

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

A08-新能源材料加速研发
A08-Accelerated Energy Materials
Discovery

Organized by

Chinese Materials Research Society

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

A08. 新能源材料加速研发

分会主席：万佳雨、张桥保、周光敏、曾 林、杨金龙、陈亚楠

A08-01**面向“碳基燃料清洁转化利用”的电催化材料**

骆静利*

深圳大学

骆静利，深圳大学材料学院特聘教授，加拿大国家工程院院士，中国腐蚀与防护学会外籍会士。曾任加拿大阿尔伯塔大学化学与材料工程系教授及加拿大替代燃料电池首席科学家。现任 *Electrochemical Energy Reviews* (Springer Nature), *Corrosion Science* 及 *Corrosion Communications* 编委，国际腐蚀理事会理事等职。长期从事的研究领域涵盖固体氧化物燃料电池 (SOFC) / 电解池 (SOEC)、碳基等能源分子转化电催化材料、储能材料， 腐蚀与防护等。入选 2022, 2023 全球前 2% 顶尖科学家终身科学影响力榜单, 并入围爱思唯尔 2023 年度“中国高被引学者”榜单。本次汇报课题组在碳基燃料清洁转化利用的电催化材料方面的研究。

H₂ 被认为是一种很有前景的可再生绿色能源，在解决全球能源危机中发挥着重要作用。电催化水分解是制备纯 H₂ 的理想方法之一。传统的水电解在阴极发生析氢反应 (HER)，阳极发生析氧反应 (OER)。然而由于阳极 OER 的动力学较为缓慢，导致整体需要相当大的过电位电解。水电解的主要能量都损失在了 OER，而 OER 的产物是 O₂ 利用价值较低，这使得反应意义的价值不大。同时产生的 H₂ 和 O₂ 又很容易引起爆炸。为了避免 OER 过高且不必要的过电位，选用更容易氧化的分子在阳极发生电化学氧化反应以取代 OER，从而实现节能产 H₂。我们开发了一系列新型电催化材料用于有机分子-水共电解，高效高选择性部分氧化甲醇、糠醛等有机分子制得增值化学品并与电解水阴极还原反应耦合可以无 CO₂ 析出地极低能耗或无能耗联产纯氢气。

A08-02**缺陷水滑石基纳米光催化材料**

张铁锐*

中国科学院理化技术研究所

光催化作为一种低能耗、高效、无二次污染的技术而备受关注。绿色光催化技术实用化的关键之一是发展低成本、高效的光催化材料。水滑石基纳米材料因组成结构易于调控、制备简便等优点而备受关注。近年，我们课题组通过在水滑石表面创造缺陷位和构造界面结构的手段，分别实现了对反应物 CO₂、N₂ 等吸附和活化的增强，以及中间反应物种反应路径的调控，进而提升了光催化 CO₂ 和 N₂ 加氢反应的催化活性和生成高附加值产物的选择性。^[1-10]

参考文献：

- [1] Zhang T, et al. *Nat. Commun.* 2023, 14, 1909.
- [2] Zhang T, et al. *Adv. Mater.*, 2022, 34, 2207793.
- [3] Zhang T, et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2022, 61, e202211469.
- [4] Zhang T, et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2021, 60, 21896.
- [5] Zhang T, et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2021, 60, 2554.
- [6] Zhang T, et al. *Adv. Energy Mater.* 2020, 10, 2002199.
- [7] Zhang T, et al. *Chem. Soc. Rev.* 2019, 48, 1375.
- [8] Zhang T, et al. *Adv. Mater.* 2019, 31, 1806482.
- [9] Zhang T, et al. *Adv. Mater.* 2018, 30, 1704663.
- [10] Zhang T, et al. *Adv. Mater.* 2018, 30, 1803127.

A08-03

高温质子交换膜燃料电池关键材料的制备与性能研究

王雷*

深圳大学

王雷，1977 年 11 月生，深圳大学材料学院教授，博导，深圳市杰青，荔园学者，材料学院执行院长，九三学社省委委员、市委委员，广东省政协常委，南山区人大代表。中国仪表功能材料学会储能与动力电池及其材料专业委员会副主任委员，中国膜工业协会电驱动膜专业委员会委员，中国石油和化学工业联合会特种尼龙工程塑料产业技术创新战略联盟专家委员会委员，广东省材料研究学会第四届理事会常务理事。2006 年进入深圳大学，2011 年被评为教授，主要从事燃料电池质子交换膜和高分子热电材料方面的研究。主持国家项目 5 项，省基金 2 项，市基金 9 项，在 *Advanced Materials*, *Advanced Energy Materials*, *Angew Chem Int*, *Advanced Functional Materials*, *Small* 等期刊发表论文 320 余篇，引用 12000 余次，H 因子 56，申请专利 20 余项，入选全球前 2% 科学家名单。本次汇报课题组近年来在高温质子交换膜燃料电池关键材料方面的研究进展。

A08-04

激光制备与激光催化

周伟家*

济南大学

围绕电化学绿色合成开展应用基础研究，通过激光调控催化剂界面结构，构筑串联催化活性位点，实现含氢化学品的高效可控合成。取得研究成果如下：1) 利用激光光热与刻蚀效应，构筑了集流、气体扩散和电催化多功能一体化的电极，发现了界面异质结构与催化活性的构效关系，实现了碱性和酸性电解槽的高效全解水性能；2) 扩展研究了电催化质子参与的硝酸根加氢反应，开发了激光金属转印的方法，构建了大尺寸的合金电极，发现了硝酸根活化和加氢串联位点的催化反应机制，实现了含氮物种还原高效合成氨性能；3) 进一步利用激光构筑多孔气体扩散电极，探讨了孔道周围电场和气体压力场对气液固界面反应的调控促进机制，调控了二氧化碳活化和加氢的两步串联反应，实现了二氧化碳还原加氢合成甲酸；4) 开创了激光催化研究领域，利用激光作为唯一能量源，协同其光热效应、等离子体效应和光诱导光压效应，实现了催化活性的数量级提升，为催化提供了一种新型的反应方式。

A08-05

高能量密度电极材料衰减机理解析研究

何欣*

Sichuan University

富锂材料的高能量密度取决于过渡金属阳离子和氧阴离子的氧化还原反应。尽管材料能够提供较高容量，但随着电化学过程的继续进行，通常会观察到表面重建、裂纹形成和氧气释放。由于动力学和热力学因素的限制，当电流密度在很大范围内变化时氧化还原反应表现出不同的电化学行为，这实际上是由不同的相变过程引起的。为了一致地研究将所有涉及的氧化还原元素（包括 TM 和 O）作为一个整体系统集成到这个复杂结构中的进化机制，我们使用软 X 射线断层扫描解决三个维度的形态学、化学感兴趣区域上的分布和状态映射。通过一组纳米级断层照片的三维重建，确定了材料循环中两种不同速率的演化过程，导致气体释放的氧损失区出现主要发生在低电流密度下，而 TM 阳离子迁移或溶解发生在高电流密度下。这些观察结果表明，在多个反应点都观察到颗粒内的异质性，但反应是在不同的过程中进行的。结合多维诊断工具，包括软 X 射线吸收光谱、硬 X 射线断层扫描、mRIXS，我们可以追踪材料演变路径，并为高能量密度和高功率密度材料的设计提供新的见解。

A08-06

From computational screening to the synthesis of a promising OER catalyst

姚振鹏*

上海交通大学材料科学与工程学院

The search for new materials can be laborious and expensive. Given the challenges that mankind faces today concerning the climate change crisis, the need to accelerate materials discovery for applications like water-splitting could be very relevant for a renewable economy. In this work, we introduce a computational framework to predict the activity of oxygen evolution reaction (OER) catalysts, in order to accelerate the discovery of materials that can facilitate water splitting. We use this framework to screen 6155 ternary-phase spinel oxides and have isolated 33 candidates which are predicted to have potentially high OER activity. We have also trained a machine learning model to predict the binding energies of the *O , *OH and *OOH intermediates calculated within this workflow to gain a deeper understanding of the relationship between electronic structure descriptors and OER activity. We have synthesized all 33 compounds in an autonomous way and characterized them using linear sweep voltammetry to gauge their performance in OER. From these three catalyst materials, we have identified a new material, $Co_{2.5}Ga_{0.5}O_4$, that is competitive with benchmark OER catalysts in the literature with a low overpotential of 220mV at 10mA/cm² and a Tafel slope at 56.0 mV dec⁻¹. Given the vast size of chemical space as well as the success of this technique to date, we believe that further application of this computational framework based on the high-throughput virtual screening of materials can lead to the discovery of additional novel, high-performing OER catalysts.

