解水路线相比，碱性电解槽结构简单、材料便宜、寿命长、技术成熟，占据国内电解水超过 95% 的市场份额。由于受到高内阻、电极催化材料低活性、氢气-氧气易混合等诸多因素的限制，目前主流的碱性电解槽工作电流密度较低（<500 mA/cm²），能源转化效率有待进一步提高，与可再生电能耦合能力弱。在寻找高性能电极催化剂的工作中，我们比较了过渡金属磷化物/硫化物、钙钛矿氧化物与含碳材料的不同特点。明确了通过纳米仿生结构的构建与调控，可在优化析氢、析氧反应活性位点的同时，提高气体与电解液的传质效率。利用原位差分电化学质谱仪的研究，解析了含碳材料在析氧反应中的腐蚀路径与掺杂元素的析出形式。在降低电解槽内阻的工作中，我们发现随着电解电流的提升，气泡的生成导致电解槽欧姆电阻与非欧姆极化电阻均明显提升。我们利用表面工程的手段，构建磷化物-尖晶石异质结构，在提升电催化活性的同时，实现了电极表面超亲水、超疏气泡的电特性，显著降低了全解水反应中的极化损失，使碱性电解槽的工作电流密度与能量转化效率达到了质子交换膜电解水的水平。我们也探究了利用固态氧化还原电对与阳极配

对电解有机物,实现了大电流密度条件下电解水时的高纯度氢气(>99%)生成;同时,设备功率调节范围可以达到0%~100%,提高了利用间歇性和波动性的再生电能制氢的适应性。

参考文献

- [1] X. Jiang, L. Ke, K. Zhao, X. Yan, H. Wang, X. Cao, Y. Liu, L. Li, Y. Sun, Z. Wang, D. Dang, N. Yan*, Nat. Commun., 2024, 15, 1427.
- [2] X. Yan, J. Biemolt, K. Zhao, Y. Zhao, X. Cao, Y. Yang, X. Wu, G. Rothenberg, N. Yan*, Nat. Commun., 2021, 12, 4143.
- [3] K. Zhao, S. Han, L. Ke, X. Wu, X. Yan, X. Cao, L. Li, X. Jiang, Z.P. Wang, H.J. Liu, N. Yan*, ACS Catal., 2023, 13, 2813.
- [4] L.J. Li, P. C. M. Laan, X. Yan, X. Cao, M. Mekkering, K. Zhao, L. Ke, X. Jiang, X. Wu, L. Li, L.J. Xue, Z.P. Wang, G. Rothenberg, N. Yan*, Adv. Sci., 2023, 10, 2206180.
- [5] P. C. M. Laan, F. J. de Zwart, E. M. Wilson, A. Troglia, O. C. M. Lugier, N. J. Geels, R. Bliem, J. N. H. Reek, B. de Bruin, G. Rothenberg, N. Yan*, ACS Catal., 2023, 13, 8467-8476.

A01-60

In-situ high energy synchrotron X-ray studies in thermodynamics of Mg-In-Ti hydrogen storage system

赵颖燕

上海交通大学

Achieving dual regulation of the kinetics and thermodynamics of MgH_2 is essential for the practical applications. In this study, a novel nanocomposite (In@Ti-MX) architected from single-/few-layered Ti_3C_2 MXenes and ultra-dispersed indium nanoparticles was prepared by a bottom-up self-assembly strategy and introduced into MgH_2 to solve the above-mentioned problems. The MgH_2 +In@Ti-MX composites demonstrate excellent hydrogen storage performance: The resultant In@Ti-MX demonstrated a positive effect on the hydrogen storage performance of MgH_2 /Mg: the dehydrogenated rate of MgH_2 +15 wt%In@Ti-MX reached the maximum at 330 °C, which was 47 °C lower than that of commercial MgH_2 ; The hydrogenation enthalpy of the dehydrided MgH_2 +15 wt%In@Ti-MX and MgH_2 +25 wt%In@Ti-MX were determined to be -66.2 ± 1.1 and -61.7 ± 1.4 kJ·mol⁻¹ H₂. In-situ high energy synchrotron X-ray diffraction technique together with other microstructure analyses revealed that synergistic effects from Ti_3C_2 MXenes and In NPs contributed to the improved kinetics and thermodynamics of MgH_2 (Mg): Ti/TiH₂ derived from Ti_3C_2 MXenes accelerated the dissociation and recombination of hydrogen molecule/atoms, while In NPs reduced the thermodynamic stability of MgH_2 by forming the Mg-In solution. Such a strategy of using dual-active hybrid structures to modify MgH_2 /Mg provides a new insight for tuning both the hydrogen storage kinetics and thermodynamics of Mg-based hydrides.

A01-61

Mg 基储氢材料吸放氢性能改性及其在 CO₂ 催化转化应用研究

段聪文

华北电力大学

Mg 基储氢材料吸放氢性能改性及其在 CO₂ 催化转化应用研究

A01-62

镁离子电池合金负极和原位设计

袁媛*、潘复生

重庆大学

镁离子电池具有高安全性,资源丰富等优点。但目前镁离子电池的动力学性能有待进一步改进。纯镁负极由于钝化反应其循环性能较差。

本工作设计了合金型负极,基于相变反应实现镁离子的脱嵌。所得到负极材料显示了非常高的循环性能和高的容量。此外,基于电解液原位生成,在纯镁负极与电解液之间形成了智能界面,有效改善了纯镁负极的循环性能。

A01-63

MOF 基固态吸附储氢材料合成及系统研究

胡志刚*、邹建新

上海交通大学

固态储氢技术具备储氢密度高、工作压力低、安全性好的优点，是未来氢储运的重要发展方向[1]。其中，新型金属有机框架（MOF）吸附储氢材料，具有能效高、吸放氢响应快、控制简便等突出优势，是固态储氢技术中的关键材料之一[2]。但目前，MOF 类储氢材料仍存在吸附位点缺乏、储氢密度低、吸放氢机制不明确和合成成本高等问题，限制了其在氢储运中的推广与应用[3]。绿色温和批量化生产高质量、高稳定、低成本的 MOF 材料仍然是其吸附储氢应用的难题。基于解决这些问题，利用水相金属簇-配体交换的合成思路，我们开发了一种绿色（无有机溶剂）、温和（低温、常压）以及批量化合成锆基/铪基 MOF 材料的调制水热合成方法[4]。该方法可批量化合成 UiO-66 和 MOF-808 等材料，时空产率可达 $2000 \text{ kg m}^{-3} \text{ day}^{-1}$ [5]。其中，MOF-808 作为一种具有高稳定性、高比表面积和金属盐/配体商业化可得的 MOF 材料，通过研究调制剂类型、浓度和反应温度等，可调控 MOF-808 的比表面积、不饱和金属吸附位点，从而实现其批量合成和储氢应用。其中，MOF-808 (Zr) 的比表面积可达 $2400 \text{ m}^2/\text{g}$ ，比传统溶剂热法合成的高 20%，粉体材料在 77 K 和 80 bar 条件下的质量储氢密度为 4.5 wt%，体积储氢密度为 42 g/L；块体材料在 77 K 和 80 bar 条件下的质量储氢密度为 4.5 wt%，体积储氢密度为 33 g/L，高于同条件下的空罐体积储氢密度。此外，MOF 储氢材料具有安全性高、成本低、能耗低、无环境污染等优势，本研究为后续研发更高效 MOF 储氢材料和氢储运技术提供理论基础与技术支持。

参考文献:

- [1] M. D. Allendorf, V. Stavila, J. L. Snider, M. Witman, M. E. Bowden, K. Brooks, B. L. Tran, T. Autrey, *Nat. Chem.* 2022, 14, 1214.
- [2] Z. Chen, K. O. Kirlikovali, K. B. Idrees, M. C. Wasson, O. K. Farha, *Chem* 2022, 8, 693.
- [3] Z. Hu, Y. Wang, D. Zhao, *Chem. Soc. Rev.* 2021, 50, 4629.
- [4] Z. Hu, Y. Wang, D. Zhao, *Acc. Mater. Res.* 2022, 3, 1106.
- [5] Z. Hu, T. Kundu, Y. Wang, Y. Sun, K. Zeng, D. Zhao, *ACS Sustain. Chem. Eng.* 2020, 8, 17042.

A01-64

纳米过渡金属催化剂的原位转化及其催化储氢性能

刘永锋

浙江大学

纳米过渡金属催化剂的原位转化及其催化储氢性能。

A01-65

高性能镁基储氢材料设计及应用

李谦

重庆大学

高性能镁基储氢材料设计及应用。

A01-66

车载储氢用的 Ti-V 基储氢合金的结构改性和循环机理研究

林怀俊^{*1}、李旭波¹、唐仁衡²、朱用洋²

1. 暨南大学

2. 广东省科学院资源利用与稀土开发研究所

V 基 BCC 型储氢合金在温和条件下具有 2.0~2.5wt% 的可逆脱氢容量，是车载储氢的优异材料。但钒的成本过高仍是限制 V 基储氢材料实际应用的主要问题。针对上述的问题，我们通过采用 FeV80 作为原料、开发低 V 合金、热处理策略，制备高有效储氢容量的低成本 Ti-V 基储氢合金，研究了基合金的循环稳定性及容量衰减机理。

以 FeV80 作为原料制备的 V 钒合金 TiCr1.2(V-Fe)0.6，并采取了微量 Mn 合金化的手段，用 Mn 部分取代 Cr，研究 Mn 取代对提升低钒 Ti-V 基合金有效储氢容量的作用机理。结果表明，Mn 与 FeV80 中的 Fe 之间的协同作用可以有效地引入第二相 C14 Laves 相，为氢的扩散的提供了通道，促进了合金的活化吸氢的同时提升了脱氢平台压力。此外，随着 Mn 取代量的提升，脱氢焓值从 34.84 kJ/mol 降低至 31.51 kJ/mol，表明合金氢化物的稳定性下降，优化后的合金 TiCr1.1Mn0.1(V-Fe)0.6 在 15°C 吸氢和 45°C 脱氢的条件下，获得 2.07wt% 的有效储氢容量。

进一步地，研究了 Mn、Mo 和 Nb 三种元素的微量添加对 TiCr1.2(V-Fe)0.6 循环稳定性的影响，并探究了循环容量的衰减机理。结果表明，三种元素的微量添加对原始低 V 合金的循环稳定性都有一定的改善，特别是 Mo 取代合金在 100 圈循环后，容量保持率为 68.04%，优于 Mn 和 Nb 取代合金，这是因为 Mo 的添加可以抑制第二相的分离以及减少位错密度的生

成。对循环前后的微观结构表征结果显示, 循环过程中导致的晶格扭曲变形、晶粒尺寸减小、微观应变和位错密度积累以及颗粒粉化等现象都是导致容量衰减的主要原因。

A01-67

金属氢化物在固态电池中的研究与应用

张腾飞

浙江省白马湖实验室

金属氢化物在固态电池中的研究与应用。

A01-68

Theoretical investigation on the mechanism of ammonia synthesis on body-centered cubic PdCu alloy surfaces for improved hydrogen storage

Yawei Li, Ying Wu*

华北电力大学

Ammonia (NH_3) acts as a promising medium for efficient hydrogen storage due to its high hydrogen density and flexibility in the utilization. However, Haber-Bosch process on traditional Fe and Ru-based catalysts is estimated to comprise 2% of the world's total energy consumption. To reduce the energy consumption, a comprehensive analysis on the reaction mechanism is essential. PdCu alloys have attracted considerable attention as they exhibit various phases when fabricated at different temperatures, and that the different phases in combination with Pd/Cu ratio, surface indexes lead to distinct catalytic performance in heterogeneous reactions. Here, first-principles calculations are applied to give insight into the reaction mechanism and the whole reaction paths for NH_3 synthesis from N_2 and H_2 on body-centered cubic PdCu alloy, the most stable ordered PdCu phase. The terrace (110) and (100) surfaces are chosen as model surfaces and the starting points with different N_2^* , H^* and NH_x^* coverage at industrial temperature and pressure condition are investigated. We find that the dominant reaction path is highly relevant on the surface chosen, originating to different N-containing intermediate adsorption strengths and starting points. The turnover frequency is further estimated using microkinetics simulation. Our study provides useful insights into searching metal catalysts in NH_3 synthesis for improved hydrogen storage.

A01-69

氢能用膜电极-关键材料与制造技术

唐军柯

鸿基创能

氢能用膜电极-关键材料与制造技术

A01-70

氢分离纯化用金属膜材料的研制

李广忠

西北有色金属研究院

近年来, 氢能和氢气产品的需求持续增长, 促进了现有的氢气生产、储存和分离纯化技术的发展。当前, 氢能燃料电池是一种高效、可直接利用氢能的工业化模式, 且氢燃料电池对氢气纯度的要求为 99.99% 或更高。然而, 我国目前主要的氢气生产方法为煤制氢, 不可避免地导致氢气中含有对催化剂有毒的气体成分, 所以氢气、纯化显得十分必要。

膜分离法具有操作方便、能耗低等特点, 是生产高纯度 H_2 的有效途径。膜材料是发展膜分离、纯化氢技术的关键问题之一。其中金属膜材料由于具有较高的机械强度和良好的高温韧性而被广泛应用在氢分离膜材料中。目前, 钯及钯合金毛细管(钯管)已作为氢渗透膜在氢纯化领域实现了商业上应用, 多孔支撑体钯复合膜目前也基本满足部分氢渗透领域的商业化要求。

本论文基于氢分离纯化对低成本、高效率金属膜材料的需求, 通过层状复合金属膜的设计、制备研究, 获得了多层复合钯复合膜和钯/钌(钌合金)复合膜。

A01-71**非化学计量比碳化物对 MgH₂ 储氢材料性能影响研究**

解秀波*

烟台大学

鉴于目前碳化物催化剂研究主要集中于 MXene 基化学计量比碳化物,而非化学计量比碳化物的空位等缺陷浓度及成分更易调控且缺乏深入研究的现状,通过高温煅烧获得海绵衍生碳/Ni₃ZnCo_{0.7}(MS/Ni₃ZnCo_{0.7})多相催化剂;以刻蚀后的 Ti₃C₂Tx 为基础,通过调控不同物相的质量比获得了片层状 TiO₂/Ni₃ZnCo_{0.7} 多相催化剂;将超声分散后的 Ti₃C₂Tx 通过静电吸附在三聚氰胺海绵的表面,再与 Ni/Zn-MOFs 前驱体复合在一起获得了 MS/TiO₂/Ni₃ZnCo_{0.7} 多相催化剂。研究表明 MS/TiO₂/Ni₃ZnCo_{0.7} 多相催化剂中起主要催化的是 Ni₃ZnCo_{0.7},发生相变的 TiO₂ 和无定形的海绵衍生碳主要起到弱化团聚,增强循环性能的作用。MgH₂-5 wt% MS/TiO₂/Ni₃ZnCo_{0.7} 复合材料在 423 K 下 600 s 能吸收 4.21 wt% H₂, 60 min, 573 K 条件下释放 5.32 wt% H₂。该复合材料的吸氢和放氢的 E_a 分别为 62.91 和 102.33 kJ/mol H₂。该研究为设计非化学计量比碳化物催化剂提供理论及实践指导,丰富储氢材料碳化物催化剂的设计。