A08-07

强金属-载体相互作用增强电催化生物质转化

陈光需*、裴安、王鹏、赵云

华南理工大学

当前，生物质衍生的醛和醇的直接催化氧化制备高附加值有机酸面临活性低和选择性不高的难题，阻碍了生物质分子转化的应用。2,5-呋喃二甲酸（FDCA）是一种从生物质加工中得到的高价值化学品，可以作为制造可降解塑料的原料，正被越来越多地使用。传统上，FDCA 是通过生物质衍生的 5-羟甲基糠醛（HMF）的热催化氧化制备，然而这种方法存在 FDCA 选择性差且对环境不友好的问题。最近，室温下以水为氧源的电催化 HMF 氧化反应（HMFOR）已成为制备 FDCA 的一条有前景的新途径。在此，我们展示了一种具有强金属-载体相互作用（SMSI）的催化剂，能够在常温条件下实现 HMF 电氧化生产 FDCA，并提高 FDCA 的选择性和产率。具有强 SMSI 的催化剂催化 HMF 直接氧化为 FDCA，其中决速步骤是 5-羟甲基-2-呋喃甲酸（HMFCFA）中间体的氧化。由于催化剂中强电子相互作用增加了表面的 OH 物种浓度并降低了 HMFCFA 中 C-H 活化能垒，使得该步骤得到了明显的促进。此外，SMSI 阻止金属纳米颗粒在反应过程中的聚集，大大提高了催化剂的稳定性。流动电池反应器在 200 小时连续 HMF 氧化操作中实现了 100% 的 HMF 转化率和超过 90% 的 FDCA 选择性，且电流密度稳定，表明具有良好的实际应用前景。

A08-08

动态过程视角下的新概念电解水电极制备与应用研究

杨诚*

清华大学深圳国际研究生院

电解水制氢在实现全球碳中和的进程中扮演着非常重要的角色。然而，所有跟绿氢生产相关的技术问题本质上都需要实现降本增效，只有有效提升经济价值才能真正推动产业的良性发展。从这一角度出发，理想的电解槽应当具有高的能量转换效率（直流电耗）和装备利用效率（电流密度）。然而，大电流条件

下的极化问题突出,尤其是在大量产生气泡的过程中,电极表面的多物理场环境情况复杂,相关的科学问题尚待解答。报告人从调控电极表面形态和气泡运动规律的角度出发,从自组织理论的角度阐明了非贵金属电极在极高电流密度下(例如 3A cm^{-2})实现极低槽压($<1.9\text{ V}$)和长时间稳定服役(>1000 小时)的技术效果,为该领域的发展提供了新思路。

参考文献:

1. Dynamically adaptive bubbling for upgrading oxygen evolution reaction using lamellar fern-like alloy aerogel self-standing electrodes. Wang, J.; Liang, C.; Ma, X.; Liu, P.; Pan, W.; Zhu, H.; Guo, Z.; Sui, Y.; Liu, H.; Liu, L.; Yang, C. *Advanced Materials*, 2024, 36, 2307925
2. A Highly Compressible, Elastic, and Air-Dryable Metallic Aerogels via Magnetic Field-Assisted Synthesis. Pan, W.; Liang, C.; Sui, Y.; Wang, J.; Liu, P.; Zou, P.; Guo, Z.; Wang, F.; Ren, X.; Yang, C. *Advanced Functional Materials*, 2022, 32, 2204166
3. Proton Selective Adsorption on Pt-Ni Nano-thorn Array Electrodes for Superior Hydrogen Evolution Activity. Nairan, A.; Liang, C.; Chiang, S.; Wu, Y.; Zou, P.; Khan, U.; Liu, W.; Kang, F.; Guo, S.; Wu, J.; Yang, C. *Energy & Environmental Science*, 2021, 14, 1594-1601
4. Tip-Enhanced Electric Field: A New Mechanism Promoting Mass Transfer In Oxygen Evolution Reactions. Liu, P.; Chen, B.; Liang, C.; Yao, W.; Cui, Y.; Hu, S.; Zou, P.; Zhang, H.; Fan, H.; Yang, C. *Advanced Materials* 2021, 33, 2007377
5. Exceptional Performance of Hierarchical Ni-Fe Oxyhydroxide@NiFe Alloy Nanowire Array Electrocatalysts for Large Current Density Water Splitting. Liang, C.; Zou, P.; Nairan, A.; Zhang, Y.; Liu, J.; Liu, K.; Hu, S.; Kang, F.; Fan, H.; Yang, C. *Energy & Environmental Science*, 2020, 13, 86-95
6. NiMo Solid Solution Nanowire Array Electrodes for Highly Efficient Hydrogen Evolution Reaction. Nairan, A.; Zou, P.; Liang, C.; Liu, J.; Wu, D.; Liu, P.; Yang, C. *Advanced Functional Materials*, 2019, 29, 1903747

A08-09

低温锂硫电池中多硫化锂的溶解与解离

孔龙*

西北工业大学

低温锂硫电池的高效运行依赖于多硫化物的溶剂化结构,电解液深度参与锂硫电池的溶解-扩散-沉积过程,因此理解电解液的化学/电化学性质对多硫化物的解离行为,是实现低温锂硫电池的重要条件。本报告从多硫化物的溶剂化结构的角度,阐述其溶解及解离的机制。通过锂盐阴离子的配位强度及阳离子的多齿络合形式,实现多硫化物的高效转化,从而提升低温锂硫电池的电性能。

A08-10

电能/氢能与增值化学品共生的电催化材料的设计

刘建文*、符显珠、骆静利

深圳大学

通过电催化将有机小分子转化为氢能/电能和增值化学品,且不排放二氧化碳,对于能源和环境方面均具有特殊的吸引力。这一方式将能源转换(氢能或电能)和增值化学品生产高效地集成在一个反应体系中,这在碳中和时代具有很高竞争力。甲醇、甲醛、5-甲基糠醛等就是这样一种小分子,通过和水的共同电催化反应可以产生氢能/电能和增值化学品。然而,这些反应中电催化剂的活性、稳定性以及反应机制等方面均存在着挑战,限制了电催化剂和设备的进一步发展。我们通过原位光谱结合理论计算,深入研究这一反应体系的反应机理,加速了电催化剂的设计。

A08-11**高稳定性贵金属燃料电池催化材料设计**

李煜璟*

北京理工大学

氧还原反应（ORR）是质子交换膜燃料电池重要的阴极反应。目前，广受关注的贵金属基合金 ORR 催化材料尽管催化活性较高，但稳定性是制约其使用的重要瓶颈，特别是对贵金属含量较低的催化材料，其组分、结构稳定性尤为值得关注。我们团队在过去几年的研究中，发展了“自上而下”表面刻蚀、“自下而上”高熔点金属掺杂、纳米结构化等方法，有效提升了贵金属基合金催化材料的稳定性。此次报告主要介绍本团队发展的通过湿法化学实现高熔点金属元素的表面掺杂和体相掺杂的策略。通过“自下而上”的高熔点金属元素的表面掺杂，可通过诱导表面原子重组提升催化材料的比表面积（ $>100 \text{ m}^2/\text{gPt}$ ），并有效提升其催化活性；进一步，通过高熔点金属在高活性催化组分中的近表面掺杂，有效提升催化组分的热力学稳定性，在 30000 次循环加速极化后，比表面积不发生任何降低，面积比活度和质量比活度的衰减均在 5% 以内。高熔点金属元素对贵金属基催化材料的热力学稳定化效应类似于“黏结剂”，源于高熔点金属与 Pt/过渡金属元素形成热力学更稳定的金属键，以稳定极易氧化流失的过渡金属元素，从而提升其电化学稳定性。

此外，报告人还将介绍课题组在其他贵金属（Pd、Ir）材料在面向能源电催化应用方面的工作。

A08-12**可逆转化硫基钠电池**陈彪^a，周光敏^b，何芳^a，何春年^a，乔世璋^c，成会明^d，赵乃勤^a

a 天津大学; b 清华大学深圳国际研究生院; c 阿德莱德大学; d 中国科学院深圳先进技术研究院，深圳理工大学（筹）

围绕“碳中和”对廉价、高性能基于转换反应钠电池的迫切需求，针对现有硫基材料（硫，硫化钠，金属硫化物）活性物质反应动力缓慢，导致不可逆转化反应和电池失效的难题，迫切需要加速放电和充电过程中的转化反应动力学。提出构建复合材料并结合界面和多尺度结构改性的策略来提高其双向反应动力，并揭示硫基材料在钠电池中的可逆转化的路径和作用机理。为高性能可逆转化硫基钠电池的研发提供新思路。

A08-13**温和条件下电化学固氮关键催化材料的设计与研究**

郭瑛*

深圳大学

电化学固氮的因为作为一种绿色环保的人工固氮技术，具有很好的应用前景。与传统的能量密集型哈伯工艺相比，电化学固氮不仅以氮气和水为原料，还能在常温常压下进行，具有能耗低、无 CO₂ 排放的优点，因此是一种很有潜力的哈伯法的替代工艺。然而，由于能量极高的氮氮三键和剧烈的 HER 竞争反应，以及氮气极低的溶解度，电化学固氮的法拉第效率和固氮效率受到了极大的挑战。因此，发展高效的电催化剂对提高固氮效率和产率具有很大的意义。报告人从电化学氮气还原和氧化两个方向着手，从理论分析与理性设计方面，开发了一系列性能优异的催化剂，显著提升了电化学固氮效率和产物生成速率。

A08-14**高分辨扫描电化学显微镜表征技术与电催化原位分析方法**

晋兆宇*

电子科技大学

现代大型仪器虽在表征材料物理性质方面（微观形貌和结构）已具备出色的能力，但在化学活性测量上仍存在极大挑战。此外，经典电化学测量方法受限于材料中活性位点数目未知，且催化反应速率测量被不充分传质条件严重干扰，导致本征活性无法被精确描述。针对该挑战，我们在前期工作中，基于高分辨扫描电化学显微镜（SECM）与纳米电极技术，建立了适用于研究多种模型催化体系的原位分析方法。近年来，发展了 SECM 表面滴定技术在单原子催化剂位点分析方面的应用，实验证实并定量了燃料电池催化剂中的“原子位点间距效应”，为突破燃料电池效率瓶颈奠定了理论基础[1]；建立了金属氧化物单团簇反应动力学原位分析方法，阐明了水裂解电催化剂尺寸与载体调控活性的构效规律，为开发低能耗、高效率氢电转换系统提供了重要技术支撑[2-3]；提出了 SECM 产生收集-耦合表面滴定技术，揭示了含氮污染物电催化转化过程的表界面微观机制，助推了可再生能源驱动资源循环利用技术的发展[4-6]。

参考文献：

- [1] Z. Jin, P. Li, Y. Meng, Z. Fang, D. Xiao, G. Yu, Nat. Catal., 2021, 4, 615-622.
- [2] Z. Jin, A. J. Bard, PNAS, 2020, 117, 12651-12656.
- [3] Z. Jin, A. J. Bard, Angew. Chem. Int. Ed., 2021, 60, 794-799.
- [4] P. Li, R. Li, Y. Liu, M. Xie, Z. Jin, G. Yu, J. Am. Chem. Soc., 2023, 145, 6471-6479.
- [5] P. Li, L. Liao, Z. Fang, G. Su, Z. Jin and G. Yu, PNAS, 2023, 120, e2305489120.
- [6] Z. Jin, P. Li, Z. Fang, G. Yu, Acc. Chem. Res., 2022, 55, 759-769.