A01-72**调控活性电子态优化电催化性能**

宋二红

中国科学院上海硅酸盐研究所

报告人综合运用高通量计算方法、微结构设计和实验验证,成功合成了性能优异的新型电催化剂。重点研究了电催化剂材料表面/界面的微观结构设计,通过原子尺度分析揭示了微观结构与宏观催化性能的关系,并从电子结构角度解释了电化学反应机制,从而提升了催化性能。研究成果涉及金属硫化物、金属纳米颗粒和金属氧化物的表面改性及界面设计,策略主要包括异质原子掺杂、缺陷构建、相转变和异质结构构建,以实现电催化剂的优化性能。

A01-73**产氨型金属含氮燃料电池**

郭瑛

深圳大学

电化学合成氨具有 CO₂ 零排放、绿色环保的优势,被认为是替代高能耗 Haber-Bosch 工艺最有效的方法之一。由于反应动力学缓慢,并伴有严重的析氢副反应,通过电催化硝酸根还原合成氨面临着法拉第效率低、选择性差、能耗高的问题。此外,硝酸根还原成氨,是一个单阴极的半反应电催化过程,对电能的依赖相当大,限制了电化学合成氨的进一步工业化发展。针对上述问题,报告人从催化剂优化、电解液设计、反应机理分析方面,对电合成氨催化系统展开了深入,开发了产氨型金属-含氮分子燃料电池,克服了单阴极电催化产氨系统对电能的依赖,实现了高效产氨与电能共生,具有“一石二鸟”的效果,为解决当今社会所面临的资源(产氨)、能源(发电)问题提供了新思路、新方法。

A01-74**Constructions of high-performance flexible organic-inorganic composite thermoelectric films and generators using screen printing technology**

Yong Du*, Qiufeng Meng, Jie Qin, Zuo Xiao, Shichuang Ma, Xinlian Liu

上海应用技术大学

P-typed Cu-Se nanowires (NW) and N-typed Ag₂Se NW powders were synthesized using a wet chemical method, and then adding them into methyl cellulose (MC) matrix to prepare screen printing slurries. Flexible P-type Cu-Se/MC and N-type Ag₂Se NW/MC composite thermoelectric films were constructed using a screen-printing technology, and the composition and microstructure of the films were optimized using cold pressing combined with annealing treatment. Results showed that the Ag₂Se NW/MC composite films treated by cold pressing combined with annealing treatment exhibited excellent flexibility and maximum power factor of 1641.58 μWm⁻¹K⁻² at 360 K. The flexible thermoelectric generator assembled with 4 Ag₂Se NW/MC legs generated a maximum output power of 653.73 nW at a temperature difference of 14.1 K, corresponding to a power density of 3.51 Wm⁻². This study opened an effective and large-scaled strategy for fabricating high-performance flexible TE materials and energy-harvesting devices.

A01-75**基于离子交换技术原位构筑太阳能光催化剂材料**

侯慧林*

宁波工程学院

半导体光催化技术作为一种将太阳能俘获、转换和存储于一体的绿色技术，在无机光化学研究领域被誉为“圣杯”，展示出极具吸引力的应用前景。研究表明，要实现更卓越的光催化性能，使用高效稳定的光催化剂是至关重要的先决条件。然而，实际半导体光催化剂材料在效率与稳定性方面常常面临着巨大挑战，主要受以下三个方面的缺陷限制：自身吸光能力差，导致太阳能利用率偏低；自身电导率低，电荷在其内部传导距离短，从而加剧光生电子-空穴复合概率，造成光生载流子的严重复合损失；表面反应速率缓慢，降低了表面空穴的利用率以及光催化剂的稳定性。因此，解决这三个问题成为当前半导体光催化剂材料研发领域迫切需要解决的技术瓶颈。基于这一挑战，本文提出采用离子原位交换策略，对典型半导体光催化剂表面进行原子级别的精确调控，旨在拓展其光响应范围、增强载流子分离效率，以及提升水氧化性能，推动高效、高稳定半导体光催化剂材料的研发。

参考文献

- [1] Hou, H, Chris R. Bowen, CR; Yang, D; Yang, W, Chem, 2024, 10(3), 800-831.
- [2] Hou, H.; Shao, G.; Yang, W.; Wong, W.-Y. Prog. Mater. Sci., 2020, 113: 100671.
- [3] Hou, H.; Wang, L.; Gao, F.; Wei, G.; Tang, B.; Yang, W.; Wu, T., J. Am. Chem. Soc., 2014, 136: 16716.
- [4] Hou, H.; Zeng, X.; Zhang, X. Angew. Chem., Int. Ed., 2020, 59: 17356.
- [5] Song, K.; Hou, H.; Zhang, D.; He, F.; and Yang, W., Appl. Catal. B-Eviromen., 2023, 330: 122630
- [6] Song, K.; He, F.; Zhou, E.; Wang, L.; Hou, H.; Yang .W. J. Energy Chem., 2022, 68: 49.

A01-76**碳管组装体及其高性能电容器**

孟国文

中国科学院合肥物质科学研究院

碳管组装体及其高性能电容器

A01-77**金属支撑型质子陶瓷燃料电池的设计与性能研究**

贾礼超*、刘晨朝、李箭

华中科技大学

固体氧化物燃料电池（SOFC）是一种潜力巨大的新型能源，其商业化应用主要受到工作温度和机械强度的限制。在各类的 SOFC 中，金属支撑型固体氧化物燃料电池（MS-SOFC）采用金属作为支撑体，具有较高的机械强度，但采用氧离子导体作为电解质，较高的工作温度（700 °C 以上）会导致电堆整体寿命的下降[1]。质子陶瓷燃料电池（PCFC）采用质子导体作为电解质，可实现中低温高效运行[2]，但 PCFC 通常采用电极或电解质作为支撑体，其机械强度远不如金属支撑。基于上述分析，本研究提出金属支撑型质子陶瓷燃料电池（MS-PCFC）的构想，实现工作温度的降低与机械强度的提升。在 MS-SOFC 常见的支撑体材料中，镍的热膨胀系数与质子导体电解质 BaZr_{0.1}Ce_{0.7}Y_{0.2}O_{3-δ}(BZCY)之间的匹配较差。我们通过添加过渡层来缓解这一问题，并得出以下结论：

采用 80wt% NiO-20wt% BZCY 作为过渡层，添加在镍金属支撑体与 60wt% NiO-40wt% BZCY 阳极功能层之间，以 La_{0.6}Sr_{0.4}Co_{0.2}Fe_{0.8}O_{3-σ} (LSCF) 和 BZCY 机械混合物为阴极，制备出的电池 650 °C 峰值功率密度为 0.8 W cm⁻²，证实了 MS-PCFC 构想的可行性。

A01-78**固体氧化物电池自组装双出溶电极的设计及应用**

赵凌

海南大学

固体氧化物电池自组装双出溶电极的设计及应用

A01-79

中空碳球负载 V₂O₃ 作为硫锂电池加速了多硫化物转化

肖明军*

1 兰州理工大学材料科学与工程学院, 兰州, 730050

2 省部共建有色金属先进加工与再利用国家重点实验室, 兰州, 730050

在各种类型的下一代电池中, 锂硫 (Li-S) 电池因其高理论比容量 (1675 mAh g⁻¹) 和环保特性而脱颖而出, 使其成为储能应用有前途的候选产品。然而, 经过多年的深入研究, Li-S 电池仍然面临着几个重大挑战。特别是硫和硫化锂的低电子和离子电导率阻碍了氧化还原反应速率, 导致动力学缓慢, 充放电速率有限, 极化严重, 而间歇性多硫化物 (LiPSs) 的溶解及其穿梭效应进一步降低了硫的利用率, 导致严重的容量衰减和循环寿命降低。

人们提出了各种方法来解决这些挑战, 其中将催化剂结合到硫阴极中引起了相当大的兴趣。其理由是, 催化剂可以加速原本缓慢的氧化还原反应, 从而减轻穿梭效应, 限制速率和极化问题。许多过渡金属氧化物、硫化物和其他物质已经被报道可以改善锂硫电池的性能。特别值得注意的是过渡金属氧化物, 由于暴露于带负电荷的氧离子, 它们具有很强的表面极性。这导致与 LiPSs 的相互作用增强, 突出了氧的积极作用。

本文报道了一项利用分散在碳空心球上的金属导电 V₂O₃ 作为催化剂来改善 LiPSs 转化动力学的研究。本文的实验测量和理论计算表明, 导电 V₂O₃ 与 LiPSs 表现出强烈的相互作用, 增强了它们的吸附和转化过程, 而碳空心球可以弥补硫的导电性差, 抑制硫的体积膨胀。当含硫量为 75% 时, V₂O₃/C-HS@S 阳极在 0.05 C 的电流密度下的初始放电比容量为 1153 mAh g⁻¹, 在 0.2 C 的电流密度下循环 300 次后保持在 433 mAh g⁻¹, 容量保持率为 99.67%。即使在 2 C 的电流密度下 300 次循环后, 电池仍然保持 298 mAh g⁻¹ 的比容量。这项工作证明了分散在碳空心球上的导电 V₂O₃ 催化剂作为硫宿主在提高 Li-S 电池长循环寿命和高倍率性能方面的潜力。

A01-80

空位和异质结构助力 Co_{0.85}Se/WSe₂ 高效钠存储行为

裴亚茹^{1,2}、周泓宇¹、赵明¹、李建忱¹、葛新¹、张伟¹、杨春成^{*1}、蒋青¹

1. 吉林大学

2. 湖北汽车工业学院

在转化型钠离子电池负极材料中, 过渡金属硒化物有着比金属-硫/氧键更弱的金属-硒键和较好的导电性受到广泛关注。但是, 较大的体积膨胀导致 Na⁺在电极材料嵌入/脱出的过程中动力学缓慢。异质结构工程和空位设计是提高反应动力学的有效策略。在此, 本论文将水热和硒化处理的方法结合起来, 制备了具有 Se 空位的 Co_{0.85}Se/WSe₂ 异质结构负载在 N 掺杂的碳多面体中的复合材料 (Co_{0.85}Se/WSe₂ encapsulated in N-doped carbon polyhedron, CoWSe/NCP)。异质结构可以加速电荷转移, 提高电子电导率; Se 空位可以增强 Na⁺的吸附能力, 并且可以调整金属原子周围的电子状态, 诱导产生额外的 Na⁺吸附活性位点; 此外, N 掺杂碳骨架也可以在充放电过程中起到缓冲作用, 增强结构稳定性。CoWSe/NCP 在钠离子电池中表现出卓越的倍率性能 (20 A g⁻¹ 时具有高达 339.6 mAh g⁻¹ 的比容量), 超过了几乎所有的 Co/W 基硒化物, 同时具有优异的循环性能 (1 A g⁻¹ 时经过 5000 次充放电循环测试后的容量为 434.9 mAh g⁻¹)。

A01-81

基于氧官能团调控煤基硬碳微结构及储钠性能研究

张月

新疆大学

煤成本低, 资源丰富, 是制备钠储硬碳的优良前驱体。然而, 煤的三维大分子结构在高温碳化过程中形成层间间距较窄的石墨碳微晶, 限制了钠离子的储存。煤大分子中的含氧官能团在炭化过程中可以连续交联、断裂和挥发, 有效抑制了碳微晶结构的生长和重排。我们通过比较不同氧化方法预氧化煤, 分析不同预氧化法对煤中氧官能团种类和含量的影响, 以及氧官能团对硬碳微结构的影响, 从而抑制了碳微晶的生长, 形成层间间距宽、闭孔丰富的碳微晶结构, 控制碳化, 普适调控煤基硬碳微结构, 研究其储钠性能与微结构的构效关系, 建立高性能煤基储钠硬碳微结构模型, 为低成本钠离子电池负极材料的开发及应用奠定基础。

A01-82

醚类电解液在钠/锌离子电池中的应用研究

郑程

广东工业大学

作为一种新型的二次电池系统，钠离子电池(sodium-ion batteries, SIBs) 因具有高成本效益、钠高丰度以及与锂离子电池相似的特性被认为在大规模储能中具有巨大的应用潜力[[1], [2]]。为了满足大规模储能的需求，研究人员一直致力于构建具有高库仑效率、高稳定循环性能和高倍率性能的 SIBs。电解液通过调控离子传输、工作电位范围以及调节固液界面的电化学反应行为等对电池性能产生举足轻重的作用，因此，合适的电解质是开发高性能钠离子电池的前提和基础。有机电解质因具有较高的离子电导率、较宽的电化学稳定电压范围、易形成稳定的固态电解质界面(SEI)以及良好的电极相容性等得到最为广泛的应用，其主要包括碳酸酯类电解液和醚类电解液两大类型。其中，碳酸酯类电解液具有高解离性以及快速离子传输特性，是当前重要的 SIBs 用电解液。但研究表明，使用碳酸酯类电解液形成的可溶且不断增厚的碳酸盐衍生 SEI 层、与石墨微晶之间存在的化学惰性以及与金属硫化物/硒化物发生亲核加成反应等因素限制了其效果，导致了容量衰减、库仑效率低下和倍率性能较差等问题。

在我们的研究过程中发现，醚类电解液能有效解决上述问题，在硬碳、 VS_4 、 VSe_2 等储钠负极材料应用过程中均获得了高容量和长循环稳定性。这其中的主要原因在于醚溶剂的低溶剂化能、高电子亲和能和溶剂的高 LUMO（最低未占有分子轨道）能级使钠盐电解质能够产生具有高度稳定的 Na^+ -醚配合物[[3]]，形成高度稳定的无机薄层状 SEI，有利于减少非晶态无序区因多孔结构、官能团、较大比表面积等因素必然导致的不可逆的钠消耗，从而提高储钠效率和循环稳定性。与此同时，使用醚类溶剂乙二醇二甲醚调控水溶液中 Zn^{2+} 的溶剂化结构，促进 Zn 金属溶解和沉积过程的可逆发生，从而有效抑制锌枝晶生长，提高锌离子电池（Zinc-ion batteries, ZIBs）的循环稳定性。当然，与成熟的碳酸酯电解液相比，尽管醚类电解质高压稳定性稍逊色（氧化电位低于 5.0 V），但在 SIBs 中广泛使用的正极如 $Na_3V_2(PO_4)_3$ 和 $NaCoO_2$ 等工作电压低于 4 V，以及较低工作电压的水系 ZIBs，而这完全允许醚类电解液的正常应用[[4]]。总而言之，对于醚类电解液的应用研究是一个值得深入探讨的课题。

参考文献

[1] Zhao, Y., Kang, Y., Wozny, J., et al. Nat. Rev. Mater. 8, 623–634 (2023).

[2] Li, C., Xu, H., Ni, L., et al. Adv. Energy Mater. 13, 2301758 (2023).

[3] Li, Y., Wu, F., Li, Y., et al. Chem. Soc. Rev. 51, 4484–4536 (2022).

[4] Huang, Y., Zhao, L., Li, L., et al. Adv. Mater. 31, 1808393 (2019).

A01-83

固体氧化物燃料电池多孔氧化物电极材料的电导率研究

陈旻*1,2、赵凯 1,2、李俊 1,2、徐庆 3

1. 佛山大学 材料科学与氢能学院
2. 广东省氢能技术重点实验室
3. 武汉理工大学 材料科学与工程学院

This present study will take the $La_{0.3}Sr_{0.7}Fe_{0.7}Cr_{0.3}O_{3-\delta}$ (LSFCr-3), a novel symmetrical SOFC electrode (serving as both the anode and cathode) extensively investigated in our previous study, as a representative to take an insight into the apparent electrical conductivity (σ_{app}) of porous electrodes for SOFC applications. Since the LSFCr-3 is shown to be redox-stable and its Brouwer diagram (σ versus pO_2) was examined over a wide range of pO_2 values (10^{-21} - 1 atm) at 800°C, it is practical to regulate the σ_{app} of electrode layers on a large scale, contributing to identifying the variation of σ_{app} in relation to the R_{ohm} of cells. For this purpose, three approaches were employed to characterize the σ_{app} of LSFCr-3 electrode layers in both reducing and oxidizing atmosphere, of which the validity was comparatively discussed. And then, the dependence of R_{ohm} in a LSFCr-3-based half cell on the σ_{app} was quantified. Finally, the requirement of σ_{app} for the SOFC electrodes was suggested in terms of current collecting strategies, especially for the perovskite oxide anodes.

A01-84

碳点新材料：从宏量制备到电化学储能应用

侯红帅

Central South University

碳点新材料：从宏量制备到电化学储能应用

A01-85

钠离子电池层状氧化物正极的结构调控与性能优化

刘军

华南理工大学

钠离子电池层状氧化物正极的结构调控与性能优化

A01-86**水系锌离子电池负极界面改性策略**

孙灵娜

华南理工大学

水系锌离子电池负极界面改性策略

A01-87**水系多价离子电池非嵌入型电极材料与新体系探索**

李洪飞

南方科技大学

水系多价离子电池非嵌入型电极材料与新体系探索

A01-88**水系锌离子电池电极材料的制备及全电池研发**

李平

北京科技大学

水系锌离子电池电极材料的制备及全电池研发

A01-89**高性能二次电池关键电极材料研究**

马品*、杨桃、胡祥辉

宁夏大学

化石燃料的枯竭加速了可再生能源开发的进展，为了满足日益增长的能源需求更好地利用可持续能源，多尺度储能系统得到了大力发展。锂离子电池被认为是电池技术的先驱，其可以提供高能量密度和大输出功率。然而，商用的负极材料石墨受到了锂插层电位低（0.1 V vs. Li⁺/Li）和循环稳定性差的限制，急需开发新型高性能负极材料。由于地球上丰富的钠资源及其与锂类似的电化学性质，钠离子电池有望在大规模储能和运输中取代锂离子电池。然而，Na⁺（1.02 Å）的原子半径大于Li⁺（0.76 Å），这会导致一系列问题，例如高电阻、缓慢的Na⁺存储动力学、在充电/放电过程中对电极的结构损伤等。因此，开发更有效、更高活性的负极对于进一步促进钠离子电池的商业化至关重要。本工作设计开发了多种形貌结构的锂/钠离子电池负极材料，显著提升了电池的电化学性能，并深入研究了其电化学储能机理，为构建高性能二次电池用关键电极材料提供了新路径，具有重要的科学和实践意义。

A01-90**低成本固态电解质的设计与制备**

冯绪勇

合肥工业大学

The cost of raw materials and preparation process is the main factor determining the cost of solid-state electrolytes (SSEs). Here, lithium aluminum oxychloride (Li_xAlCl_{3-x}O_x) with both low raw material cost and low preparation cost is reported. Firstly, the transition metal used here is Al, which is abundant and low cost. Secondly, the heating temperature is only 200 °C and the total synthesis procedure takes less than 1 hour, leading to a significantly reduced production cost. First-principle calculations combining with AC impedance spectrum and solid state nuclear magnetic resonance etc. reveal that the introduction of O²⁻ ions can increase the distribution sites of Li⁺ ions and shorten the distance between the adjacent sites, thereby reducing Li⁺ ion migration activation energy (0.3 eV) and improving ionic conductivity (1.5 mS cm⁻¹). When applied as a catholyte, the LiCoO₂||Li_{0.8}AlCl_{2.2}O_{0.8}||Li₆PS₅Cl||Li-Si all solid-state batteries demonstrate an initial capacity of 127 mA h g⁻¹ and 94.4% retention after 180 cycles at 0.3 C.

A01-91

超大功率电堆开发策略

齐志刚

新研氢能源科技有限公司

质子交换膜燃料电池单堆功率超过 200kW 时,性能和可靠性就难以保证,如何根据市场的需求制备更大功率的电堆是行业面临的一个挑战;新研氢能源科技有限公司通过采用一板多室和一堆多段的结构设计,有效地突破了这一瓶颈。本文将就超大功率电堆的开发策略进行阐述,并对实际测试结果进行分析和讨论。

A01-92

层状锰基氧化物正极材料的精准构筑与性能调控

张凯

南开大学

钠离子电池具有原料丰富、成本低廉、环境友好等优点,有望成为锂离子电池的可靠替代品。钠离子电池 P2 相锰基正极材料,具有比容量高、工作电压高以及循环稳定性较好的优势,吸引了研究者的广泛关注。但其在高电压区间($> 4.0V$)存在不稳定阴离子参与的氧化还原反应,会导致晶格氧的释放;同时,正极材料在脱嵌钠时存在局域电化学应力不均的问题,会造成材料局域结构破坏;此外,高电压下电极-电解液界面的副反应会不断生成新的 CEI 膜,伴随着过渡金属的溶解和沉积,引起材料表面失效。近年来,研究者主要通过缩小电压窗口、元素掺杂、表面修饰等方法解决上述问题,多数方法都以牺牲容量为代价,且表面包覆的材料往往伴随包覆层与体相材料晶格不匹配的问题。针对上述问题,报告人通过高稳定壳层与高比能内核共搭配设计,构筑了一系列具有不同掺杂壳层结构的层状正极材料,其在充放电过程中展示出优异的结构和电化学稳定性,这为新型高性能钠离子电池正极材料的精准构筑铺平了道路。

报告人聚焦层状锰基正极材料开展如下工作:1)通过稳定的镁掺杂氧化物“铠甲”来抑制内核材料体积改变的策略,构筑了外壳掺镁的球状镍锰基氧化物材料,有效抑制了材料高电压区不可逆相变的问题;2)通过后置&串联进料共沉淀工艺,构筑了无相界面的梯度掺镁的核壳结构,在保证材料容量的同时,进一步提升了材料的结构稳定性,实现了超过 3000 次的循环寿命。这些研究为发展高性能钠离子电池电极材料提供了理论与实验支撑。

A01-93

面向应用的反式钙钛矿太阳能电池研究

陈炜

华中科技大学

反式结构电池更容易量产,且兼容各种叠层电池结构,有利于产业化放大,反式电池逐渐成为当前产业界的主流。陈炜与 2015 年发表国际上首篇反式钙钛矿太阳能电池 Science 论文以后,长期聚焦于突破反式钙钛矿太阳能电池效率极限,大面积可控制备和稳定性瓶颈方向。通过研究高光热稳定的 FACsPbI3 钙钛矿晶体生长和缺陷钝化机制、大面积钙钛矿涂布成膜机理、发展新型分子界面材料、独一无二的 Bi 基惰性金属电极体系、构建基于多重阻隔薄膜的限域反应体系,有效提升了反式钙钛矿太阳能电池的基础认证效率和稳定性。截至目前,在国际上认可的权威机构福建计量院获得小面积电池的认证效率达到 26.5%,小模组认证效率达到 23.1% (面积 11.1cm²),均超过了当前的效率记录,有望写进国际太阳能电池效率记录表。钙钛矿-钙钛矿叠层太阳能电池认证效率也达到了 29.8%,也超过当前世界记录 29.1%。此外,还获得了德国 VDE 颁发的钙钛矿太阳能模组稳定性第三方认证报告。本次报告,陈炜将详细阐述上述学术研究进展,此外,还将介绍技术支持对口公司武汉九曜光电科技有限公司在工程化放大方面的进展。

A01-94

钙钛矿氧化物析氧电催化剂的高效设计与可控调控

孙毅飞

厦门大学

可逆固体氧化物池(RSOC)是一种全固态电化学能源转化装置,其电解池模式(SOEC)可实现 CO₂ 向高附加值化学品的定向转化,具有综合效率高、无污染排放等优势,有望为实现“双碳目标”做出巨大贡献。SOEC 主要由燃料极、电解质和空气极构成,在电解模式下,SOEC 的空气极主要发生氧析出(OER)反应,其较大的极化活化损耗和过电位是进一步降低 SOEC 能耗的关键瓶颈问题之一。针对此,首先,我们提出了基于具有可行性和有效性的迁移学习范式,借助机器学习提升钙钛矿材料的模型预测准确性和泛化能力,并对钙钛矿材料的离子信息等特征描述符进行编码,提出混合分类结合全局拟合模式,依托高通量材料组分筛选、优化与在线预测模型,在保留特征描述符完整度的同时克服传统机器学习模型在针对数据

集较少时易过拟合等瓶颈,快速获取特性优良钙钛矿材料,加速钙钛矿电极材料的高效设计与开发。其次,我们建立钙钛矿“表面重构”策略,通过一步氧化烧结、原位还原等手段,对钴基钙钛矿实现了可控的表面重构,分别构建了 Ir/CoO/SrCoO₃ 叠层三相表面和 R-P/立方相混合异质表面的特殊结构。对于前者,该策略同时实现了材料赝电容和双电层电容的指数级提升,对于后者,通过准原位 XPS 和原位电化学质谱证明了材料遵循氧空位参与的高稳定晶格氧机制。同时提出结构熵值的优化工具,实现对空气电极材料活性的精细调控。研究发现 Ni、Mg、Mn 等共掺杂的高熵钴基钙钛矿材料的表面会生成更多稳定的氧空位及空穴态,且具有更高的氧离子扩散速率,催化剂的结构熵值与电催化氧析出性能以及材料 d 带中心等性能描述符之间存在着线性耦合关系。该系列研究为高活性钙钛矿空气电极的发展开辟了新路线。

A01-95

生物质衍生硬炭负极材料的量化制备与储钠性能

邓健秋

桂林电子科技大学

由于具有成本低、易于合成和环境友好等优点,生物质硬炭材料被认为是钠离子电池最有潜力的负极材料之一,然而生物质硬炭材料的结构和储钠性能受原料的影响,导致首次库伦效率低,制备工艺路线多。遴选生物质原料,采用简易的制备方法,获得高性能的生物质硬炭材料具有非常重要的意义。在本项工作中,我们以原料来源广泛为前提,选取一系列生物质材料(淀粉、葡萄糖、蔗糖、木质素、纤维素、半纤维素、玉米秸秆、甘蔗渣、芦竹、竹子、椰壳等),通过炭化和除杂的简单工艺路线,合成了多种生物质硬炭材料,用作钠离子电池负极。通过材料结构表征和电化学测试技术系统研究了硬炭材料的组织结构、储钠性能和场景应用。研究发现,(1)纤维素衍生的硬炭材料展示了最优的储钠性能,首次比容量高达 300 mAh/g,首效高达 90.1%;(2)适量的炭包覆和复合可以提高生物质衍生硬炭材料的首效和比容量;(3)微孔和介孔丰富的生物质硬炭材料可以提供高比容量和稳定循环性能。

A01-96

钾离子电池碳基负极边缘氮掺杂缺陷的调控

张文礼

广东工业大学轻工化工学院

钾离子电池碳基负极边缘氮掺杂缺陷的调控

A01-97

用于锂硫电池的 p 区催化剂设计及催化机理探究

化五星

河南大学

锂硫电池具有理论能量密度高(2600 Wh kg⁻¹)、成本低廉、安全性高等优点,是极具应用潜力的下一代储能器件。然而,在硫还原反应(SRR)过程中,单质硫向可溶性 Li₂Sn(Li₂Sn, 3≤n≤8)转化的活化能较低,而 Li₂Sn 向放电产物 Li₂S₂/Li₂S 转化的活化能较高(即 SRR 反应速控步),导致生成的 Li₂Sn 不能得到及时转化并大量累积在电解液中而引起“穿梭效应”,严重阻碍了锂硫电池的实用化进程。因此,如何从反应动力学的角度探索 SRR 反应的电催化剂,加速 SRR 速控步中 Li₂Sn 的转化,是解决穿梭效应问题的关键。

受 d 带模型作为过渡金属表面催化活性描述符的启发,我们通过实验方法获得了 p 区金属硫化物(p 区金属指 d 轨道电子处于填充态的金属)中 S 元素的 p 电荷密度作为 SRR 催化活性的“描述符”。实验结果表明,p 区金属硫化物中 S 元素的 p 电荷密度与 SRR 速控步的吸附活熵(ΔS0*)和活化能(Ea)呈线性相关。硫化铋(Bi₂S₃)中 S 元素的 p 电荷密度增加最大,在 SRR 的速控步中表现出最大的 ΔS0*和最小的 Ea,这使基于 Bi₂S₃ 催化剂的电池表现出最优的电化学性能,在 5 C 的倍率下循环 500 圈后,容量保持率达到 85% 以上。该工作为锂硫电池催化材料的理性设计及其实用化技术开发提供了新思路。

[1] W. Hua, T. Shang, H. Li, Y. Sun, Y. Guo, J. Xia, C. Geng, Z. Hu, L. Peng, Z. Han, C. Zhang, W. Lv, Y. Wan, *Nature Catalysis*. 2023, 6, 174.

[2] W. Hua, H. Li, C. Pei, J. Xia, Y. Sun, C. Zhang, W. Lv, Y. Tao, Y. Jiao, B. Zhang, S. Qiao, Y. Wan, Q.-H. Yang, *Advanced Materials*. 2021, 33, 2101006.

[3] J. Xia, W. Hua, L. Wang, Y. Sun, C. Geng, C. Zhang, W. Wang, Y. Wan, Q.-H. Yang, *Advanced Functional Materials* 2021, 31, 2101980.