A08-15

金属双原子催化剂微环境的精准调控及其锌空气电池应用

王哲*

苏州大学

双原子催化剂因其独特的原子构型和高原子利用率成为电催化、光催化及能源存储与转换等领域的研究热点。但双原子催化剂局域结构的精准调控及其可控制备一直是其发展道路上的主要挑战。本报告从单/双原子催化剂的金属原子结构设计——金属双原子、金属单原子/团簇异质结、金属双原子/团簇异质结，到其微环境的精准控制，实现对氧还原/析氧（ORR/OER）电催化的高活性和高稳定性，并探究了金属双原子催化剂在锌空气电池领域的应用。

个人简介

王哲，苏州大学特聘副教授。主要从事功能型微纳米纤维材料及单原子催化剂在能源存储与环境防护等领域的研究工作，至今以第一/通讯或共同作者在 Adv. Mater., ACS Nano, Nano Lett., Adv. Funct. Mater., Appl. Catal. B, Small 等期刊发表 SCI 论文 30 余篇；授权国家发明专利 3 项；曾获得江苏省优秀博士学位论文及中国纺织工程学会优秀博士学位论文等奖项。

A08-16

桌面式 XAFS 谱仪及其在新能源及催化材料中的应用

章磊杰*

安徽创谱仪器科技有限公司

X 射线吸收精细结构（XAFS）技术拥有不依赖于材料长程有序结构的特征，是研究能源催化材料中心吸收原子周围的局域电子结构和化学环境的重要方法，可为材料结构-性能关系的精准建立提供关键信息。桌面式 XAFS 谱仪可在实验室内实现绝大部分样品的 XAFS/XES 测试与实验，所获结果支持顶级期刊论文发表。本报告将结合桌面式 XAFS 谱仪的发展历程及技术进展，展示依托桌面式 XAFS/XES 谱仪所开展的新能源及催化材料表征及原位实验的研究成果。

A08-17**Palladium-Decorated PrBaFe₂O_{5+δ}: A Promising Anode Material for Hydrocarbon-Fueled Solid Oxide Fuel Cells**

Junyu Cai, Shuo Zhai*
Shenzhen University

Solid oxide fuel cells (SOFCs) offer efficient, low-emission power generation and can operate directly on hydrocarbon fuels. Traditional nickel-based anodes necessitate high steam-to-carbon ratios to prevent coking, complicating system design and reducing performance. This study investigates nickel-free anode materials based on PrBaFe₂O_{5+δ} (PBF), doped with palladium (Pd) to enhance oxidation properties for hydrogen and ethane fuels. PBF anodes with varying Pd contents (0 %, 5 %, and 10 %) were synthesized and evaluated for their electrochemical performance and stability under low-humidified conditions. Results show that Pd-doped PBF anodes exhibit superior electroactivity and chemical stability compared to pristine PBF. Notably, the PBF with 5% Pd doping, PrBaFe_{1.9}Pd_{0.1}O_{5+δ} achieved the best performance, attributed to improved oxidation properties and structural stability. These findings suggest that Pd doping significantly enhances the oxidation properties and stability of PBF anodes, presenting a promising pathway for developing high-performance, nickel-free SOFC anodes that simplify system design and improve efficiency when operating with hydrocarbon fuels, thus holding significant potential for practical SOFC applications.

A08-18**Enhancing layered perovskite ferrites with ultra-high-density nanoparticles via cobalt doping for ceramic fuel cell anode**

Rubao Zhao, Shuo Zhai*
Shenzhen University

Nanoparticles anchored on the perovskite surface have gained considerable attention for their wide-ranging applications in heterogeneous catalysis and energy conversion due to their robust and integrated structural configuration. Herein, we employ controlled Co doping to effectively enhance the nanoparticle exsolution process in layered perovskite ferrites materials. CoFe alloy nanoparticles with ultra-high-density are exsolved on the (PrBa)_{0.95}(Fe_{0.8}Co_{0.1}Nb_{0.1})₂O_{5+δ} (PBFCN_{0.1}) surface under reducing atmosphere, providing significant amounts of reaction sites and good durability for hydrocarbon catalysis. Under a reducing atmosphere, cobalt facilitates the reduction of iron cations within PBFCN_{0.1}, leading to the formation of CoFe alloy nanoparticles. This formation is accompanied by a cation exchange process, wherein, with the increase in temperature, partial cobalt ions are substituted by iron. Meanwhile, Co doping significantly enhance the electrical conductivity due to the stronger covalency of the Co–O bond compared with Fe–O bond. A single cell with the configuration of PBFCN_{0.1}-Sm_{0.2}Ce_{0.8}O_{1.9} (SDC) | SDC | Ba_{0.5}Sr_{0.5}Co_{0.8}Fe_{0.2}O_{3-δ} (BSCF)-SDC achieves an extremely low polarization resistance of 0.0163 Ω cm² and a high peak power density of 740 mW cm⁻² at 800 °C. The cell also shows stable operation for 120 h in H₂ with a constant current density of 285 mA cm⁻². Furthermore, employing wet C₂H₆ as fuel, the cell demonstrates remarkable performance, achieving peak power densities of 455 mW cm⁻² at 800 °C and 320 mW cm⁻² at 750 °C, marking improvements of 36% and 70% over the cell with (PrBa)_{0.95}(Fe_{0.9}Nb_{0.1})₂O_{5+δ} (PBFN)-SDC at these respective temperatures. This discovery emphasizes how temperature influences alloy nanoparticles exsolution within doped layered perovskite ferrites materials, paving the way for the development of high-performance ceramic fuel cell anodes.

A08-19**高熵氧化物中氧空位在水氧化反应中的新机制**

刘一凡¹, 叶财超², 熊攀^{1*}, 朱俊武¹

¹Key Laboratory for Soft Chemistry and Functional Materials of Ministry of Education, School of Chemistry and Chemical Engineering, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, China.

²Academy for Advanced Interdisciplinary Studies & Department of Materials Science and Engineering, Guangdong Provincial Key Laboratory of Computational Science and Material Design, Southern University of Science and Technology, Shenzhen 518055, China

氧空位工程是提高传统金属氧化物电催化活性的一种很有前途的方法。然而, 氧空位在高熵氧化物体系中的利用仍然处于初级阶段, 主要是由于高熵氧化物体系中氧空位的引入困难和氧空位的作用机理复杂。目前的报道主要集中在高温高能条件下将氧空位引入高熵晶格, 但是高温和高能条件可能导致阳离子迁移或其他不期望的改性。并且高熵氧化物与传统氧化物体系存在明显不同, 其多元素间不同的物化性质和复杂的阳离子排序会导致氧空位的化学环境不同, 氧空位在高熵氧化物中作用机制是否与传统氧化物一致? 目前并没有相关报道。本文实现了高熵氧化物中氧空位的简单引入, 揭示了氧空位在析氧反应(OER)过程中独特的高熵驱动作用。提出了一种低温表面碳化-脱碳方法来引入和调节高熵尖晶石氧化物(HEOs)中的氧空位。HEOs 中的氧空位既可以促进预氧化过程以更快地吸附 OH^- , 又可以诱导独特的桥位途径以更容易地去质子化, 这与传统的氧化物不同, 氧空位有利于 *OH 吸附而阻碍去质子化。因此, 制备的具有氧空位的高熵尖晶石氧化物(HEOs-Ov)表现出优异的 OER 活性, 优于 HEOs 和大多数报道的氧化物基电催化剂。此外, 该方法还可以推广到其他具有不同熵构型的尖晶石氧化物, 并可大批量生产。

参考文献:

[1] Y. Liu, C. Ye, L. Chen, J. Fan, C. Liu, L. Xue, J. Sun, W. Zhang, X. Wang, P. Xiong*, J. Zhu*, High entropy-driven role of oxygen vacancies for water oxidation. *Adv. Funct. Mater.* 2024, 2314820.

[2] Y. Liu, C. Ye, S. Zhao, Y. Wu, C. Liu, J. Huang, L. Xue, J. Sun, W. Zhang, X. Wang, P. Xiong*, J. Zhu*, A dual-site doping strategy for developing efficient perovskite oxide electrocatalysts towards oxygen evolution reaction. *Nano Energy* 2022, 99, 107344.

[3] Y. Liu, H. Huang, L. Xue, J. Sun, X. Wang, P. Xiong*, J. Zhu*, Recent advances in the heteroatom doping of perovskite oxides for efficient electrocatalytic reactions. *Nanoscale* 2021, 13, 19840.

A08-20

碳管组装体及其高性能微纳电容器

孟国文*

中国科学院合肥物质科学研究院

滤波电容器对电子设备稳定运行至关重要。目前使用最多的是容量小、体积大的铝电解电容, 制约了设备小型化、轻量化与便携化。双电层超级电容器的容量大、体积小, 是潜在的理想微型滤波电容器, 但其多孔炭电极中的弯曲小/闭孔阻碍了电解质离子的扩散, 响应频率低, 不能滤波。我们揭示了铝中杂质含量和阳极氧化工艺对多孔阳极氧化铝中孔形貌的影响规律, 创制了纵-横互连孔的多孔氧化铝模板, 用模板法制备了比表面积大、取向开放多孔结构的纵向与横向碳管相互连接的碳管组装体电极, 电解液离子传输畅通, 大幅提升了响应频率, 而且超级电容器的面积比电容比国际同类器件的最高值高 25%, 滤波性能优于日本尼康和松下铝电解电容。

电介质电容器是智能电网调频的核心器件, 也用于电动汽车。但其低的能量密度制约了设备小型化。我们揭示了阳极氧化铝中三维叉指孔的形成机理, 创制了三维叉指孔的多孔氧化铝膜; 研制出“碳管阵列/叉指孔氧化铝膜/碳管阵列”三维叉指电介质电容器, 能量密度比国际同类器件最高值高 33%。这两类小型化高性能电容器的研制成功, 为电子设备小型化奠定了材料基础。

A08-21

固态电池离子输运通量提升策略

贺艳兵*

清华大学深圳国际研究生院

锂电池电极与液体电解液之间存在严重的热/电化学界面副反应,容易发生热失控导致其安全性显著降低。固态电解质的应用能够显著降低电极/电解质副反应,从而提高锂电池的安全性能,然而高固/固界面阻抗和低离子输运通量阻碍了固态电池的产业化发展。针对上述难题,课题组致力于解决制约固态电池体系反应动力学的“跨界面、跨物相、跨间隙”离子输运科学问题:提出并阐明了原位界面反应固态化机制,构建了离子导电复合界面,实现了固-固原子级界面耦合和跨界面兼容;发明了介电陶瓷材料耦合新方法,揭示了锂盐解离和离子跨物相自发迁移机制,研制出高离子电导率复合固态电解质;提出了正极材料高稳定界面层的低氧化电位构建策略,创制了弹性固-聚-固离子高效跨间隙传递网络,大幅提升了全固态电池的室温长循环性能。籍上述成果提出了可量化的离子输运通量概念,为固态电池研究提供了重要判据。研究成果推动了固态电池产业发展。

A08-22

储能电池金属负极改性及界面机制研究

田华军*、辛燕、张芳

1 华北电力大学, 国家储能技术产教融合创新平台, 北京 102206; 2 华北电力大学能源动力与机械工程学院, 北京 102206

高能量密度的电化学(电池)储能设备跟人们的生活息息相关。它不仅广泛应用于便携式电子设备,还在电动汽车等领域有强烈的需求。同时,高容量高稳定性的电化学储能(电池)存储设备已成为当今研究的热点,而其中最重要的是新能源存储材料的开发。相比于锂来说,钠、钾、镁、铝、锌、钙在地壳中的含量相对于锂来说更加丰富,成本更低。同时,在安全性上来说,非锂金属离子电池,特别是镁、锌、铝、钙金属离子电池也有着广阔的应用前景。然而,在与非锂金属负极匹配的正极材料的选取和相匹配电解质的开发上存在较大的滞后性。

同时,多价态金属电池(实现两电子/三电子转移)以金属作为负极,通过二价/三价离子进行能量存储,实现了更高的体积存储容量。然而,例如镁离子电池中由于镁离子电荷密度大、极化作用强等原因,设计和制备能有效嵌入镁离子的高电压、高容量正极材料以及匹配宽电化学窗口以及环境友好的镁离子电池电解液体系是解决镁电池技术瓶颈的核心问题。此外,锌离子电池中液-固(电解液/金属负极)界面处金属的不均匀沉积和电化学不稳定性,严重影响了锌二次电池的性能和使用寿命等等。因此,如何解决金属基金属负极改性及深入开展界面机制研究是实现高性能金属基电池实用化应用的关键。

本研究团队开发了系列金属基负极界面改性技术,并详细探讨了不同金属基电池在基于不同电解液体系下的界面反应机制。1-4 实验结果表明,通过引入合金基负极界面层有利于金属基电池负极界面反应动力学,抑制枝晶的形成。而通过引入合适的电解液添加剂可以实现金属基负极测的均匀离子沉积行为。该系列研究作为抑制金属基负极枝晶生长,稳定电极/电解液界面提供了理论参考。同时对系列金属基电池关键材料的深入开展能够为高比能金属电池的开发、电站在极端条件下的实用化应用提供技术指导。

参考文献

- [1] B. He, F. Zhang, Y. Xin*, C. Xu, X.Hu, X.Wu, Y.Yang*, H.Tian*, Nature Reviews Chemistry 2023, 7, 826–842
- [2] H. Tian, G.Feng, Q.Wang, Z. Li, W.Zhang, M.Lucero, Z.Feng, Z.Wang, Y.Zhang, C. Zhen, M.Gu*, X. Shan*, Y.Yang*, Nature Communications, 2022, 13, 7922.
- [3] H.Tian, Z.Li, G.Feng, Z.Yang, D.Fox, M.Wang, H.Zhou, L. Zhai, A. Kushima, Y.Du, Z. Feng*, X. Shan*, Y.Yang*, Nature Communications, 2021, 12, 237.

[4] G. Feng†, J. Guo†, H. Tian†, Z. Li, Y. Shi, X. Li, X. Yang, D. Mayerich*, Y. Yang*, X. Shan*, *Advanced Energy Materials*, 2022,12(3), 2103484

A08-23

高能量密度/快充二次电池关键材料

李国兴*

山东大学

电动汽车的大规模普及需要大幅提升动力电池的能量密度和快充性能。锂金属被看做是下一代高能量密度电池的潜在负极材料，但锂枝晶的生长及低的库伦效率限制其实际应用。传统锂离子电池因电极材料内部锂离子传输动力学缓慢，快充条件下会引起巨大的电压极化和严重的析锂问题，大大降低电池快充性能。鉴于此，本系列工作从电池的能量密度和快充性能入手，在锂金属电池和快充电池电极材料方面展开研究。在锂金属电池方面，通过高 zeta 电势多孔材料构筑驱动电动效应，以及稳定 SEI、人工保护膜的设计制备解决锂金属负极所面临的问题，提升锂金属电池性能。在快充电池方面，从提升负极材料离子传输动力学的角度出发，通过官能团层间调制、自扩张离子传输通道构筑、电极材料空位工程以及建立离子抽运特性的异质结界面等策略调控离子在电极材料中的传输行为，加速离子的传输，从而在宽温域内让锂离子电池实现优异的快充性能。

A08-24

Electro-chemo-mechanical degradation of NCM cathode materials: from polycrystal to single crystal

Hui Yang*

Huazhong University of Science and Technology

Ni-rich transition metal layered oxides (NCMs) have been identified as the promising lithium-ion batteries (LIBs) cathode materials for their high reversible capacity. However, during electrochemical cycling, NCMs always suffer from fast structural degradation, leading to the inevitable performance fading of LIBs, which severely restricts their large-scale practical applications. Understanding the underlying mechanism of structural degradation is critical for the successful design of NCM structures with significantly enhanced cycling stability. Herein, an electro-chemo-mechanical model is developed to investigate the lithiation/delithiation cycling behaviors of both polycrystalline and single crystalline NCM cathode materials, including phase transformation, morphological change, stress generation, and damage evolution, based on which the underlying failure mechanism is uncovered. The new insight gained by this study is further adopted to guide the construction of NCMs from the aspect of surface modification to structural design, effectively promoting their cycling performance.

A08-25

新型建筑围护结构中新能源材料的性能高效开发

庞震乾*

浙江大学

针对建筑领域实现“双碳”目标，构建低碳低能耗建筑，需要研发绿色建筑智能围护结构，重塑营造建筑环境新方法，制造适应可再生能源的新能源系统。近期超材料、智能材料、纳米材料等的发展和其独特的光学、热力学等性能为构建智能建筑围护结构提供了丰富的材料和技术基础。但是，材料基元种类繁多，由排列组合所引起的复合差异导致最终复合材料的性能跨度极大，因此对特定优异物理性能（高强、高韧、高透等）的复合材料开发充满了巨大的挑战。机器学习为高性能材料的开发提供了极大的便利，而传统机器学习手段是通过迭代优化实验来进行性能趋近，这在复合基元庞大的参数空间（尺寸、形状、刚度、强度等），仍然显得效率低下。亟需结合了机器人技术、机器学习神经网络算法与分子尺度模拟，提出一

种加速制备具有可编程光学、热学和力学性能的全天然复合材料新方法，通过集成工作流程（预测初筛→机理引导→定向制备）实现了全天然复合材料的多性能高效调控。

A08-26

微纳结构多孔合金负极材料的设计和储锂（钠）性能

霍开富*

华中科技大学

锂离子电池作为一种绿色的储能器件，具有工作电压高、能量密度大和自放电率小等优点，广泛应用于各类便携式电子设备和储能装置。目前商业锂离子电池的负极材料主要为石墨碳材料，该类材料理论储锂容量为 372 mAh/g，无法满足人们对高能量密度储能器件的需求。硅(Si)、锗(Ge)、锡(Sn)、锑(Sb)等由于具有较高的理论容量，有望替代石墨成为下一代高能量密度锂离子电池的负极材料。然而合金负极材料在循环过程会产生巨大的体积膨胀，导致活性材料粉化和电极溶胀以及不稳定的固体电解质界面膜等问题，造成容量快速衰减，设计新型材料结构，提升其结构稳定性和循环性能是其应用的关键。本次报告将介绍课题组在 Si、Ge、Sn、Sb 等合金负极材料的设计、锂（钠）离子储能性能以及高性能粘结剂方面的研究。

A08-27

能源材料研究中的高通量表面分析技术

鞠焕鑫*

爱发科费恩斯(南京)仪器有限公司

表面分析技术在新材料和器件研究中发挥着重要作用，特别是高通量表征，为揭示其基础物理化学性质、表界面特性和电子结构等关键科学问题提供了关键支撑。本报告将探讨能源材料研究领域对表面分析技术的需求，并从空间分辨、深度分辨和原位表征多个维度，介绍表面分析技术中的 X 射线光电子能谱（XPS）、俄歇电子能谱（AES）、以及飞行时间二次离子质谱（TOF-SIMS）的最新进展以及应用。

A08-28

基于原子层沉积的界面工程及其在能源材料中的应用

谢璘*

上海科技大学

采用原子尺度的材料加工技术，可以自下而上的将原子搭建建成所设计的薄膜组分和微纳结构，其在原子尺度上实现了逐层叠加和数字可控等一系列传统 3D 打印的优点。本报告将探讨原子层沉积、化学气相渗透、选择性原子层沉积等原子尺度的材料合成手段的发展，及其在薄膜制备、高分子改性、微纳结构合成等领域的应用。通过原子层沉积和后退火工艺，可以定向改造材料界面，为研究锂电池界面失效机制提供强有力的模型工具；通过化学气相渗透法可以改造高分子的界面性质和体相性质，用于合成新型的复合固体电解质材料；利用不同基底的化学活性以及同一基底不同区域内的化学活性，实现了选择性原子层沉积用于合成具有金属氧化物-载体强相互作用的催化剂材料。