[4] L. Wang, W. Hua, X. Wan, Z. Feng, Z. Hu, H. Li, J. Niu, L. Wang, A. Wang, J. Liu, X. Lang, G. Wang, W. Li, Q.-H. Yang,

A01-98**本征结构空位对 ZrNiSn 基材料热电运输机制的影响**

杨雄

西南交通大学

half-Heusler 合金是一种热电性能和力学性能优异的热电材料，在废热回收和深空探测等领域具有很好的应用前景。目前普遍认为，性能较好的 N 型 half-Heusler 热电材料为 $Zr_{1-x-y}Hf_xTi_yNiSn_{1-z}Sb_z$ 体系。然而，该体系中 Hf 的最优掺杂量在 0.3~0.7 之间，Hf 使用量过高会增加热电材料的生产成本，限制了其实际应用。本研究通过调整基体中本征结构空位的含量，同时将能带工程和缺陷工程引入 ZrNiSn 基合金中，在提升电学性能的同时优化热学性能，使其 ZT 值可与大多数 Hf 掺杂试样的 ZT 值相比拟，从而有效解决了 Hf 的使用量较高的难题。

A01-99**硫化物全固态电池界面改性研究**

李德平、慈立杰*

哈尔滨工业大学（深圳）

目前，全固态电池已成为高能量密度电化学储能器件最具前景的选择之一。然而，全固态电池中的固-固界面接触差、界面副反应严重以及动力学迟滞等问题严重阻碍其进一步发展。本报告将介绍硫化物全固态电池的界面问题来源及改性思路，重点关注高比容量硅基负极材料和高电位富锂锰/高镍正极材料，具体内容包括：1) 通过在硅基负极材料表面构筑 Li-Al-O 快离子导体，提升其在硫化物全固态电池中的界面稳定性及离子输运动力学；2) 通过在高镍/富锂锰正极材料表面进行“快离子导体表面包覆+近表面体相掺杂”协同优化改性，有效解决高电压正极在全固态体系中的动力学迟缓问题和界面副反应问题。上述研究成果为阐明全固态电池失效机制和探索优化改性策略提供了可借鉴思路。

相关研究成果

1. *Chemical Society Reviews* 2024, DOI: 10.1039/D3CS00741C
2. *Advanced Energy Materials* 2023, DOI: 10.1002/aenm.202300466
3. *Advanced Functional Materials* 2023, DOI: 10.1002/adfm.202214775
4. *Energy Storage Materials* 2022, DOI: 10.1016/j.ensm.2022.11.054
5. *Advanced Science* 2024, DOI: 10.1002/advs.202310136
6. *Small* 2023, DOI: 10.1002/sml.202302934
7. *Carbon Energy*, DOI: 10.1002/cey2.332

A01-100**能源金属短流程提取及电化学储能应用**

熊训辉

华南理工大学

能源金属短流程提取及电化学储能应用

A01-101**水系锌电池的界面调控和优化**

吴超

上海理工大学

水系锌电池的界面调控和优化

A01-102**低钴/无钴层状正极材料设计制备及可逆性与稳定性研究**

王海龙

宁夏大学 材料与新能源学院

低钴/无钴层状正极材料是降低动力电池成本、进一步提高电池能量密度的关键材料。低钴/无钴导致高镍层状正极材料的结晶温度显著升高，引起 Li/Ni 混排缺陷、表面金属离子溶解、表面残余锂杂质问题恶化，材料的脱/嵌锂可逆性也面临

严峻挑战。本课题组从混排缺陷与表层结构成分变化的热力学与动力学机制出发，提出了合成后热处理、 AlPO_4 /乙炔黑双重包覆等的制备新方法，精准调控了 Li/Ni 混排缺陷浓度，有效改善了低钴高镍层状正极材料的高温循环稳定性。采用共晶锂盐大幅降低了无钴 $\text{LiNi}_{0.8}\text{Mn}_{0.2}\text{O}_2$ 的结晶温度与表面残余锂杂质，采用原位 XRD 研究揭示了结晶动力学变化及改善循环稳定性的机制。发明了阳离子空位协同 Al 替代 Co 成分设计方法，采用原位 XRD 结合 DFT 计算揭示了无钴层状正极材料的脱嵌锂可逆性变化机理，化解了钴含量降低乃至消失对高能量密度锂电池带来的不利影响。

A01-103

锌空电池氧还原电催化剂微环境调控

袁凯

南昌大学

空气电极氧还原反应 (ORR) 电催化剂性能是决定锌空电池器件能效的关键因素，目前商业化铂基催化剂的稀缺储量严重阻碍了器件大规模应用。过渡金属单原子碳材料具有高的 ORR 催化活性，但要走向实际应用，其 ORR 性能还有待进一步提升。采用异质原子掺杂、纳米聚集体诱导、不对称配位、轴向配位等策略，有效调控活性位点电子结构和几何结构等微环境，优化氧中间体的吸附，显著提升 ORR 催化性能。采用卟啉、酞菁等构筑单元，通过自下而上的化学合成方法，无需碳化，精准设计合成具有结构明确的催化剂，可为研究催化剂结构和性能之间的关系提供新思路。通过液相原位电荷剥离策略，制备得到铁酞菁聚合物纳米片纵向接枝于石墨烯的多级次纳米片，作为高效氧还原电催化剂用于液态和柔性准固态锌空电池。利用轴向吡啶基团对传统卟啉 Co-N₄ 位点进行五配位搭建，改善 Co 局部电荷分布态以优化催化性能。围绕卟啉聚合物，在卟啉第二配位环引入取代基并调控给吸电子能力，精准构造位点电子杂化轨道排布，降低决速步反应势垒构筑具有高转换频率的电催化剂，为高性能催化剂的设计提供指导。

参考文献：

- [1] Yuan K*, Zhuang X.*, Chen Y.*, and Scherf U., J. Am. Chem. Soc., 2020, 142, 2404.
- [2] Li L., Yuan K.*, and Chen Y.*, Angew. Chem. Int. Ed., 2023, 62, e2301642
- [3] Tang X., Wei Y., Zhai W., Wu Y., Hu T., Yuan K.*, Chen Y.*, Adv. Mater., 2023, 35, 2208942.
- [4] Huang B., Yuan K.*, and Chen Y.*, Angew. Chem. Int. Ed., 2023, 62, e2306667.
- [5] Chen J., Huang B., Yuan K.*, and Chen Y.*, Adv. Funct. Mater. 2023, 33, 2209315.
- [6] Huang B., Yuan K.*, Zhuang X.*, and Chen Y.*, CCS Chem., 2023, 5, 1876.
- [7] Li L., Yuan K.*, and Chen Y.*, Acc. Mater. Res., 2022, 3, 584.
- [8] Li L., Yuan K.*, and Chen Y.*, Adv. Mater., 2024, 36, e202308326.

A01-104

编辑视角下的论文写作与发表

张甜甜

Matter, Cell Press

Matter 是细胞出版社继 Chem, Joule 之后推出的另一本材料类旗舰刊物，与 Cell, Chem 和 Joule 互为姊妹刊。稿件接收方向涵盖各个领域内的优秀先进材料，包括生物材料，能源材料，光学材料，磁性材料等。旨在推进材料在多个学科领域内的发展，推动先进材料的实用化发展进程。本报告将重点介绍 Cell Press 旗下 Matter 等物质科学领域的期刊，就论文写作、文章投稿、同行评审中的重要流程和注意事项做出详细介绍，并现场解答老师同学在投稿中遇到的问题。

报告人：

Tina Zhang 博士, Matter 科学编辑。

张博士毕业于加州大学圣地亚哥分校，于 2019 年 4 月加入 Cell Press 细胞出版社，担任交叉学科期刊 iScience 的科学编辑，负责处理材料科学领域的稿件与项目。凭借在材料科学领域的深厚积累和多年编辑经验，她于 2022 年 8 月加入 Matter 团队，全职担任科学编辑一职。与此同时，作为细胞出版社物质科学团队的一员，她也为 Device, Patterns, Chem Catalysis, Cell reports physical science, iScience 等期刊提供顾问支持。

A01-105

高比容量氧化物正极全固态锂电池及其界面研究

龚正良

厦门大学

A01-106**Synthesis of Advanced Pyrazole and N–N-Bridged Bistriazole-Based Secondary High-Energy Materials**

Srinivas Dharavath*

Indian Institute of Technology Kanpur (IIT Kanpur)

Recent attention in energetic materials research has been directed towards creating new compounds with improved energetic performance and decreased sensitivity to heat, shock, impact, and friction. Incorporating nitrogen-rich azoles into the framework has emerged as a promising strategy due to their ease of synthesis and ability to achieve the balanced performance. In this work, we have synthesised 3,5-dihydrazinyl-4-nitro-1H-pyrazole (2), 9-nitro-1H-pyrazolo[3,2-c:5,1-c']bis([1,2,4]triazole)-3,6-diamine (3), N-N bonded N,N'-([4,4'-bi(1,2,4-triazole)]-3,3'-diyl)dinitramide (5) and its stable nitrogen-rich energetic salts in a single or two-steps with quantitative yields from commercially available inexpensive starting material 4,6-dichloro-5-nitropyrimidine (1). Along with the NMR, IR, DSC, and elemental analysis (EA) characterization, the structures of almost all the compounds were confirmed by single crystal X-ray diffraction studies. Interestingly, most of the compounds show excellent thermal stability (ranges between 221 to 250 °C) than RDX (210 °C) and detonation velocities ranges from 8992 to 9069 m s⁻¹ which are better than RDX (8878 m s⁻¹) and close to HMX (9221 m s⁻¹). All these compounds are insensitive to impact (10 to 35 J) and friction (360 N). The novelty, synthetic feasibility, and excellent energetic performance of all the molecules suggest that they can be used as potential secondary explosives in defence and civilian fields.

References:

1. Yadav, A. K.; Kumar, N.; Ghule, V. D.; Dharavath, S. *Org. Lett.* 2023, 25, 8606–8610.
2. Yadav, A. K.; Ghule, V. D.; Dharavath, S. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2022, 14, 49898–49908.
3. Klapötke, T. M. *Chem. High-Energy Mater.*, Walter de Gruyter GmbH, Berlin/Boston, 2022.
4. Yadav, A. K.; Ghule, V. D.; Dharavath, S. *J. Mater. Chem. A*, 2022, 10 (23), 12702–12712.
5. Zhang, J.; Dharavath, S.; Mitchell, L. A.; Parrish, D. A.; Shreeve, J. M. *J. Am. Chem. Soc.* 2016, 138 (24), 7500–7503.

A01-107**高容量负极的多尺度界面调控和离子补偿**

马越

西北工业大学

随着电芯额定能量密度的提升，其综合性能会呈现明显的劣化过程，包括容量衰减、内阻的增加导致电压降低和功率损失，相应的失效规律也根据其构型匹配、储存或使用条件（温度、应力、充电/放电电压范围）的不同而变化。其次，多组分在电芯构型内相互关联，形成了一个物理化学过程错综复杂的系统。传统高容量电极材料的开发主要集中于试错型的工艺和性能验证。在复杂物理场条件下，如何明晰系统中多组分的介稳态晶相在失效过程中的协同变化过程，解耦关键材料结构-应用环境-电芯性能的构效关系，对于厘清电极结构的本质规律、分析反应路径、优化关键组分的服役特性具有普适性的重要意义。因此，课题组工作聚焦于针对高能量密度电芯失效机制，尤其是离子利用率与电极跨尺度、多组分、瞬态相变关系开展研究，为不同服役条件的电芯功能层优化提供思路。

A01-108**All-glycerogel stretchable supercapacitor with stable performance in a wide temperature window from –20 to 80 °C**

Insu Jeon*

Chonnam National University

Stretchable supercapacitors (s-SCs) are extensively used in portable and wearable smart electronic devices. However, existing s-SCs exhibit low electrical conductivity/stretchability, weak electrode/electrolyte interfaces, and limited operational temperatures, which severely limit their practical applications. Accordingly, we have developed a stretchable glycerogel supercapacitor (s-GGSC) addressing these limitations. Glycerol-mediated robust integration of poly(vinyl alcohol) and poly(3,4-ethylenedioxythiophene) polystyrene sulfonate through a simple strategy of partial drying–reswelling and thermal annealing eliminates the conventional trade-off between electrical conductivity and stretchability and provides adaptability to wide temperature ranges (–20 to 80 °C). Heat-mediated facile exchange of inter- and intramolecular hydrogen bonding enables robust bonding between the electrode and

electrolyte in the developed s-GGSC, thus solving interfacial problems under harsh mechanical conditions. The high electrical conductivity ($1089 \pm 49 \text{ S m}^{-1}$) and fracture strain (232%) of the electrode preclude the use of an additional current collector. s-GGSC exhibits areal capacitance retentions of 90.92% and 93.27% after 7 d of incubation at -20 and $80 \text{ }^\circ\text{C}$, respectively, and excellent cycling stability (81.48% capacitance retention) after 10,000 cycles. Furthermore, the areal capacitance of the device remains constant after intense mechanical deformations, such as bending, twisting, and stretching. s-GGSC outperforms existing flexible and/or stretchable supercapacitors under harsh conditions, confirming its suitability as a potential power source for wearable and stretchable smart electronic devices.

A01-109

离子传输电阻辨析实现超低阻抗电化学滤波电容

吴明懋

福州大学

高性能滤波电容器是电子电路中必不可少的的元器件,在未来柔性以及微型电路等领域中有着不可替代的巨大作用。但目前我国高端的电容依然依赖进口,科技日报评价高端电容的开发是我国三十五项典型的“卡脖子”难题。现有的滤波电容器,如电解电容等,虽然在介电电容中具有较高的电容量,但是如果考虑其容量体积比则越来越不具有优势,大部分的滤波电容在电路中的体积占比常超过 30%,这已经成为了后摩尔时代微型化电路发展的制约因素。

电化学滤波电容器的比容量较传统滤波电容(介电电容)高 3 个数量级,被认为是下一代高性能滤波电容器的发展方向。但在实际的研究中发现电化学滤波电容器离子迁移动力学缓慢,往往难以同时满足高容量存储和高频率响应滤波需求。如何兼顾电极的高频响应性与高比电容性能,设计和制备全新的电化学滤波电容体系,是研究的重点和难点。基于此,本报告从辨析离子传输电阻的来源角度为切入点,从多个层次改善电化学滤波电容的离子传输行为:(1)设计多级的孔道结构;(2)重整器件结构,利用局域电场增强提升离子迁移速率等。为下一步开发高性能电化学滤波电容提供了理论指导。

参考文献:

- [1] Wu, M.; Chi, F.; Geng, H.; Ma, H.; Zhang, M.; Gao, T., Li, C. Qu, L. Nat. Commun., 2019, 10: 2855.
- [2] Xu, S.; Wen, Y.; Chen, Z.; Ji, N.; Zou, Z. Wu, M.*; Qu, L.*; Zhang, J.* Angew. Chem. Int. Ed., 2021, 60: 24505.
- [3] Wen, Y.; Chen, H.; Wu, M.*; Li, C.* Adv. Funct. Mater., 2022, 32: 2111613.
- [4] Wu, M.; Sun, K.; He, J.; Huang, Q.; Zhan, W.; Lu, Z.*; Xia, M.; Zhang, Y.; Lyu, X.; Geng, H.*; Luo, Z.*; Zou, Z. Adv. Funct. Mater., 2023, 33: 2305039.
- [5] Hu, Y.#; Wu, M.#; Chi, F.; Lai, G.; Li, P.; He, W.; Lu, B.; Weng, C.; Lin, J.; Chen, F.; Cheng, H.; Liu, F.; Jiang, L.; Qu, L.* Nature. 2023, 624(7990): 74-79.