A08-29

卤化钙钛矿材料的反应结晶

肖爽*

深圳技术大学

明晰卤化钙钛矿成核与生长的物理化学机制，发展有效策略控制结晶的动力学、热力学过程，实现晶体的有序、精准生长，用以制备高性能钙钛矿基光电器件，是卤化钙钛矿材料领域的重要共性需求。围绕

卤化钙钛矿材料的精准制备，我们提出了优化钙钛矿晶面生长取向性的策略：利用丙胺在碘化铅甲脒(001)晶面较易吸附的特点，运用氯化丙胺诱导了钙钛矿的(001)晶面取向性生长，有效地降低材料的张应力，抑制缺陷的形成，并提升材料的相稳定性。在另一个工作中，我们针对宽带隙卤化钙钛矿材料中缺陷种类多，开发了利用乙二胺和 4-三氟苯乙胺两种大尺寸胺协同钝化混合离子卤化钙钛矿材料缺陷的方法。这种方法可以同时钝化宽带隙钙钛矿材料中的多类离子缺陷，极大地降低了材料的非辐射复合速率。通过多种手段结合，我们实现了低缺陷的高品质钙钛矿材料生长，并应用于太阳能电池等光电转化器件中。

A08-30

固态电池界面稳定性研究

杨孟昊*

同济大学

构筑低阻抗和高稳定固固界面是实现固态锂电池优异性能的关键。申请人从事固态锂电池界面稳定性的前沿基础研究，通过建立大尺度原子界面模型（100nm×100nm，超过 1 千万原子）揭示锂金属/固态电解质之间物质输运和结构演变规律，取得了如下创新性成果：1）建立了固态电池剥离和沉积过程原子模型，阐明了锂金属/固态电解质界面孔洞形成过程；2）揭示了晶格失配度与界面缺陷形成新机理，开发了一系列抑制电池失效的界面结构；3）构建了固态电池稳定循环参数图谱，实现了通过增加随机密排六方锂提升性能的新策略。

A08-31

锂金属负极枝晶的机制解耦和策略协同

王东*

吉林大学

500 Wh kg⁻¹ 的高比能量电池是实现国家十三五规划、中国制造 2025、碳达峰碳中和等要求的重要研究方向之一。其中 Li 金属由于具有极高的理论比容量(3860 mAh g⁻¹)和最低的电化学电势(-3.04 V vs SHE)在众多的负极材料中脱颖而出，被誉为电化学领域的“圣杯”。但充放电过程中产生的枝晶及由此导致的安全问题、循环寿命不足、正负极 N/P 比过高、热失控等严重阻碍了 Li 基电池的进一步发展。此背景下，我们基于热力学和动力学的机制解耦提出了三个角度探究了锂金属枝晶产生机制和抑制策略，并对其实用化进程进行了分析思考^[1]：（1）“管制”Li 金属。通过调控液态 Li 金属中产物的表面扩散-自组装行为，优化了固/液界面并构建了具有致密、稳定人工 SEI 膜保护的一体化电极，高负载量的 Li||LiFePO₄ 全电池实现了在 1 C 下循环 400 次后仍能保持~95%的容量保持率^[2]。（2）“驯服”Li 金属。以薄膜生长中的形核原理解析枝晶现象，通过热力学机制抑制枝晶的机制解析，证明了衬底性质对沉积形貌的显著影响。基于此理论提出了“以退为进”策略的均匀锂坑化设计，合理释放空间电荷聚集效应引起的应力堆积，避免了宏观 SEI 膜因为局域电势过高失效的问题^[3]。（3）“修正”Li 金属。以外场修复枝晶的新策略为出发点，提出了双向非对称充电协议达到抑制枝晶生长的目的。此外，还提出了由界面结构诱导的焦耳热效应对电化学行为的影响机制，并通过液态金属焊接策略优化集流体和 Li 金属间的界面结构均匀化表面热分布，实现了 Li 的均匀沉积/溶解行为^[4-5]。并且，我们发现该策略具有普适的兼容性，在解决焦耳热影响的基础上能更进一步优化 Li 金属保护，进而提出了多策略协同保护路线是实现更加安全、高寿命 Li 金属电池的有效方案的观点，对应的 Li||LiCoO₂ 电池在 6 C 下循环 1000 圈容量保持率分别可达 91.5%。综上可知通过多策略协同保护作用，将有望大幅度促进 Li 金属电池的实用化进程。

参考文献

[1] D. Wang, W. Zhang, W. T. Zheng, et al., *Advanced Science*, 2022, 32, 2206405..

[2] D. Wang, T. Xie, C. C. Qin, et al., *Advanced Functional Materials*, 2022, 32, 2206405.

[3] D. Wang, C. Luan, W. Zhang, et al., *Advanced Energy Materials*, 2018, 8, 1800650.

[4] D. Wang, C. C. Qin, X. L. Li, et al, iScience, 2020, 23, 100781.

[5] D. Wang, Y. M. Liu, G. W. Li, et al., Advanced Functional Materials, 2021, 31, 2106740.

A08-32

快速制备介孔碳材料与其应用探究

彭亮*

香港理工大学

功能介孔碳材料是新兴起来的热门介观结构材料,其具有巨大应用潜力。这主要是因为介孔材料不仅具有一般介孔材料的性质,例如 2 - 50 nm 可调的孔径、大的孔容、高比表面积等,还具有自身独特的性质,如质轻、刚性的骨架、可调的导电性和化学活性等。使其在催化、储氢、分离和电化学等领域具有广阔的前景。至今,人们发展了多种方法来调控介孔材料的形貌与结构,包括喷涂、滴注、Stöber 法、胶体辅助组装、限域组装和固态反应等。然而,采用上述方法合成的介孔碳纳米材料的形貌和介观结构依然不能满足时代发展的需求。同时,对于介孔材料的合成机理的研究还不够深刻,应用研究也十分有限。因此,进一步开发一种简单易行的合成方法来构建功能性的介孔材料,对其合成机理进行深入的研究,充分发挥其应用潜能,具有重要意义。基于这些需要,我们围绕新型介孔碳材料的开发合成、新颖形貌的设计、介观结构的调控以及骨架的功能化等方面开展了系统性研究。同时,针对性地研究了这些材料在储能等方面的应用。

参考文献

1. Peng, L. et al, *Nat. Protoc.* 2023, 18, 1155–1178.
2. Peng, L. et al, *Nat. Commun.* 2023, 14, 8148.
3. Peng, L. et al, *Science Adv.* 2021, eabi7403.
4. Peng, L. et al, *Chem* 2021, 7, 1020.
5. Peng, L. et al, *J. Am. Chem. Soc.* 2019, 141, 7073.
6. Peng, L. et al, *J. Am. Chem. Soc.* 2022, 144, 15754.

A08-33

高性能锂二次电池 SEI 调控

李超^{1,3}、曹道帆¹、刘科¹、万佳雨^{*2}

1. 南方科技大学 化学系, 深圳市南山区学苑大道 1088 号, 518055
2. 上海交通大学 溥渊未来技术学院, 上海市闵行区东川路 800 号, 200240
3. 哈尔滨工业大学 化学化工学院, 哈尔滨市南岗区西大直街 92 号, 150001

尽管锂二次电池应用广泛,但在长循环和快速充电方面仍面临重大挑战,主要原因是固体电解质界面相(SEI)成膜不均匀且性能不佳。传统的电解液工程方法受到粘度增加、润湿性降低和形成理想 SEI 的高成本等限制。因此,我们分别针对石墨负极提出了一种通用策略,利用超低浓度的超润湿电解质,在石墨负极上实现了均匀完整覆盖的 SEI。此外,这种电解液还能诱导低电流化成过程中的高过电位,形成富含无机组分的 SEI 层。因此,具有超润湿电解质的锂离子电池表现出卓越的循环稳定性和高倍率性能,这也在软包电池中得到了验证。我们的研究提出的这种简单而有效的策略,可实现锂离子电池 SEI 层的优化,并可轻松拓展至其他电池系统中。同时,针对锂负极,我们还提出了一种利用人工 SEI 稳定锂金属阳极的策略。我们的方法在碳酸酯类电解液中实现了 500 个循环期间低过电位下的均匀 Li 沉积/剥离,有效抑制了锂枝晶的形成,证明了其在 LiFePO_4 和 $\text{LiNi}_{(1-x-y)}\text{Co}_x\text{Mn}_y\text{O}_2$ 阴极配对时的增强稳定性,突出了作为实用锂金属电池解决方案的前景。

A08-34

阴离子排列诱导的高离子电导率研究

杨其凡、许晶、王宇琦、符晓、肖睿娟*、李泓

中国科学院物理研究所

研究现有快离子导体的特征有助于发现更多的离子导体。事实上，非移动离子组成的框架结构对移动阳离子扩散的势垒和路径有很大影响。体心立方（bcc）的阴离子晶格引起更高离子电导率的发现证实了阴离子排列对于快离子导体的重要性[1]。除了 bcc 排列的阴离子特征外，我们发现一些具有面心立方（fcc）阴离子晶格的硫银锗矿也具有极高的离子电导率。通过结构分析，我们将其原因归结为硫银锗矿中两种不同化学环境的阴离子，其中不与其它框架离子成键的阴离子周围形成了平缓的势能面，有效提高了结构的离子传输性能。通过采用第一性原理计算和从头算分子动力学（AIMD）模拟，以硫银锗矿各类相结构的 Li_8SiSe_6 和 $\text{Li}_7\text{SiSe}_5\text{Cl}$ 化合物为例，系统地研究了这类化合物的阴离子排列规律及其对锂离子传输的影响，为如何调控和优化具有笼子-笼间传输机制的离子导体提供了理论参考。此外，以此结构特征为依据，通过高通量筛选发现了四类具有此结构特征的新快离子导体，并通过 AIMD 模拟对其离子传输特性进行了验证，由此也进一步印证了这一结构特征对离子传输的重要性[2]。

参考文献

[1] Wang, Y. et al. Nat Mater. 14, 1026-1031 (2015).

[2] Qifan Yang, Jing Xu, Yuqi Wang, Xiao Fu, Ruijuan Xiao and Hong Li (in preparation)

A08-35

机器学习加速金属锂电池研发

张强*

清华大学

发展基于金属锂负极的下一代锂电池技术是电化学领域的圣杯。金属锂负极的安全高效利用是长期追求的可持续发展目标。金属锂和电解液界面是金属锂负极电化学能源高效利用的关键。由于金属锂极低的电极电势和强还原性，电解液在负极的界面反应剧烈。电解液反应造成干液，导致电池失效；更严重的是电解液分解产生大量的可燃性气体，引发安全隐患。采用机器学习等人工智能手段，开发设计更加稳定、高效的电解液体系，获得抑制电解液-负极界面反应、稳定金属锂负极，加速实现锂金属电池实用化。

参考文献：

1. Chen X, Zhang Q. Accounts of Chemical Research 2020, 53, 9, 1992–2002.

2. Jiang LL, Yan C, Yao YX, Cai WL, Huang JQ, Zhang Q. Angewandte Chemie International Edition 2021, 60, 3402-3406

3. Cheng XB, Zhao CZ, Yao YX, Liu H, Zhang Q. Chem 2019, 5, 74-96.

4. Chen X, Chen XR, Hou TZ, Li BQ, Cheng XB, Zhang R, Zhang Q. Science Advances 2019, 5, eaau7728.

5. Shen X, Cheng XB, Shi P, Huang JQ, Zhang XQ, Yan C, Li T, Zhang Q. Journal of Energy Chemistry 2019, 37, 29-34.

6. Yan C, Zhang XQ, Huang JQ, Liu QB, Zhang Q. Trends in Chemistry 2019, 1, 693-704.

7. Zhang XQ, Li T, Li BQ, Zhang R, Shi P, Yan C, Huang JQ, Zhang Q. Angewandte Chemie International Edition 2020, 59, 3252-3257.

8. Chen X, Bai YK, Zhao CZ, Shen X, Zhang Q. Angewandte Chemie International Edition 2020, 59, 11192-11195.

9. Chen X, Shen X, Hou TZ, Zhang R, Peng HJ, Zhang Q. Chem 2020, 6, 2242-2256.

10. Yao YX, Chen X, Yan C, Zhang XQ, Cai WL, Huang JQ, Zhang Q. Angewandte Chemie International

Edition 2021, 60, 4090-4097

11. Song YW, Shi P, Li BQ, Chen X, Zhao CX, Chen WJ, Zhang XQ, Chen X, Zhang Q. Matter 2021, 4, 253-264

12. Yan C, Jiang LL, Yao YX, Lu Y, Huang JQ, Zhang Q. Angewandte Chemie International Edition 2021, 60, 8521-8525.

A08-36

新型氯化物固体电解质及其全固态锂电池

姚宏斌*

中国科学技术大学

以金属氯化物多面体结构基元搭建起来的框架结构，具备容纳离子嵌入、脱出以及传导的能力，同时还展现出晶格软、静电作用弱、抗氧化能力强以及易变形等特点，适合于开发新型固态电解质材料。我们首先从铅/锡氯化物八面体基元出发，探究了具有三维钙钛矿结构的有机无机杂化框架材料的导锂性能和锂金属界面稳定性，但该类电解质的锂离子电导率偏低[1]。为了提高氯化物固态电解质的锂离子电导率，我们从本征的阴离子框架堆积模型出发，基于离子半径大、电负性低的镧系稀土阳离子与氯离子配位形成的九配位三帽三棱柱结构单元，构建了非紧密氯离子堆积框架结构，开发了镧系稀土基氯化物固态电解质体系，突破了传统固态电解质框架结构设计[2]。在该新体系的基础上，我们进一步提出非紧密堆积阴离子框架在实现超离子导体方面的巨大潜力。我们揭示了非紧密堆积的 UCl₃ 型框架对各种载流子离子(包括 Li⁺, Na⁺, K⁺和 Ag⁺)具有超离子导电性，这通过从头算分子动力学模拟和实验测量得到了验证[3]。

参考文献:

[1] Yin, Y. C.; Yao, H. B.* et al., Nat. Commun. 2020, 11, 1761.

[2] Yin, Y. C.; Yao, H. B.* et al., Nature 2023, 616, 77.

[3] Luo J. D., Yao, H. B.* et al. Angew. Chem. Int. Ed. 2024, e202400424.

A08-37

高能量密度层状正极

卢侠*

中山大学

以层状 NCM 材料为例，在高脱锂状态下，层状结构演化剧烈，结构稳定性以及离子扩散过程错综复杂，涉及到多种缺陷的产生和副反应的发生，例如阳离子混排，氧空位形成，气体析出，过渡金属溶解，以及电解液分解等。从电子结构的层次，正极材料的充电过程中对应着在外电压的作用下，电子从费米能级处拔出，导致电子密度在实空间进行重新分布与晶体结构发生弛豫，直到体系达到一个新的稳定态。在体系高度不稳定的时候，材料有强烈的趋向去寻求势能面上更加稳定的能量点，从而出现过渡金属迁移、氧-氧聚合等，此时晶体结构和对应的电子结构都可能发生实质性的变化，并且在循环过程中逐渐加剧，引起材料出现严重的电压迟滞和容量衰减。

现有研究已经明确表明了 NCM 三元材料体相中存在阳离子混排的动态演化，以及在近表面处存在过渡金属的积聚和严重的不可逆相变，这表明实际层状材料工作过程中始终处于一个混排伴生的部分无序状态，存在晶体对称性的破缺。可以预料，相比于层状有序状态，其电子结构将发生显著的变化，即存在电子重组的现象，可能蕴含着新的氧化还原过程。这种变化形式的确定是至关重要的，因为其充当着材料从层状有序转变为部分无序、再退化到对称性更高的岩盐相的桥梁，主导了层状缺陷的产生和演化。

本报告介绍层状正极中阳离子混排诱导的电子重组现象：从配位环境和分子轨道的角度，确定了阳离子混排诱导的电子结构重组的基本形式，以及产生这种现象的本质原因。在无序化过程中，阳离子混排在

层状结构中引入局部 TM-rich 区域和 Li-rich 区域，其中 TM-rich 区域由于位点扭曲出现电子俘获中心，而 Li-rich 域的特征则是出现 O:2p 孤对电子。高脱锂态下，这两种电子状态之间可以发生简并和耦合，导致额外晶格氧活性的激发，以及过渡金属氧化还原的抑制，属于一种能量激发的状态。对于结构可逆性，这种电子重组增加了体系中产生氧二聚体或者氧气的可能性，并且建立了阳离子混排和氧流失之间互相促进的热力学关系。预测材料中将会出现一条“自维持”的衰退路径，以阳离子混排为成核位点向外延伸，最终衍生出不可逆相变。这些结果表明，电子重组是传统层状材料发生严重退化的一个关键的步骤和节点。通过调控能带结构，电子结构的重组过程可以得到调节和规范，从而有利于提升材料的电化学稳定性。

A08-38

基于瞬态高温的电池材料极端条件制备

张力*、刘俊杰、黄灵、王慧群、杨慧平、顾嘉炜

厦门大学化学化工学院

以锂离子电池为代表的电池体系是推进“碳达峰碳中和”的重要支撑，其进步不仅取决于超越传统的材料、机制和体系创新，也依赖于先进制备技术的突破。向传统制备过程中的关键环节注入高技术手段，可发展出具有普适性的变革性制备技术，推动材料性能的原理创新和性能突破。我们将焦耳热瞬态高温技术改良并合理融入到电池材料制备最通用的高温过程，将其升级为动力学主导、可在时间和空间维度上对相变（如固→气）和热反应进行精准控制和利用、可高通量创制和捕获任意演化阶段反应产物的颠覆性制备技术。基于此，瞄准前沿负极材料因传统高温过程制约而难以逾越的结构和性能瓶颈，研制超越现有储钠/储锂机制的新型硬碳，挑战商业硬碳和石墨负极；发展微腔限域可控相变/热反应技术，原位构筑超细纳米硅基、磷基等复合负极，并深入揭示瞬态高温下超快、短程和定域的动力学行为及其与电化性能间的本质关联。

A08-39

高安全金属锂电池设计

程新兵*

东南大学

金属锂负极以其极高的容量和最低的电位被认为是极有潜力的下一代电化学储能材料，在无人机、电动飞机等场景中具有巨大的应用潜力。但是，金属锂负极的枝晶的生长及其高反应活性，导致金属锂电池利用率低、循环寿命短、安全性差，限制了其实际应用。关于枝晶问题，目前已经有大量的工作开展了相关研究，但是对于电池安全性的定量研究和调控策略，目前却很少研究。本课题基于绝热加速量热仪和差示扫描量热仪，结合电极材料的成分和结构分析工具，在电池的器件和材料尺度，定量分析金属锂电池的热失控机制。在此基础上，通过金属锂负极的结构设计、电解质的分子调控和界面优化等多个策略，提升了实际器件的安全性能，为设计高安全金属锂电池提供了定量的思考角度和解决方案。

A08-40

能源装备用先进陶瓷材料的快速合成与调控

谢华*

山东大学

优化改善应用于高效能源装备与器件的先进陶瓷材料对于实现双碳战略有重要意义。这些高性能陶瓷材料的开发，通常依赖于对其组分、相态和微结构的精确调控。本报告将重点介绍利用瞬态超高温技术对氧化物涂层、薄膜和纳米颗粒进行限域调控的策略。通过对超高温条件下材料合成反应与扩散动力学的严格限定，快速筛选迭代匹配材料组合，引导亚稳态材料或亚稳态微结构的形成，提升材料性能。本报告将详细讨论这一调控策略的理论基础、实验设计以及实现过程中的关键技术，以及将展示这种超高温时空限