A01-110

n 型中温区 PbTe 材料近室温热电性能及制冷效应研究

钟艳

四川文理学院

IV-VI族 PbTe 基材料源于 550-850K 内优异的热电性能和机械稳定性,已被广泛应用于温差发电。然而,300-550K 近常温域热电性能的不足,阻碍了其在热电制冷技术方面的发展。为拓宽 PbTe 基热电器件的多场景应用,本次报告基于间隙原子溶解度工程和微观结构设计,详细阐述了 n 型 Cu 间隙构型 PbTe-VTe₂、PbTe-MnTe 材料的载流子输运特性和室温热电性能,揭示了 n 型 Cu 间隙构型 PbTe 材料室温热电增强的物理机理。另一方面,通过 Sb₂Te₃ 电荷平衡掺杂引入阳离子空位,诱导 PbTe-PbS 材料在室温下的新异质结构以优化热学特性,阐述了高固溶 PbTe-PbS 合金中微观结构的演化规律,建立材料微观结构、晶格热导率与室温热电性能的构效关系。基于上述研究结果,高性能的 n 型间隙构型 PbTe 材料展现出了室温制冷的巨大潜力,然而其室温制冷技术的发展和制冷模块构筑仍面临诸多关键难题。最后,本次报告就如何加快中温区 PbTe 材料在室温制冷温控技术领域的发展提出了几点研究路径,以期 PbTe 基材料的制冷研究提供新的思路,并为其它中温区热电材料体系的室温热电增强起到借鉴意义。

A01-111

高安全性聚合物电解质的设计及其固态锂电池性能研究

邓魁荣

五邑大学

固态锂电池理论上具有高安全性、高能量密度、耐高温等优点，被认为是极具潜力的下一代电化学储能技术。固态锂电池中，固态电解质是最关键的组成部分，固态电解质的离子电导率低、界面稳定性差等问题是制约固态锂电池发展的关键瓶颈，固态电解质是当前固态电池领域研究的重点课题。聚合物电解质具有柔韧性好、密度低、安全性高等优点，在固态锂电池中有良好的应用前景。聚合物电解质目前面临室温离子电导率低，安全性较差，可燃性高，锂枝晶，界面稳定性差，电化学窗口低等问题。针对这些问题，我们通过引入阻燃氟化增塑剂、锂盐引发聚合原位制备聚合物电解质、引入阴离子受体、引入高可逆性共价键来实现聚合物电解质的快速自修复、功能化锂盐制备单离子导体等策略来有效提高聚合物的离子电导率、阻燃性能、电化学稳定性窗口、界面稳定性和自修复性能，并实现了良好的固态电池性能。

A01-112

量子极限下的热电优化

陈晓彬 2、丁思凡 1、徐勇*1、段文晖 1

1. 清华大学
2. 哈尔滨工业大学（深圳）

过去认为，最优热电这个经典问题已经被 Mahan 和 Sofo 等人从理论上解决了[Proc. Natl. Acad. Sci. USA 93, 7436 (1996)]。我们重温了这个问题并在量子极限下进行了讨论。利用 Landauer-Büttiker 公式把热电优值 (zT) 写成电子透射概率 T 的泛函后，我们提出利用变分法来得到使 zT 最大的最优透射概率 T 。结果表明最优的透射概率 T 是一个厢型函数而不是 Mahan 与 Sofo 所提出的 δ 函数，并且厢型函数得到的最优 zT 可以远超 Mahan 与 Sofo 极限。进一步，我们提出可以用拓扑材料体系来实现最优的透射概率。我们的工作得到了量子热电的理论上限，这对未来热电学的发展有重要意义。

A01. 能源转换与存储材料

分会主席：郭正晓、陈人杰、黄学杰、潘洪革、齐志刚、施志聪、贾礼超、武英

A01-P01**Enhanced thermoelectric performance of nanoparticles modified Cu₁₂Sb₄S₁₃ tetrahedrites**

孙富华

湖南师范大学

Thermoelectric materials are famous for the ability to transform the hot energy to electricity or conversely. Cu₁₂Sb₄S₁₃ tetrahedrite has been received wide attention for its low thermal conductivity. There are plenty of methods to improve their thermal electrical (TE) performance, which includes introducing the nanoparticles (NPs). In this work, some NPs of different grain size are doped in the Cu_{11.5}Ni_{0.5}Sb₄S_{12.7} matrix, they are prepared by mechanical alloying and spark plasma sintering. At last, just a little (0.2vol%) of SiC leaded to a ~1.0 ZT values at 723K, in which the nanopores and grain boundaries are verified to effectively decrease lattice thermal conductivity.

A01-P02**基于 Sb₂Si₂Te₆ 材料的热电器件研究**

王卫华

中国科学院大连化学物理研究所

热电材料是一种可以将热能转变为电能的材料，但是到目前为止材料的热电性能和器件的发电性能都比较低，需要进一步研发高性能热电材料和器件。Sb₂Si₂Te₆ 是一种新型的热电材料，但是到目前为止还没有其在器件方面的研究。本实验中，在 9 种金属中成功筛选出 Co 作为 Sb₂Si₂Te₆ 的电极材料，实现了电极材料与热电材料之间高接触强度（18 MPa）和低接触电阻（2.14 μΩ cm⁻²）的焊接效果。同时基于这种优异的电极材料，通过有限元模拟仿真，在确定了 Sb₂Si_{1.99}Ge_{0.01}Te₆ 和 Yb_{0.3}Co₄Sb₁₂ 热电材料的横截面积最优比后，成功制备了基于 Sb₂Si_{1.99}Ge_{0.01}Te₆/Yb_{0.3}Co₄Sb₁₂ 的热电器件。所制备的器件实现了最大输出功率 1.5 W 以及最大能量转化效率 4.2%。本实验体现了新型热电材料 Sb₂Si₂Te₆ 的应用潜力，为 Sb₂Si₂Te₆ 热电材料的后续研究提供了新的思路。

A01-P03**氨硼烷促进的铜氧化物催化剂表面重构以实现高效催化水解制氢**

王晨阳

运城学院

富氢储氢材料氨硼烷(AB)水解制氢过程中，过渡金属氧化物(TMOs)作为催化剂活性位，可帮助实现快速大量释放氢气，但是其催化机制仍在探讨中。本文开发了可精确调控价态的散子状无金属态 Cu₂O-CuO 催化剂，明确了铜氧化物催化活性的根本来源，实现了 AB 的高效水解制氢。Cu₂O-CuO 中 Cu 价态含量连续变化引起催化剂活性呈火山型趋势，其中水解制氢速率最优可达 475.5 mL/(g·min)，活化能(E_a)仅为 36.3 kJ/mol。通过联合使用后催化剂的表征证明，催化过程中 AB 致使催化剂发生表面重构，形成了 Cu-Cu₂O 异质结构，Cu 与 TMOs 分别增强了对 O-H 键和 B-H 键的活化，加速反应进行。这项工作首次构建了 Cu 价态与催化活性之间的构效关系，为 AB 水解催化利用 TMOs 的设计提供理论基础。

A01-P04**制备高路易斯酸性分子筛改善 PEO 基电解质用于固态锂金属电池**

刘晨

天津大学

固态电解质有效避免了商用锂离子电池漏液、易燃、易爆等问题成为新兴的研究目标。固体聚合物电解质 (SPE) 因其易加工、灵活性和优异的薄膜形成能力提供了一个卓越的选择。然而，低离子电导率和较差的锂离子转移数限制了其在全固态锂电池 (ASSLBs) 中的应用。在这项研究中，成功制备了 Sn 修饰 Lewis 酸中心的 Beta 分子筛 (Sn-Beta)，并将其引入聚环氧乙烷 (PEO) 基体中制备 SPE。Sn 的引入创造了丰富的 Lewis 酸位点，Lewis 酸在提高离子电导率和离子迁移数方面起着关键作用。因此，该 SPE 在 60°C 下表现出高离子电导率 (1.35×10⁻³ S cm⁻¹) 和离子迁移数 (0.50)。此外，Sn-Beta 有序的孔隙通道提供了均匀的锂离子传输途径，促进了锂离子的均匀沉积。结果表明，该 SPE 具有优异的电化学稳定性，在锂对称电池 (0.1 mA cm⁻², 0.1 mAh cm⁻²) 中实现 2030 h 的稳定循环，LFP//Li 全电池在 1 C 下循环时间长达 500 次，容

量保持率为 81.3%。

A01-P05

多元金属间化合物甲醇电氧化催化剂助力高效混合海水电解制氢

徐凯洋

松山湖材料实验室

甲醇是最简单的一元醇，具有价格低，水溶性好以及其热力学氧化电位较低等优点。甲醇电氧化的理论起始电位仅为 0.016 V vs. RHE，因此利用甲醇电氧化反应（MOR）来取代 OER 将大大减小电解的能耗，同时确保即使在大电流密度下电解也不会触发阳极析氯反应。最大程度上发挥甲醇电氧化反应取代优势的关键是开发高效的 MOR 催化剂。为此，团队研究人员近期与广东工业大学刘全兵教授课题组（负责理论计算）合作，采用浸渍-冻干法制备了一系列新型的四元 $\text{Pt}_{(2-x)}\text{Pd}_x\text{CuGa}$ 金属间化合物纳米粒子（i-NPs）催化剂。详细的电化学表征显示，以 Pd 原子取代 Pt_2CuGa 中 10% 的 Pt 原子得到的 $\text{Pt}_{1.8}\text{Pd}_{0.2}\text{CuGa/C}$ i-NPs 催化剂具有最佳的 MOR 电催化性能，其 MOR 质量活性超过之前报道的大部分 Pt 基电催化剂。同步辐射 X 射线吸收谱（XAS）研究证明了 Pd 以原子分散形态存在于 $\text{Pt}_{1.8}\text{Pd}_{0.2}\text{CuGa/C}$ i-NPs 中。密度泛函理论（DFT）计算显示，Pd 的引入导致了催化剂表面电子态的重新分布，相对缺电子的 Pd 位点有利于 OH^- 的吸附，相对富电子的 Pt 位点可以减弱反应中间体的吸附，其协同作用加速了甲醇的氧化。此外，原位表面增强拉曼光谱（SERS）和电化学微分质谱（DEMS）研究证实了甲醇氧化过程中主要的反应中间体为 $^*\text{HCOO}$ ，而不是可以导致催化剂中毒的 $^*\text{CO}$ ，因此甲醇可以高效、稳定地被 $\text{Pt}_{1.8}\text{Pd}_{0.2}\text{CuGa/C}$ i-NPs 催化氧化。进一步地，团队研究人员展示了将 $\text{Pt}_{1.8}\text{Pd}_{0.2}\text{CuGa/C}$ i-NPs 催化的 MOR 与阴极析氢反应（HER）耦合，可以大大减低电解所需的电压，电解池在 75°C 条件下工作在 500 mA/cm² 大电流密度下的电压仅为 0.938 V，而且电解池在模拟海水（1 M KOH + 0.5 M NaCl + 1 M CH₃OH）和天然海水中均可以稳定运行上百小时。

A01-P06

2.7 V 锌/钠混合离子电池用低浓度水凝胶电解质结构设计及性能研究

秦天锋

河南省科学院

为了获得更高的能量输出，锌基电池需要在远远超出水系电解质的热力学稳定电势极限的电压窗口内工作。为了保证水系电池的稳定性及其动力学的可逆性，需要在电极/电解质界面处原位构建界面相。虽然水凝胶很有潜力作为锌离子电池的电解质，但界面相的缺乏使得水系电池不能在更高电压下稳定工作。本研究提出一种作为交联剂的引发剂体系，其使水凝胶聚电解质在 25°C 下自发地原位形成界面相，拓宽水凝胶聚电解质的电化学稳定性窗口至 3.5 V 以上。该引发剂体系使所设计的水凝胶变成单离子导体，从而将离子电导率提高到 ~280 mS/cm。这种水凝胶推动锌//锰酸锂软包电池在 0.2-2.7 V 电压窗口内稳定工作，展现出高能量密度和出色的倍率能力。该工作为高比能固态锌离子电池的发展奠定了基础。

A01-P07

高比容量补锂添加剂改性及研究

武美玲

兰州理工大学

高比容量补锂添加剂因其比容量高，补锂效果好而备受关注。然而，由于其高锂含量而导致该材料表面具有强碱性使得它对空气敏感难以加工。本研究基于上述缺点，对其进行表面处理改性，旨在克服其空气稳定性，制备一种即保留其容量并且能在环境中稳定存在的补锂添加剂。研究结果也显示了上述改性方法的可行性，并取得了较理想的结果。本工作为该材料的进一步产业化应用提供了有力的支撑。

A01-P08

Enhancement of Vanadium Addition on Hydrogen Storage Properties of High Entropy Alloys TiZrFeMnCrV_x

陈金婷

华北电力大学

High Entropy Alloys (HEAs) have attracted increasing attention due to their unique characteristics, of which the lattice distortion property is particularly beneficial for hydrogen storage. Herein, we prepared the TiZrFeMnCrV HEAs with different V contents and elucidated the effect of V on the hydrogen storage properties. The TiZrFeMnCrV_x (x = 0.5, 1.0, 1.5, 2.0 at%) alloys rapidly absorb 90% of their hydrogen storage capacity within 76 s at 30 °C. Among the alloys, all the three alloys TiZrFeMnCrV_x (x = 1.0, 1.5, 2.0

at%) exhibit higher hydrogen absorption properties, which absorb 1.91, 1.93 and 1.91 wt.% of hydrogen at 30 °C, respectively. Among them, the TiZrFeMnCrV_x (x = 1.0 at%) alloy shows the best dehydrogenation performance, starting to release hydrogen at 151.33 °C and terminating at 346.36 °C. Meanwhile, the TiZrFeMnCrV_x (x = 1.0 at%) exhibits remarkable cycle stability and displays a reversible gravimetric capacity of 98% after 15 cycles.

A01-P09

Excellent lithium storage of SnO_x/Ti₃C₂ with low Sn content by controlling the oxygen vacancy content

徐婷婷

华北电力大学

Ti₃C₂ is widely regarded as a promising 2D material for Lithium-ion batteries due to modifiable layered structure and good electrical conductivity. However, its slightly low capacity and ease of stacking limit its practical application. The SnO_x/Ti₃C₂ composites with different oxygen defect contents were prepared through ball milling and H₂ reduction to improve the lithium storage performance of the negative electrode of lithium-ion batteries. The composite anode with a heat treatment time of 4h (SnO_x/Ti₃C₂-4) has an ultrahigh reversible discharge capacity (824.3 mA h g⁻¹@0.1 A g⁻¹), ultralong cycle stability (at the same current density, the discharge capacity at the end of 260 cycles is 750.0 mA h g⁻¹) and good rate performance. Microstructural analysis demonstrated that the SnO_x (x=0, 1, 2) and Ti₃C₂ were homogeneously mixed to form lamellar composites. Ti₃C₂ nanosheets suppressed the volume expansion and agglomeration of SnO_x (x=0, 1, 2) due to their unique confinement effect and layered structure. Furthermore, the oxygen vacancy defects generated by the partial reduction of SnO₂ accelerated the diffusion of lithium ions and electrons, greatly improves the electrochemical performance of lithium-ion batteries. This study opens up ideas for designing high-performance lithium-ion anode materials.