域调控策略在热障涂层筛选、氧还原催化剂增寿与锂金属固态电解质表界面优化等方面的应用。这些研究成果有望为能源应用类材料的设计和制备提供新的思路和方法。

A08-41

AI 的平方加速新能源材料研发

郑家新*

北京大学深圳研究生院新材料学院

第一性原理(Ab initio)计算已经广泛应用于先进电池材料研发,随着人工智能(Artificial Intelligence)的发展,基于数据驱动的研发新范式目前也开始在电池材料研发领域崭露头角。第一性原理存在时间尺度和空间尺度的效率瓶颈,人工智能存在物理精度的瓶颈,将第一性原理与人工智能相结合,也就是 AI^2 ,能够将各自的优点相结合,大大提高新材料的数字化研发效率。本报告将从两个部分介绍 AI^2 如何助力锂电池关键材料研发:第一部分是基于第一性原理的计算数据,如何利用 AI 加快电池新材料的预测或材料新性质的预测;第二部分是基于第一性原理数据结合物理建模与机器学习,通过构建机器学习势场加快探索电极材料的构效关系。

A08-42

锂电池材料与器件的智能高效研发

万佳雨*

上海交通大学

随着新能源需求的增长,锂电池材料与器件的智能、高效研发受到广泛关注。本报告讨论了在这一领域的几个关键进展:未来电池的超快合成与回收,以及小样本条件下的智能电池寿命预测。首先,报告将介绍固态电解质超快合成技术的最新进展,该技术利用优化合成工艺和合成路径大幅缩短了材料制备时间,提高了固态电解质的离子导电性和稳定性。其次,报告将展示废旧锂电池材料超快回收技术的发展,实现了材料的秒级快速回收和循环利用,降低了环境污染和生产成本。最后,报告将探讨在小样本条件下预测电池寿命的新方法,即使在数据有限的情况下,也能准确预测电池的使用寿命和性能衰减,同时为锂电池的设计和维护提供了重要依据。

A08-43

机器学习势函数方法开发和动力学模拟

李磊*

南方科技大学

材料的动态演化在材料基础研究中扮演着重要的角色,对于揭示材料的作用机制和优化设计至关重要。这种动态演化包括结构演化、组分重组、界面化学反应等过程,通常发生在秒、分钟甚至小时的时间尺度上。然而,现有的动力学模拟方法在保持高精度的同时难以涵盖如此广泛的时间尺度。为应对这一挑战,我们开发了基于神经网络架构的机器学习势能面构建软件包 PyAMFF。同时,针对机器学习方法中长程静电作用缺失的问题,我们发展了一种自洽的电荷优化方法,在无需提供电荷参考值的前提下,实现了电荷与势能面的同步预测。另外,进一步结合分子动力学和动力学蒙特卡洛方法实现了长时间的动力学模拟。

A08-44

多尺度结合材料仿真与机器学习的新策略探究

王衍明*

上海交通大学

材料设计的本质问题之一是如何取得对材料微观结构特征的有效描述,并阐明其与材料宏观特性和工艺参数之间的关系。近年来伴随科学计算硬件和算法的发展,在人工智能技术辅助下的建模和仿真已成为解决上述挑战的一种有效途径。本报告将试图通过三个不同材料尺度的案例,来探究建模仿真和机器学习结合加速材料设计的可能策略。在第一个例子中,我们提出了一种高效的集成学习框架,其能够从分子动力学轨迹自动识别原子晶体结构,可作为材料描述符自动化提取的通用工具。在第二个例子中,我们搭建了贝叶斯优化引导的粗粒度分子动力学仿真框架,系统地研究了分子水平材料特性对聚合物材料系统中锂离子传输的影响,促进了对固态聚合物电解质的全局筛选。在最后一个例子中,我们构建了基于三维生成对抗网络的复合材料设计算法,实现了多性能目标的复合材料生成式优化。

A08-45

数据驱动的高电压钴酸锂正极材料高效研发探索

张晓琨*、薛志宇、毛宇、姚禹彤、庞超、王欣全、周帆、向勇
电子科技大学

目前,锂电池的能量密度无法满足电动航空等新兴应用场景的需求。典型情况下,正极材料的重量在锂电池中占比约 40%。提高正极材料的充电截止电压,并释放出更多的充放电容量,是提升锂电池比能量的重要手段之一。钴酸锂是目前应用最广泛的锂电池正极材料之一,具有工作电压高、能量密度高、压实密度高等特点。然而,在高电压工况下,钴酸锂正极材料因晶体结构坍塌、晶格氧逃逸以及与电解液的界面副反应等原因,充放电循环性能急剧下降。元素掺杂[1]和界面修饰[2,3]是高电压钴酸锂正极材料技术的主要发展途径。但是,目前对掺杂元素的作用机理,以及界面修饰与元素掺杂的协同机制认识还不够清晰。尤其是在工业应用中,还需考虑规模化生产工艺中掺杂元素偏析和界面修饰不完整等问题,导致目前高电压钴酸锂正极材料技术的发展仍面临巨大挑战。本研究将数据驱动的机器学习建模方法应用于高电压钴酸锂正极材料技术研发。一方面,建立掺杂元素特征参量与钴酸锂正极材料高电压循环性能指标的关联模型,通过算法调试优化,提升了关联模型的映射精度,揭示了影响性能指标的关键参量,支撑理解掺杂元素作用机理,指导高电压钴酸锂正极材料设计。该方面工作取得的阶段成果证明,与试错实验和传统机理分析方法相比,数据驱动建模方法可大幅提升研究效率。另一方面,基于钴酸锂正极材料生产制造企业提供的数据,建立产线工艺关键环节监测参量与产品性能指标的关联模型,分析导致产品性能不达标的关键工艺瓶颈,支撑产品配方和量产工艺优化。该方面研究已初步完成模型架构和应用软件工具开发,预期导入智能化产线后,可支撑实现问题产品及时发现,节约生产成本,并大幅提升产品良率。

A08-46

理论与数据驱动的固态电解质材料研发

侯廷政*
清华大学深圳国际研究生院

在全球从化石能源向绿色能源转变的过程中,高能量密度储能扮演着至关重要的角色。在此背景下,采用固态电解质替代液态电解质材料有望推动高能量密度锂金属电池的应用。然而,传统的无机固态电解质和聚合物固态电解质存在着界面兼容性差、电化学稳定性差和离子导电率低等难以克服的问题。为了解决这些问题,含有少量小分子溶剂的准固态电解质和有机无机复合固态电解质成为当前研究的重点。由于材料原位微观表征困难、实验研发成本高,多尺度模拟和高通量计算在固态电解质的理论机理和计算筛选研究中发挥着越来越重要的作用。针对准固态电解质材料离子输运机理不明确的问题,我们通过理论与实验相结合的方法,验证了金属有机框架基准固态电解质材料中“溶剂辅助跳跃”为主导的离子输运新机理,提出了通过调控材料孔洞大小和穿插度提高离子电导的新策略。针对聚合物基复合固态电解质室温离子电导率低等问题,我们发展了聚合物基复合固态电解质界面微环境调控策略,构筑了具有不饱和金属位点的新型电解质填料,实现了固态电解质高离子导率、高离子迁移数和固态电池长寿命稳定运行。

A08-47

设计-运维协同的高安全储能电池技术

杨晓光*、张文珂

北京理工大学

高安全、长寿命、高能量密度和高功率密度储能电池是我国新能源汽车、智能电网等战略性新兴产业和尖端国防装备发展的迫切与重大需求。锂离子电池凭借其能量密度高、寿命长等优势已广泛应用于储能与电动汽车领域。然而，受制于材料本身活性和稳定性的矛盾，当前锂离子电池仍难以实现高功率性能与高安全长寿命的兼容。为此，本文提出一种设计-运维协同的电池技术设计方法，在设计方面，开发高温稳定性材料，优化电极结构等设计参数，在运维方面，采用非对称温度热调控技术，一方面，在电池充电前快速升高电池温度，提升电池活性，实现大倍率充电，同时减少其在高温时间，另一方面，在放电期间冷却至室温，降低电池衰减速率。通过匹配高温稳定材料，能够进一步降低其高温衰减速率，保障高温下的高安全与长寿命。本文通过开发高温稳定添加剂，采用设计-运维协同方法，可实现高能量密度电池 11 分钟快速充电，寿命超 2000 圈稳定循环，满足大规模储能与电动汽车需求。此外，本方法已在多种材料体系下得到技术验证，能够为下一代电池的设计提供指导。

A08-48

数据驱动加速碳基储能材料与金属基电解水催化材料设计

朱杉*

河北工业大学

以机器学习（ML）为代表的人工智能（AI）技术能够帮助研究者深入解析能源存储与转化中的电化学过程，并显著提升新材料的研发效率。本报告以碳基储能材料和金属基电解水催化材料为例，展示了 AI 方法在新能源材料研究中的应用。首先，在超级电容器体系中，通过构建碳基电容数据库并引入机器学习方法，可以优化碳基电极材料与电解质系统，揭示影响比电容的核心要素，从而获得兼具高容量与稳定性的电容储能材料。此外，AI 算法在电解水制氢材料研究中也扮演着重要角色。利用金属基电解催化剂数据库，机器学习可以有效揭示合金析氢催化剂的最优尺寸，并为后续的合成与制备提供指导。最后，AI 在解释电化学阻抗数据方面也发挥了重要作用。研究人员利用 AI 技术从复杂信号中提取关键信息，更好地理解电化学反应系统的行为，从而提高数据解析的准确性和效率。

A08-49

快速、直接再生废旧锂离子电池 LiCoO_2 正极尹云超¹、胡雪山¹、李超¹、杨金龙²、万佳雨*¹

1. 上海交通大学

2. 深圳大学

废旧锂离子电池的回收对可再生能源技术的可持续发展至关重要，因为它促进了资源的再利用和环境的保护。尤其需要回收正极材料，因其含有高浓度的战略元素。然而，传统的正极材料回收方法通常效率低下，能耗高且操作时间长。我们提出了一种高效、一步到位、非破坏性的方法，能在几秒内再生废旧的 LiCoO_2 正极材料。该方法通过快速焦耳热效应实现了正极材料的再锂化和晶体结构的修复。相较于传统的修复方法，这个过程能耗低且操作时间短。经过 8 秒的修复，再生的 LiCoO_2 具有明确的层状结构，恢复了原始的电化学性能，初始放电容量为 133.0 mAh/g，并具有良好的循环性能。这种快速焦耳热法是一种潜在的通用方法，可用于高效直接再生废旧锂离子电池的正极材料。