A01-P10

Enhanced catalysis of Pd single atoms on Sc₂O₃ nanoparticles for hydrogen storage of MgH₂

黄海翔

华北电力大学

The controlled preparation of novel catalysts in solid-state hydrogen storage materials has attracted significant scholarly attention. In this study, a catalyst consisting of Pd single atoms supported on Sc₂O₃ nanoparticles (PdSA@Sc₂O₃) was synthesized by a simple method. The peak dehydrogenation temperature of MgH₂ with the addition of 10wt% PdSA@Sc₂O₃ is 310.1 °C, which is 62.5 °C lower than that of pure MgH₂, showing a positive catalytic effect. Specifically, the MgH₂-10wt%PdSA@Sc₂O₃ with a low Pd content of 0.5 wt% can release 5.18 wt% of hydrogen at 300 °C in 15 min, with an initial release rate of 0.43 wt%/min. It can absorb 5.98 wt% of hydrogen at 250 °C in 3 min, and still adsorb 5.17 wt% of hydrogen at 150 °C in 1 h. This indicates its ability to absorb hydrogen rapidly at high temperatures and continuously at low temperatures. For the catalytic mechanism, theoretical calculations indicate a significant electronic interaction between Pd and Sc₂O₃. The Pd single atoms loaded on Sc₂O₃ have nanoparticles higher hydrogen adsorption energy, which greatly improves the catalytic activity of Pd. Sc₂O₃ generated in-situ during dehydrogenation can destabilize the Mg-H bond and promote hydrogen dissociation. The Mg-Pd alloy produced during the hydrogen absorption and desorption process has an efficient hydrogen pumping effect, which contributes greatly to the kinetic properties of MgH₂. The synergistic catalytic mechanism of Pd single atoms and Sc₂O₃ on de/hydriding of Mg/MgH₂ was systematically investigated, which provides ideas for the commercial production of new controllable and prepared nanocatalysts.

A01-P11

高容量硅碳纳米纤维负极制备及储锂性能研究

吴晓晨

山东大学

硅(Si)作为最有可能取代传统石墨负极的下一代高能量密度锂离子电池(LIBs)负极材料的首选之一备受关注,然而,近年来,硅基复合材料的结构稳定性差和电子/离子导通率低成为人们关注的主要问题,阻碍了硅作为锂离子电池负极材料的进一步发展。

为了解决这些问题，本文采用纳米化与复合化相结合的方式，通过同轴静电纺丝技术和后续的高温碳化过程得到多孔核壳结构的硅碳纳米纤维，并通过微观结构调控来改善硅碳负极的电化学性能。

制备的 Si@C 纳米纤维极片在半电池中 0.2A g^{-1} 条件下循环 500 次，保持 1232mAh g^{-1} 的可逆容量，在 LFP 全电池 0.2C 条件下正常工作。

优异的电池性能主要归功于外层的碳壳可以保护芯层中的纳米硅颗粒不与电解质直接接触，减少了充放电过程中活性物质的损失和电解质的分解；相互交联的碳纤维导电网络提供了快速的离子传输通道，增强了反应动力学；纳米级别的硅可以改善硅在充放电过程中的体积效应，缩短锂离子传输距离，增加活性反应位点；多孔结构可以为硅在循环过程中产生的体积膨胀提供缓冲空间；同时 N 元素掺杂还可以提高极片导电性并为锂离子存储提供更多的活性位点。

这种自支撑电极片不需要额外的粘结剂、导电剂和集流体，可以减少电池的总重量和体积，从而提高能量密度，具有广阔的应用前景。

A01-P12

Mg 添加 MXene Ti₃C₂ 复合储氢材料的相组成和吸放氢性能研究

侯振宇

钢铁研究总院有限公司

Mg 因储氢容量大、可逆性好和成本低，是一种极具应用前景的固态储氢材料。然而其可逆储氢性能受限于缓慢的反应动力学（放氢活化能 $143\text{-}160\text{ kJ/mol}$ ）和较高的操作温度（ $>300^\circ\text{C}$ ），添加催化剂是提高 Mg 吸/放氢动力学以及降低工作温度的有效方法。现阶段，普遍需将 Mg 预先氢化形成 MgH_2 后，再添加催化剂进行储氢性能改善，而 Mg 在形成 MgH_2 时需要较高的温度和氢压。本研究在高纯 Mg 粉中加入 MXene-Ti₃C₂ 在氢气下进行球磨，制备了 Ti₃C₂ 含量为 1 wt.%、3 wt.%、5 wt.% 和 7 wt.% 的复合储氢材料。研究表明，随着 Ti₃C₂ 含量的增加，材料中 MgH_2 的相对含量增加，Mg 的相对含量减少，当 Ti₃C₂ 的添加量为 7 wt.% 时，材料中形成约 75.96 wt.% 的 MgH_2 。储氢性能结果表明，随着 Ti₃C₂ 含量的增加，材料的起始放氢温度降低至 180°C 以下，放氢速率加快。当 Ti₃C₂ 含量为 7 wt.% 时，材料能够在 280°C ，30 min 内放氢 5.0 wt.%，放氢活化能降低至 71.01 kJ/mol 。

A01-P13

气相聚合的 PEDOT 薄膜及热电性能

陈俊萌

江西科技师范大学

导电聚合物由于其高导电性、有前途的催化活性和优异的电化学性能，且具有类金属的导电性和可逆的电化学掺杂/去掺杂能力，被认为是一种很有前途的能量转换和存储材料，在电化学能量转换和储存方面受到了广泛关注。聚(3,4-乙烯二氧噻吩)(PEDOT)是一种杰出的导电聚合物，因其在有机电子器件、传感器、电容器和热电材料中的广泛应用引起了极大的关注。目前制备 PEDOT 可采用化学氧化聚合、电聚合和气相聚合三种不同的聚合方法，这些方法对 PEDOT 膜性能的影响不同。对于化学氧化聚合而言，获得的导电聚合物通常因为溶剂效应而导致较低的电导率和较差的加工性，对于电化学聚合，聚合过程只能发生在导电基底表面，难以实现大规模制备，气相聚合（VPP 技术）可以解决以上两种方法存在的限制，而且对可以使用的基底类型没有限制，从而获得高热电性能的 PEDOT 薄膜。相比于化学氧化聚合和电化学聚合，VPP 技术在设计和制备有序晶体结构 PEDOT 薄膜方面表现出了更为显著的优势。

A01-P14

局部共晶结合表面工程改性镁基氢化物脱氢性能

石睿

南京工业大学

镁基氢化物因其优异的储氢性能而被视为理想的储氢介质。然而，其缓慢的脱氢动力学和较高的操作温度限制了其在实际中的应用。特别是，由于氢在氢化物内部的扩散速率受限，导致大颗粒镁基储氢材料的脱氢温度通常较高。本研究提出了一种创新的改性策略，通过局部共晶反应结合表面功能化处理，显著提升了大颗粒镁基金属氢化物的脱氢性能。本研究采用一步气固工艺制备了镁镍基复合材料 $\text{Mg}_{90}\text{Ni}_{10}\text{H}_x$ ，该工艺借助 Mg-Ni 间的局部共晶反应，成功获得了具有良好负载结构的复合材料。随后，对合成的 $\text{Mg}_{90}\text{Ni}_{10}\text{H}_x$ 进行了表面功能化处理，该处理显著改善了氢化物的脱氢性能，其脱氢峰值温度从 395°C 降低至 275°C ，脱氢活化能从 114.3 kJ/mol H_2 降低至 59.0 kJ/mol H_2 ，性能提升至与部分纳米氢化物相媲美的水平。为了深入理解这一现象，本研究结合密度泛函理论(DFT)计算，提出了一种潜在的脱氢机理。在表面功能化过程中，生成的

$\text{Mg}(\text{OH})_2$ 能够削弱 Mg-H 键, 并通过静电作用促进脱氢过程。脱氢后, 大颗粒氢化物内部的氢原子通过 Mg_2NiH_x 脱氢过程中产生的微裂缝扩散至表面, 从而促进了块状氢化物的进一步脱氢。本研究不仅为开发低成本、高活性、空气稳定的金属氢化物提供了新的视角, 而且对推动氢能技术的工业化应用具有重要意义。

A01-P15

亲锂性四氧化三钴修饰平面铜箔稳定锂沉积行为的研究

唐宇

青海大学

锂金属电池被认为是下一代高能量密度可充电电池的理想选择, 然而负极侧锂不均匀沉积导致的不可控枝晶生长限制了其进一步应用和发展。在此, 本研究提出了一种能稳定锂沉积行为的集流体修饰方法, 通过简单的涂布方式将亲锂性 Co_3O_4 修饰到铜集流体表面, 以稳定锂沉积/溶解行为, 抑制锂枝晶生长。结果表明, $\text{Co}_3\text{O}_4@\text{Cu}$ (42.9 mV) 的成核过电位明显低于 Cu (220.5 mV) 的成核过电位, 这有利于降低锂离子的成核势垒, 从而诱导锂均匀沉积。因此, 经过 80 次循环后, Cu/Li 半电池库伦效率仅为 86.90%, 并在 120 次循环后失效。相比之下, $\text{Co}_3\text{O}_4@\text{Cu}/\text{Li}$ 在循环 150 圈后库伦效率高达 97.3%; 同时 Cu/Li//Li 对称电池在 1 mA cm^{-2} 下稳定循环 100 h 后电压曲线出现剧烈震荡, 而 $\text{Co}_3\text{O}_4@\text{Cu}/\text{Li}/\text{Li}$ 能稳定循环超过 300 h, 且极化电压仅为 58.4 mV。这种简单的集流体表面修饰策略对锂金属负极的发展提供了一种新颖的设计思路。

A01-P16

PANI/OCNT 锌离子混合超级电容器正极材料性能研究

武海煜

华北理工大学

能源是人类社会正常运行和不断发展不可或缺的重要资源, 传统的化石能源因其不可再生性而日益枯竭, 太阳能、风能、水能等可再生能源逐渐成为人们的研究热点, 但这些可再生能源存在偶然性、不规律性等特点, 故而开发高效、稳定的储能装置具有极其重要的意义。锌离子混合超级电容器 (ZHSC) 是一种新型储能器件, 由电容型正极和电池型负极构成, 它继承了超级电容器功率密度高、电池能量密度高的特点, 在电化学储能领域有着广阔的应用前景。其中, 正极材料是影响 ZHSC 储能性能的关键因素之一。聚苯胺 (PANI) 是一种典型的赝电容材料, 具有优秀的储能性能, 与高导电性和大比表面积的碳纳米管 (CNT) 复合有望进一步提高其储能性能。

本研究采用原位聚合法制备出 PANI、PANI/CNT、PANI/OCNT 三种正极材料, 使用直接涂覆的方式将其分别涂敷在不锈钢网上作为正极, 与锌箔负极、 2 mol/L ZnSO_4 电解液组装 ZHSC, 并进行了电化学性能测试。循环伏安测试结果表明, PANI/OCNT 正极组装的 ZHSC 比电容最大, PANI/CNT 次之, PANI 最小, 并且都具有良好的可逆性。这说明加入 CNT 可以改善 PANI 的导电性, 从而使复合后的 PANI/CNT 正极材料具备更好的储锌性能。对 CNT 进行氧化处理后与 PANI 复合制备出的 PANI/OCNT 正极材料的储锌性能得到进一步提高。一方面, 氧化处理 CNT 可以在管壁上产生含氧官能团以及引入缺陷, 这有利于 CNT 在聚合过程中锚定 PANI, 增强 PANI/CNT 的导电性, 加强 CNT 与 PANI 之间的协同效应; 另一方面, 含氧官能团还可以提供额外的活性位点, 缺陷、多孔结构有利于离子的传递, 使电解液与活性物质充分接触。恒电流充放电测试结果表明, 在电流密度为 $1 \text{ A} \cdot \text{g}^{-1}$ 的条件下, PANI/OCNT 正极组装的 ZHSC 比电容高达 $507.5 \text{ F} \cdot \text{g}^{-1}$, 而 PANI 和 PANI/CNT 分别为 $200.8 \text{ F} \cdot \text{g}^{-1}$ 和 $381.8 \text{ F} \cdot \text{g}^{-1}$ 。并且 PANI/OCNT 正极组装的 ZHSC 在 $10 \text{ A} \cdot \text{g}^{-1}$ 相对于 $1 \text{ A} \cdot \text{g}^{-1}$ 的电流密度下, 倍率性能可达 56.8%。这与循环伏安测试的结果一致, 进一步验证了 PANI/OCNT 正极材料的储锌性能。将材料在 $10 \text{ A} \cdot \text{g}^{-1}$ 的电流密度下进行 500 次循环充放电测试, 结果表明 PANI/OCNT 正极组装的 ZHSC 电容保持率为 64.6%, 可见 PANI/OCNT 材料具有良好的稳定性, 该 ZHSC 在 $800 \text{ W} \cdot \text{kg}^{-1}$ 的功率密度下具有高达 $180.44 \text{ Wh} \cdot \text{kg}^{-1}$ 的能量密度。本研究表明 PANI/OCNT 可作为一种具有广阔应用前景的 ZHSC 正极材料。

A01-P17

超低温锂离子电池电解液体系构建与性能研究

刘昭君

山东大学

目前, 锂离子电池已应用于日常生活的方方面面, 但随着环境的日益变化、科研团队对极地、深海等环境探索, 对锂离子电池提出了更加严苛的适用要求。商业上常用碳酸酯类溶剂作为电解液主溶剂, 但它们熔点普遍较高, 超低温 (-40°C) 环境下粘度增加, 难以实现锂离子的传输, 造成电池低温性能极具恶化。而线性羧酸酯类溶剂熔点低 ($< -80^\circ\text{C}$)、粘度低, 介电常数高且于石墨负极相容性较好, 有望实现超低温锂离子电池的应用。研究通过探索适用于羧酸酯类电解液体系成膜添

添加剂的种类及含量,优化电解液体系对石墨界面的稳定性、降低体系的黏度,提升体系的离子电导率,进而实现电池在低温环境下的工作。实现-20°C环境下,石墨/NCM811扣式全电池,0.2C下充放电,室温容量保有率64.72%。通过优化电解液体系中硝酸锂比例,提升了固态电解质界面的均匀稳定性。实现-20°C环境下,0.2C下循环100圈后容量保有率为83.95%。-40°C,0.1C下充放电,室温容量保有率提升至为69.55%

A01-P18

LaNi₅和V共掺杂激活久置的TiMn基AB₂型储氢合金

何礼青

合肥通用机械研究院有限公司

TiMn基AB₂型储氢合金具有低成本、相对合适的平台压力和高储氢容量,是储氢材料领域最有前途的实际应用候选者之一。然而,TiMn基合金放置过程中会逐渐失去活性,特别是在长时间暴露于空气的过程中,这对活化提出了挑战,并大大增加了大规模应用的操作成本。LaNi₅合金表现出优异的初始活化性能,是增强TiMn基AB₂型合金初始反应动力学的理想添加剂[1]。然而,引入LaNi₅会降低母合金的储氢能力。钒(V)具有相对较高的储氢容量(3.8wt%),其添加可以提高母合金的储氢容量[2]。在本研究中,我们采用了共掺杂策略,使用5wt.%的LaNi₅和5wt.%的V共掺杂来激活失活的TiMn基AB₂型合金(在空气中放置1年)。这种方法不仅提高了TiMn基母合金的初始反应活性,而且恢复了其高容量性能。在303K和6MPa H₂压力下,共掺杂合金(90wt.% TiMn基合金-5wt.% LaNi₅-5wt.% V)表现出显著提升的初始氢吸收效率,在6分钟内实现1.61wt.%的吸氢量。最大吸氢量在90分钟内达到2.00wt.%。在5次和20次循环后,其分别保持1.55和1.45wt.%的可逆吸放氢容量[3]。通过XRD和SEM分析证明,卓越的储氢性能来源于多相合金的形成。共掺杂合金的反应焓(ΔH)为34.1kJ/(mol H₂),适合在室温下服役[3]。本工作为长期放置的失活储氢合金的活化和提高储氢性能提供了一种有效的策略,避免了储氢合金因在空气中失活而造成的原材料浪费。研究成果对固态储氢合金大规模应用中已失活合金的再生和成本控制具有一定的指导意义。

A01-P19

模拟构建高效质子传导能力的Nafion与SPEEK复合膜

杨帅

中国工程物理研究院

质子交换膜电解水制氢技术是制氢规模化的重要途径之一,具有电流密度大、产氢纯度高、响应速度快等优点。质子交换膜起到的主要作用是提供质子交换的通道,同时隔绝阳极与阴极产生的氢气和氧气。为获得膜电解中拥有高效质子传导能力的复合膜,本研究通过分子动力学软件对全氟磺酸膜(Nafion115)、磺化的聚醚醚酮膜(SPEEK)及两者复合膜在车载机制下的质子传导能力进行了模拟计算。在最佳含水量工况下,Nafion115、SPEEK及二者复合膜质子传导能力随着温度的升高而逐渐增强。复合膜中两者的配比对质子传导能力有较大的影响,当Nafion115与SPEEK摩尔比为3时,50°C下复合膜的质子扩散系数提升了47.6%。本研究为制备优异质子传导能力的Nafion115与SPEEK复合膜提供了理论支撑。

A01-P20

Study on the preparation of electrode based on carbonized derivatives of silk and its energy storage

刘宇

南昌工程学院

Contemporary supercapacitors still face some challenges, such as low energy density and relatively high cost. Biomass-derived carbon-based materials are promising candidates to address these challenges. Herein, using a chemical activation method, the silk soaked in saturated potassium chloride solution for 12 h was dried and placed in a nitrogen atmosphere containing a small amount of reducing gas (5% H₂) and carbonized at 600 °C, 700 °C to prepare the electrode of supercapacitor. XRD and SEM were used to characterize the microstructure of the synthesized samples, and their electrochemical energy storage performance as electrode materials was studied. Such uniquely porous structure effectively improves the wettability and charge transport, thus raising the electrochemical performance when used as the electrode in supercapacitors. The results show that the specific capacity of the 700 °C electrode reaches 205.4 F g⁻¹ at a current density of 0.1 A g⁻¹. It is expected to provide new ideas for the development of biomass mild activation and energy storage applications.

A01-P21

Powder-to-Power 微尺度模拟的功能梯度电极固体氧化物燃料电池微结构设计

周英豪

哈尔滨工业大学（深圳）理学院

固体氧化物燃料电池（SOFC）是一种极具应用前景的清洁高效能源转换装置。众所周知，SOFC 的电化学性能与电极的微观结构参数，例如 TPB 密度、比表面积、曲折因子等紧密相关。大量研究表明，通过功能梯度电极设计改变电极的微观结构可以提高 SOFC 的电化学性能和改善界面热应力集中提高电池的力学可靠性。以往的研究大多数采用宏观数值模型来优化功能梯度电极。这种方法往往采用经验公式将孔隙率和颗粒尺寸等微观结构作为输入参数来近似计算电化学性能，并不能反映真实梯度电极微观结构的电化学性能。因此，基于微观尺度解析的 SOFC 多物理场耦合仿真计算能更为准确反应梯度电极微结构和宏观性能的依赖关系。本研究采用基于颗粒尺度的离散元（DEM）模型和动力学蒙特卡洛（KMC）烧结模型，在微观尺度上模拟了通过烧结工艺制备具有真实微观结构的 SOFC 功能梯度电极。基于功能梯度电极真实微观结构代表体积元（RVE），利用计算流体力学开源软件 OpenFOAM 计算了不同功能梯度电极的电化学性能，例如输出电压、电流密度、过电势等。所提出面向 SOFC 的从粉体到电力（Powder-to-Power）的模拟框架为功能梯度 SOFC 微观结构优化设计提供了技术支持。

A01-P22**Activating the H2-H3 Phase Transition of Ni-rich Cathode in Sulfide-based All-solid-state Batteries**

高晨曦

哈尔滨工业大学（深圳）

Nickel-rich layered oxide cathodes are considered promising candidates for constructing high-energy-density all-solid-state lithium batteries (ASSLBs) with high reversible capacity and high working potential. However, the inconsistent Li-ion migration kinetics between cathode and solid-state electrolytes (SSEs) causes the restricted H2-H3 phase transition of the Ni-rich cathode in ASSLBs, which constrains the capacity release. In this work, we propose Li_4SiO_4 fast ionic conductor to regulate the interfacial behaviors between Ni-rich NCM cathode and sulfide solid electrolytes. With Li_4SiO_4 as the interfacial stabilizer and promoter. The modified cell can achieve a high capacity retention ratio of ~85.8% after 500 cycles at 1.0C and a specific capacity of 72.1 mAh g^{-1} after 1000 cycles at 2.0C, which is ~200% higher than pristine NCM811 and function well at a high rate of 5.0C. The underlying mechanisms are well investigated through kinetic analyses and further revealed by theoretical simulations. This work provides a comprehensive understanding of the interfacial failure mechanisms in ASSLBs from the perspective of kinetic limitations and suggests potential avenues for future research in this field.

A01-P23**高性能钠电负极用孢子衍生碳的可控界面调控**

汪一鸣

广西大学

钠离子电池由于储量丰富，并与锂离子电池技术兼容，有望成为下一代电化学储能技术。碳基材料作为储钠的主要电极材料之一，因其来源广泛，成本低廉而广泛受到关注，然而石墨负极储钠困难以及软碳负极容量不足导致使用受限^[1]。硬碳负极因其储钠位置多样和高理论容量（ $350\text{-}400 \text{ mAh/g}$ ）^[2]而被认为是最有前途的储钠阳极候选材料，然而仍然受到首次库仑效率低、倍率能力差和循环稳定性差的限制。众所周知，电极材料表面界面电化学反应的主要场所，因此对电极材料表面官能团以及掺杂原子进行合理调控，可以增加表面缺陷，增强表面对电解液的浸润性，有助于提高硬碳材料的首次库仑效率和容量，从而提高硬碳的储钠能力^[3,4]。

在这里，我们提出了一种利用成本低廉的天然孢子进行不同功能化，制备具有不同掺杂硬碳的新策略。这种硬碳是通过水热反应预先处理产生具有多孔结构的球状结构，之后在氩气氛围中碳化，最后分别使用浓硝酸、浓硫酸、浓磷酸、浓盐酸对其表面进行功能化处理。得这种策略所得到的硬碳材料表面富含多孔结构，BET 可达 $30\text{-}50 \text{ m}^2/\text{g}$ 左右，结果也证明其多孔的表面结构。同时 XPS 分析表明经过不同酸处理的材料含有大量的掺杂元素，且多以含氧官能团的形式存在，使得对电解液有着优异的润湿性能。且由于掺杂元素的存在，硬碳材料具有丰富的活性位点、较大的层间距以及不均匀的电子分布或电荷分布或极化，从而提高了电极材料的电子传导性，进而提高钠离子的储存能力。这种功能化硬碳可有效提高硬碳材料的首次库仑效率和容量，从而改善钠离子电池在进一步实际应用中的前景

A01-P24

Cost-effective and renewable paper derived hard carbon microfibers superior anode for sodium-ion batteries

裴林媛

天津大学

Sodium-ion batteries (SIBs) have attracted intense scientific attention as the most promising next generation energy storage device. However, the large-scale practical application of SIBs has been limited by exploring a low-cost and high-performance anode material. Herein, hard carbon microfibers are successfully synthesized from renewable paper via simply carbonization procedure and proposed as anode materials for SIBs. The optimized carbonization at 1400 °C endows hard carbon microfibers high reversible charge capacity of 319.6 mAh g⁻¹, good rate capability as well as excellent cycle life with capacity retention of 99.3% after 100 cycles. The sodium storage mechanism is further investigated by virtue of various technologies, indicating that sodium ions are stored in inter- and intra-layers. Remarkably, a full cell with the as-prepared anode and a Na₃V₂(PO₄)₃ cathode shows a favorable capacity of 243.8 mAh g⁻¹ and stable cyclability of 218.9 mAh g⁻¹ after 100 cycles. This study provides an opportunity for a cost-effective and renewable anode material for SIBs.

A01-P25**原位聚合阻燃交联固态电解质助力高电压锂金属电池**

李继潇

电子科技大学

通过原位聚合构建聚二氧戊环 (PDOL) 基固态电解质是实现高性能锂金属电池的有效策略。然而, 传统线性 PDOL 较差的电化学稳定性和安全性问题限制了其进一步应用。本研究引入了多功能交联剂——异氰尿酸三缩水甘油酯来构建阻燃交联 PDOL 基固态电解质 (FCDOL)。由于交联网络的协同效应, 所制备的 FCDOL 实现了优异的室温离子电导率 (0.72 mS cm⁻¹)、高 Li⁺ 迁移数 (0.655)、宽电化学稳定窗口 (4.8 V vs. Li/Li⁺) 以及超过 4000h 的锂电镀/剥离稳定性。在与高电压阴极相匹配时也表现出良好的循环稳定性, 相应的软包电池可经受弯曲、针刺等恶劣测试, 为实现高能量密度和高安全性固态锂电池提供了新的思路。

A01-P26**高熵尖晶石氧化物(Ni_{0.2}Mn_{0.2}Mg_{0.2}Zn_{0.2}Cu_{0.2})Co₂O₄ 纳米粒子作为锂电池负极材料的电化学性能**

李春月

电子科技大学

High-entropy oxides (HEOs) have attracted much attention from researchers due to their diversity and tunability in composition and structure, and the synergistic effect of various elements has led to their great potential in the field of energy storage. However, conventional synthesis and screening processes require long time. In this work, a rational screening strategy for high-entropy elements was adopted, while (Ni_{0.2}Mn_{0.2}Mg_{0.2}Zn_{0.2}Cu_{0.2})Co₂O₄ high-entropy oxide anode material (HEO-N) with the six-elements single-phase spinel structure was synthesized by hydrothermal method at low temperature of 400 °C. The XRD diffraction results showed that all its diffraction peaks corresponded to the standard card PDF#87-0028, and there are no other impurity peaks. The SEM results show that the average particle size ranges from 300-500 nm, and the elemental distribution is uniform without segregation. The multi-element atomic doping induces the high-entropy lattice distortion effect, which promotes the increase of the concentration of point defects (especially oxygen vacancies) and other defects (dislocations) in the spinel phase and improves the intrinsic electrical conductivity of HEO-N. In addition, this HEO-N anode exhibits excellent capacity and stability performance, with the first discharge specific capacity of 999.2 mAh/g and first Coulombic efficiency of 73.9%. It demonstrates battery capacity retention of 83.5% after 200 cycles at 0.5 A/g and a stable cycle performance of 834.8 mAh/g.

A01-P27**高性能苯胺-吡咯共聚物水凝胶电极构筑及储能机理研究**

刘聪

中国矿业大学

导电聚合物水凝胶因其优异的柔性和结构可设计性受到广泛关注, 随着电化学储能技术的快速发展, 提升电极材料的储能能力是导电聚合物水凝胶电极亟待解决的问题。通过引入氧化还原助剂来增强导电聚合物水凝胶电极的电化学性能是一种有效的策略。本文采用氢醌 (HQ) 和蒽醌 (AQ) 有机双氧化还原助剂, 提升苯胺-吡咯共聚物水凝胶电极电化学性能。二乙烯

三胺五甲叉磷酸 (DTPMP) 作为掺杂酸和交联剂, 成功制备了 PVA/Poly(An-Py)/DTPMP/HQ/AQS (PPDHA) 水凝胶。氢醌和蒽醌作为双氧化还原助剂, 在电极体系中同步参与氧化还原转变, 这种转变过程为电极引入了额外的氧化还原体系, 从而显著提升了电极的整体性能。结果表明, 所制备的 PPDHA 凝胶电极在 0.5 A/g 电流密度下具有 533 F/g 的质量比电容, 经过 300 次弯折后仍保持 97 % 的比电容, 并且在经过 10000 次充放电循环后, 电容保持率仍达到 83.4 %。基于 PPDHA 水凝胶电极组装全水凝胶态柔性超级电容器, 该电容器在 125 W/kg 功率密度下展现出 13.4 Wh/kg 的能量密度, 并且经过 10000 次循环后仍保持 76.4 % 的比电容。本研究的结果为开发高性能柔性超级电容器提供了新思路, 并在储能技术与柔性传感器领域具有潜在的应用前景。

A01-P28

废旧锂离子电池石墨负极的资源化再生与高值化应用研究进展

李雪倩

北京理工大学

随着新能源汽车产业需求量与产量的不断攀升, 锂离子电池的需求也与日俱增, 随之而来的问题是如何将大量退役锂离子电池进行清洁处理以及高效利用。石墨因其可逆容量高、循环稳定性好等优点, 被广泛地应用于锂离子电池负极材料。因此, 石墨负极材料的回收再生以及高值化应用需引起高度重视。此外, 随着锂离子电池的进一步发展, 其对于负极材料在低温以及快充场景下的稳定性也有了更高要求。基于此, 本文综合归纳了石墨负极的失效机制, 重点分析快充以及低温条件下石墨材料失效加剧原因, 并针对废旧锂离子电池石墨负极回收处理技术以及再生石墨作为锂离子电池负极优化改性方法进行梳理总结, 最后对于石墨负极未来资源化再生以及高值化应用的技术挑战以及发展趋势进行展望, 突出了石墨负极在使用过程中全生命周期绿色高值化利用的重要性, 为锂离子电池产业的资源化利用以及可持续发展提供理论指导。

A01-P29

原子分散单金属位催化剂的耐氨性: 机理解和高性能氧还原电催化

武子瑞

江苏大学

阴离子交换膜直接氨燃料电池 (DAFC) 作为一种无碳燃料电池类型, 尽管使用铂族金属 (PGM) 氧还原反应 (ORR) 催化剂的成本很高, 但近年来受到了越来越多的关注。为了为开发这种有前景的电源铺平道路, 具有低成本和高 ORR 性能的原子分散过渡金属氮碳 (M-N-C) 材料吸引了我们研究其在 ORR 过程中的耐氨性。在此, 我们最初对 FeN₄ 位点的组成和结构元素如何调节催化剂的性能进行了深入研究。此外, 研究了 M-N-C (M=Fe、Co 和 Mn) 和 Pt/C 催化剂在含氨电解质中的 ORR 催化活性, 表明 M-N-C 比 Pt/C 具有更好的耐氨性。密度泛函理论 (DFT) 计算进一步证实了 MN₄ 位点对 Pt (111) 表面优异的氨耐受性。MN₄ 对 O₂ 的吸附能力高于 NH₃, 并且 MN₄ 与 O₂ 之间的结合力强于 NH₃, 而在 Pt (111) 表面上观察到相反的吸附能力和结合力趋势。

A01-P30

Screening Ir-free trimetallic alloys with consideration of metal electronegativity and oxophilicity towards ammonia electrooxidation

张正威

江苏大学

Ir-contained alloys represent the state-of-the-art ammonia oxidation reaction (AOR) electrocatalysts for direct ammonia fuel cells (DAFCs), but are greatly impeded by their high cost. Here, we rationally design and synthesize the Ir-free trimetallic alloys with the consideration of metal electronegativity and oxophilicity that govern the reactivity of alloy surface. By introducing metal (i.e., Pd) with electronegativity like Ir and oxophilic metals (i.e., Mn, Fe, Co, or Ni) into Pt, we have screened a high-performance Ir-free trimetallic electrocatalyst system. Among others, an optimal AOR electrocatalyst was experimentally selected as the Pt₃PdNi, showing incredible higher peak current density than Pt and Pt₃Pd, as well as the Pt₃IrNi and Pt₃RuNi controls. Meanwhile, carbon supports take a critical role in dispersing the alloy nanoparticles, and finally affecting their AOR activity. Moreover, the hydrazine electrooxidation experiments indicate that the sluggish steps during AOR is likely the NH₃ dehydrogenation to *NH₂ and its further N-N dimerization.

A01-P31

High-Throughput Screening of Monoatomic Electrocatalyst for Nitrogen Oxidation of M-Nx-C Transition Metal to Nitric Acid

智闯

江苏大学

Electrocatalytic nitrogen oxidation reaction (eNOR) has emerged as a sustainable strategy for nitrogen fixation. Metal-nitrogen-carbon (M-N-C) single-atom catalysts (SACs) show great potential in electrochemical eNOR. However, it remains a significant challenge to develop advanced SACs that simultaneously exhibit high catalytic activity and high product selectivity. In this study, density functional theory (DFT) calculations combined with machine learning (ML) are used for rapid and high-throughput screening of high-performance nitrogen oxidation catalysts. Effective single-atom catalysts are ultimately selected based on multiple effective indicators, including catalyst stability, hydrogen evolution reaction suppression ability, and reaction barriers. Among them, Fe-N₄, Cr-N₄, Cd-N₄, and Ir-N₄ exhibit the best catalytic activity and can be considered potential catalysts for eNOR. This method effectively aids in the exploration of eNOR catalysts, thereby reducing experimental costs.

A01-P32

具有丰富 Ni-CeO₂ 界面的 Ni 基催化剂高效的光热催化 CO₂ 还原

孟繁石

山东科技大学

利用 CH₄ (CRM)减少 CO₂ 不仅可以消除两种温室气体, 还可以产生合成气体作为燃料或合成其他化工产品的原料。然而, 传统催化的高能耗和低收率以及 Ni 基催化剂表面积碳导致的失活等问题制约了其发展。本文报道了一种新型的 Ni-CeO₂/Al₂O₃ 催化剂, 仅在聚焦光照射下用于光热催化 CRM。H₂ 和 CO 的产率分别为 84.85 和 89.15 mmol min⁻¹ g⁻¹, 且具有良好的催化耐久性。紫外-可见-红外漫反射光谱和实验测试结果表明, H₂ 和 CO 的高产源于高效的光热转化和光的分子活化作用。更重要的是, Ni - ceo₂ /Al₂O₃ 比 Ni/Al₂O₃ 具有更好的抗碳沉积性能。结构表征和实验证据表明, CeO₂ 纳米颗粒上生成的氧空位能够吸附和激活 CO₂, 生成吸附氧。吸附的氧通过富集的 Ni - ceo₂ 界面转移到 Ni 纳米颗粒表面, 加速了碳的氧化。

A01-P33

非化学计量比 Bi₂S_{3-x} 超级电容器电极材料的制备与性能探究

陈文婷

昆明理工大学材料科学与工程学院

Bi₂S₃ 作为金属硫化物, 展现出较高的电化学活性, 同时 Bi₂S₃ 作为铋系金属材料, 拥有良好的催化性能和介电性能, 因此 Bi₂S₃ 在太阳能电池、锂离子电池、超导体、光催化、荧光材料及超级电容器等领域拥有巨大的潜力。然而, 硫化铋的电化学储能性能受到其低电导率和活性位点有限的限制。本工作探讨了, 水热反应时 S 含量对于 Bi₂S_{3-x} 电极性能的影响。通过控制水热过程中 Bi、S 前驱体中的 Bi、S 摩尔比制得了所需的 Bi₂S_{3-x}(x=0、0.1、0.2、1、-0.1、-0.3)的样品, 除 x=1 的样品因 Bi 析出而产生 Bi 的杂峰, 其余样品皆与 Bi₂S₃ 的 PDF 卡片相对应, 为所需样品, 且 x=-0.1、-0.3 的样品, 出现了往高角度的偏移, 所以样品皆表现出了一定程度的取向性生长, 其中 X=0 的样品结晶性最好。通过 CV 测试发现, 这组样品具有 0~0.8V 的宽电位窗口, X=0 的样品具有最大了峰值电位, 这说明其拥有最优的电荷吸附力, 同等情况下其可以存储更多的电荷, 这是因为其拥有最好的结晶性与粒径这使得其与电解液的接触面积最大, 因此其可提供的化学活性位点最多。X=0 的样品在 10A/g 的高电流密度下拥有 53.02F/g 的理论比容量, 高于同种情况下, 其他工作制备得到的 Bi₂S₃ 超级电容器电极的理论比容量。本工作分析了赝电容 Bi₂S₃ 的非化学计量比和 S 缺位对于其电化学性能的影响, 对于硫基电容器的制备与研究具有参考意义。

A01-P34

High-content N/P co-doped corn starch-based hard carbon for sodium-ion battery anode applications

韩迪

陕西科技大学

Starch, as one of the most abundant renewable biomass materials, exhibits a natural spherical shape that makes it a competitive precursor for the preparation of hard carbon sodium-ion battery anodes with high quality. Here, starch is used as carbon source, ammonium polyphosphate (APP) is used as crosslinker and dopant, and high nitrogen and phosphorus co-doped hard carbon negative

electrode is prepared by one-step hydrothermal method. The effective doping of nitrogen and phosphorus elements leads to the introduction of graphite defects, increases the graphite layer spacing, thereby improving the adsorption capacity of carbon materials to sodium ions, and reduces the diffusion barrier of sodium ions.

A01-P35

花球状 CoS₂/SnS₂ 纳米复合材料的制备及其电容性能研究

陈路宁

武汉科技大学

相对于过渡金属氧化物,过渡金属硫化物材料具有理论比电容较高、微观结构可设计等特点,在超级电容器用赝电容电极材料中具有竞争优势。其中,二维层状过渡金属硫化物 SnS₂ 因具有易于合成、无毒、较高理论比电容、较快载流子迁移率和快速氧化还原反应能力等特性使其在电化学储能领域中备受关注,但由于导电性较差、易于堆叠、电化学过程中体积易波动等缺点导致其应用于超级电容器中时存在比电容较低、循环稳定性差等问题。通过异质界面设计将其与导电性较好的异质材料复合是解决这些问题的有效方法。在本研究中,以 ZIF-67 为前驱体,通过溶剂热成功合成了花球状 Co₃S₄/SnS₂ 纳米复合材料。与 SnS₂ 的比电容相比,Co₃S₄/SnS₂ 纳米复合材料的比电容提高了 2.8 倍,在 2 A·g⁻¹ 的电流密度下,该复合电极经 10000 次循环测试后仍具有 80.2% 的容量保持率。电化学性能的改善得益于所制备的异质 3D 多孔 Co₃S₄/SnS₂ 纳米复合材料不仅通过多样的孔道加速了离子的传输,而且尺寸的减小便于暴露更多的电化学活性位点,同时外围导电性较好的 Co₃S₄ 既能改善 SnS₂ 的导电性,又能缓冲 SnS₂ 充放电过程中的体积变化,避免了充放电循环过程结构中的坍塌,因而,提高了材料的电化学反应动力学和循环稳定性。这一结果为超级电容器用异质复合材料电极的合理构筑提供了可借鉴的方法。

A01-P36

聚酰亚胺多孔隔膜孔结构对质子传导效率的影响

赵宸瑄

西安交通大学

多孔隔膜是以质子和离子为传递介质的储能器件的关键组件,直接影响器件的储能容量、响应速率和循环稳定性等。目前使用较多的聚烯烃隔膜存在质子传导率低和高温性能差的缺点。本工作利用相转化原理,制备了具有不同孔结构的多孔聚酰亚胺隔膜材料,该材料的质子扩散效率较聚烯烃体系有显著提升 300 倍,这源于相转化聚酰亚胺薄膜高的通孔率和更佳的酸性电解液浸润性。由该材料组装的电容器比容量是具有相同电极体系聚烯烃隔膜电容器的 467%,且表现出更加优异的热稳定性(430°C),对多孔隔膜和高容量储能器件的发展具有重要意义。

A01-P37

铁酸镧基 SOFC 氧电极材料的硫中毒机制研究

王芳芳

南京理工大学

SOFC 氧电极材料杂质中毒问题主要是由于氧电极材料与杂质(SO₂ 和含 Cr 蒸汽)反应生成绝缘杂质化合物,导致电极材料性能衰减所致。尽管诸多研究分析了氧电极材料杂质中毒的化学反应类型、过程及其对性能的影响。然而,导致杂质中毒反应位点、杂质化合物浓度、分布等关键因素的变化规律及其产生机制依旧不明。

本文基于 SOFC 的运行模式,通过调制空气极 SO₂ 掺杂气氛浓度,对比研究铁酸镧基氧电极材料及单电池结构的杂质中毒机制,同时,通过分析不同条件下,电化学反应,电流方向,以及氧空位浓度等变量对杂质中毒发生位点及生成杂质化合物分布的影响规律,来揭示电化学反应,氧空位浓度,极化电流等因素对氧电极杂质中毒反应位点和杂质化合物分布的影响规律,阐明 SOFC 氧电极材料杂质中毒机制,为解决其氧电极中毒问题供理论依据。

A01-P38

Size-induced d band center upshift of copper for efficient nitrate reduction to ammonia

张锦程

山东科技大学

Electrocatalytic nitrate reduction (NO₃RR) technique has emerged as a hotspot in NH₃ production, for its practicability, and a series of advanced electrocatalysts with high activity and robust stability needed to be constructed in today's era. In this work, size-tunable Cu nanoparticles on porous nitrogen-doped hexagonal carbon nanorods (Cu@NHC) were reasonably designed and

served for catalyzing NO_3RR in neutral media. Especially, $\text{Cu}_{30\%}\text{@NHC}$ demonstrated a remarkable electroactivity for NH_3 production as it showed a suitable grain size with massive catalytic centers and favorable d band structure with faster $^*\text{NO}_3^-$ -to- $^*\text{NO}_2^-$ catalytic dynamics. As expected, $\text{Cu}_{30\%}\text{@NHC}$ ($3628.28 \mu\text{g h}^{-1} \text{mg}_{\text{cat}}^{-1}$) had a much higher NH_3 yield than those for $\text{Cu}_{20\%}\text{@NHC}$ ($1268.42 \mu\text{g h}^{-1} \text{mg}_{\text{cat}}^{-1}$) and $\text{Cu}_{40\%}\text{@NHC}$ ($725.03 \mu\text{g h}^{-1} \text{mg}_{\text{cat}}^{-1}$). And those collected NH_3 products indeed derived from NO_3RR process revealed by ^{15}N isotope-labeling and systemic control tests. Moreover, $\text{Cu}_{30\%}\text{@NHC}$ was also durable for NO_3RR bulk electrolysis with minor loss in activity. This work offered an effective modifying tactics to boost NO_3RR catalysis and could guide the design of other advanced electrocatalysts via size-induced surface engineering.

A01-P39

Sm 掺杂 BaPrO3 基质子陶瓷燃料电池阴极材料的性能研究

刘亚萍、贾礼超*、李箭

华中科技大学材料科学与工程学院

质子陶瓷燃料电池 (PCFC) 是一种中低温 (500-700 °C) 下高效的能量转换装置, 在氢能领域发挥了至关重要的作用。PCFC 性能限制主要在于研发出氧还原反应 (ORR) 催化活性高、与电解质化学和热学相容的质子导体催化剂。BaPrO₃ (BPO) 基钙钛矿氧化物具有简单的单钙钛矿结构, 易于合成, 成分简单且不含贵金属。此外, BaPrO₃ 具有和目前研究最多的 BaZr_{1-x-y}Ce_xY_yO₃ (BZCY) 体系电解质相接近的热膨胀系数和良好的化学相容性。但 BaPrO₃ 基钙钛矿氧化物阴极应用于 PCFC 阴极时表现出一般的催化活性, 本研究采用 B 位 Sm 掺杂策略, 提高了 BPO 作为质子陶瓷燃料电池阴极的性能。经过优化, 当 Sm 掺杂量为 0.10 时, BaPr_{0.9}Sm_{0.1}O_{3-δ} (BPSm10) 作为阴极组成的电池在 700°C 下可以达到 1240 mW/cm² 的高性能输出, 相较 BPO (716 mW/cm²) 而言有了大幅提升, 其在该温度下的极化电阻仅为 0.06 Ω·cm²。结果表明, Sm 掺杂使材料中的氧空位增加, 提高了材料电导率, 促进了阴极的电荷转移过程, 在提高材料的 ORR 催化活性的同时具有和 BZCY 相近的热膨胀系数和良好的化学相容性, BPSm10 作为 PCFC 的空气电极具有巨大的潜在应用价值

A01-P40

阴极支撑型 SOEC 的结构调控及稳定性研究

周露、贾礼超*、李箭

华中科技大学

固体氧化物电解池 (solid oxide electrolysis cell, SOEC) 由于具备能量转化效率高、可逆操作能力以及绿色环保等优点, 受到广泛关注。对于阴极支撑型电池, 支撑体的微观结构对其长期稳定运行有着很大影响。通过优化阴极支撑体的微观结构, 并引入各类造孔剂构造出均匀的三维连续通道促进反应气体扩散和电子离子传导, 从而降低气体扩散等阻碍, 是一种稳定电池性能的有效方法。本研究通过调控阴极支撑体的结构, 选择不同粒径的 NiO 和 YSZ 粉体, 以淀粉或 PMMA 作造孔剂, 构建了 Ni-YSZ/YSZ/GDC/LSCF-GDC 阴极支撑型电池。以粒径较小的 NiO 和 YSZ 粉体作原料、PMMA 作造孔剂制备的支撑体的单电池在 800 °C 的功率密度为 2.11 W cm²; 在 800 °C、50% H₂-50% H₂O、1.3 V 条件下, 电解电流密度为 2.22 A cm²; 且在恒电流测试中, 由于 Ni 晶体颗粒在初始活化阶段首先经历的快速团聚过程所带来的电池性能快速衰减现象 (25 h 内) 从 4.12 mV/h 降低至 0.29 mV/h, 随后在 160 h 的稳定性测试中电池衰减率为 0.43 mV/h。研究结果为进一步优化 Ni-YSZ 燃料电极电解池的性能和稳定性提供了参考。