A08-50

钠离子固态电解质的超快合成

杨林¹、左达先¹、万佳雨^{*2}

1. 南方科技大学
2. 上海交通大学

NASICON 结构的固态电解质 (SSE) 被认为是钠固态金属电池 (NaSMB) 的一种极具潜力的材料。然而, 目前的合成方法往往劳动密集且效率低下, 需要消耗大量的能量和时间。在此, 我们利用超快高温合成 (UHS) 技术从混合前驱体粉末直接合成了 NASICON 型固态电解质, 将其合成时间从数小时缩短到仅几秒。在这项工作中, 我们成功地证明了使用 UHS 方法快速制备 NASICON 型固态电解质的可能性, 并分析了其反应途径。我们的实验表明, 当不添加额外的锆位掺杂元素时, NASICON 型固态电解质不可以被超快合成。进一步实验和分析表明, 当 Tm、Yb 和 Lu 等特定元素被掺杂时, 这些选定的元素可以帮助形成催化 NASICON 相形成的中间相。我们认为, 具有 Na₃PO₄ 结构的中间体在 NASICON 型 SSE 的快速合成过程中发挥了关键作用, 最终形成了最终的 NASICON 相。此外, 我们的实验表明, UHS 快速合成的 Na_{3.3}Zr_{1.7}Lu_{0.3}Si₂PO₁₂ (NZLSP) SSEs 的室温离子电导率几乎是 NZSP SSEs 的三倍。这项研究为精确和有针对性地合成复杂氧化物固态电解质提供了新的见解和验证。

A08-51

超快合成加速研发高熵石榴石固态电解质

冯义田¹、杨林¹、严子韩³、左达先¹、朱哲文³、曾林¹、朱一舟³、万佳雨^{*2}

1. 南方科技大学
2. 上海交通大学
3. 西湖大学

高熵指数级地扩展了多元素材料的探索空间, 使用传统的“试错”方法发现高性能的高熵氧化物是非常具有挑战性的。本文采用了超快高温烧结技术, 研究了具有复杂晶体结构和不同晶体位点的 Li₇La₃Zr₂O₁₂(LLZO) 石榴石固态电解质体系。在短短几十秒内实现了高熵石榴石 Li_{7+a-c-2d}La₃(A³⁺_aB⁴⁺_bC⁵⁺_cD⁶⁺_d)O₁₂, (A=Sc, Y, Bi; B=Zr, Mo, Sn, Te, Hf; C=Nb, Sb, Ta; D=W)的超快合成。其中, 五元石榴石(Li_{6.6}La₃Zr_{0.4}Sn_{0.4}Sc_{0.4}Ta_{0.4}Nb_{0.4}O₁₂)在对称电池中具有最高的离子电导率(3.57×10⁻⁴ S cm⁻¹)和较低电子电导率(5.26×10⁻⁹ S cm⁻¹), 并且具有较高的临界电流密度(2.4 mA cm⁻²)。此外, 通过对石榴石体系的高通量筛选, 发现了熵稳定效应: 合成的石榴石固态电解质随着构型熵的增加逐渐稳定于立方相。这项工作展示了一种快速合成高熵立方相石榴石的节能方法, 展示了在广泛的多元素材料范围内快速和准确地探索具有特定目标组分的高熵能源材料的可能性。

A08-52

研究可解释的迁移学习在状态转换下的电池寿命预测问题

陈思慧^{1,2,3}、林天泽^{1,2}、Stephen J. Harris⁴、赵天寿^{2,3}、刘洋⁵、万佳雨^{*1,2,3}

1. 上海交通大学, 全球未来技术研究所
2. 南方科技大学, 机械与能源工程系
3. 南方科技大学, 碳中和研究院
4. 劳伦斯伯克利国家实验室, 储能和分布式资源部
5. 昆山杜克大学, 数据科学研究中心

在早期循环阶段预测电池寿命对研究人员和制造商检查产品质量和促进技术发展是至关重要的。机器学习已被广泛用于构建数据驱动的解决方案, 以实现高精度的预测。然而, 电池内部机制对多种因素都很敏感, 例如充放电协议、制造/存储条件、和使用模式。这些因素会引起状态转换, 从而降低数据驱动方法的预测精度。迁移学习是一种前景广阔的技术, 它能克服这一难题, 并通过综合利用各种来源的信息实现准确预测。因此, 我们开发了两种迁移学习方法: 贝叶斯模型融合和加权正交匹配追踪, 以战略性地结合

先验知识和目标数据集中的有限信息，从而实现卓越的预测性能。我们的研究结果表明，迁移学习方法通过适应目标域将均方根误差减少了 41%。此外，迁移学习策略识别不同电池组中有影响力特征的变化，因此从数据挖掘的角度解析了电池退化机制和状态转换的根本原因。这些发现表明，我们提出的迁移学习策略能够跨多个数据源获取知识，以解决专业问题。

A08-53

ESM Cloud Toolkit: 加速储能材料研发的云工具箱

许晶、肖睿娟*

中国科学院物理研究所

搜寻和设计新型材料在高性能储能器件的开发中扮演着至关重要的角色。在储能材料研发的过程中，不仅形成了丰富的研究成果，还产生了大量珍贵的科研数据。在人工智能技术高度发展的今天，我们希望能从这些针对特定问题的科研数据中获得更多的知识和经验。然而复用已有科研数据面临着许多挑战：① 科研人员大多习惯使用纸质媒介记录研究细节，相关信息难以归档、追溯；② 非结构化科研数据难以直接作为机器学习模型的输入，且其数据的完整性和正确性难以保证；③ 人工智能技术使用门槛高。

为了克服上述挑战，本工作结合实际的储能材料研发流程，开发了集成人工智能技术的储能材料云工具箱——Energy Storage Material Cloud Toolkit (简称 ESM 云工具箱)，旨在自动化记录、储存、再利用科研数据，让人工智能技术和自动化技术深度融合、加速储能材料研发进程，减少人工归档、处理科研数据的工作量，充分对已有科研数据进行再利用[1]。ESM 云工具箱的功能主要分为三大核心模块：理论计算模块、实验数据模块以及机器学习模块。其中，理论计算模块主要实现第一性原理计算任务提交、计算结果标准化收集及归纳功能；实验数据模块主要涵盖了常见电化学测试的数据后处理及数据标准化归档功能；机器学习模块主要涵盖了特征生成、模型训练以及模型部署的功能，用户可针对特定数据集自行训练机器学习模型，此外还集成了当前流行的机器学习势函数预训练模型，可实现一键微调预训练模型等任务。ESM 云工具箱的所有功能可以在由中科院物理所开发的物质科学电子实验室平台（MatElab）使用，仅需要在一台设备上完成配置，即可随时随地在任何可以登录网页的设备（手机、平板）上一键处理、查看自己的科研数据。

本工作开发的 ESM 云工具箱使用简单、具有可扩展性，能够降低人工智能技术在储能材料研发领域的应用门槛，让科研数据在大数据时代发挥更重要的作用，助力新能源材料的加速研发。

A08-54

高镍三元正极材料表面结构与反应动力学

陈立桅*

上海交通大学

高镍三元材料作为一类高比容量及高电压的正极材料，在动力电池领域占据了重要地位。这类材料在环境中表现出的不稳定性，特别是表面层间结构的退化及重构层的形成，会对其电化学性能造成显著影响。目前对于高镍三元正极材料在储存过程中失活的机制及其电化学性能退化的原因存在一定的争议，重构层对其反应动力学的具体影响也需深入探究。本报告将首先聚焦三元材料在环境中储存失效的机制，Li/H 交换是导致其环境储存不稳定的关键诱因；进一步讨论三元材料接触水后失效的电化学性能，重构层进一步退化成岩盐相及伴随的不利副反应是导致电化学性能恶化的根本原因；最后，探讨重构层对高镍三元材料电化学动力学的影响，为理解三元材料在充放电中的“假两相”行为以及其反应异质性提供新的视角。

A08-55

工况原子模拟研究锂硫电池单原子催化剂

程涛*

苏州大学

锂硫电池作为一种具有高达 2600 Wh/kg 理论能量密度的储能系统，展现出了在电动汽车和移动电子设备中的巨大应用潜力。然而，其商业化应用受到了正极材料中硫的氧化还原反应缓慢及多硫化锂中间产物溶解穿梭现象的显著限制[1]。近期，通过在正极材料中引入原子级分散的高效电催化剂，已被证明能显著提升锂硫电池的电化学性能。这些进展预示着单原子催化剂在提高电池性能中的巨大潜力，尽管其作用机制尚未被完全理解。针对这一挑战，我们开发了一系列原创的工况多尺度模拟方法 [2,3]，旨在揭示单原子催化剂对锂硫电池性能的影响机制。本研究不仅深化了对含硫物种反应机理和动力学的理解 [4]，也为其他多电子/多相储能体系中电催化剂的应用提供了新思路。我们的工作展现了工况多尺度模拟在解决储能材料科学中的复杂问题方面的重要价值，并为未来的储能技术研发提供了重要的理论支撑和技术指导。

A08-56**锂枝晶生长动力学的相场模拟**

洪子健*

Zhejiang University

锂金属电池以其高比容量和高比能量被誉为锂电池领域的“圣杯”，然而枝晶生长等仍是阻碍其实际应用的关键问题。在本研究中，我们构建了一个基于全开源软件 MOOSE 的相场模拟程序，并模拟了锂金属在电沉积过程中的微观动力学过程，阐明了枝晶生长背后的物理机制并设计了一些有望阻碍枝晶生长的结构。同时，将相场模拟与力、热、化学等外场耦合，研究电池在复杂物理环境中的微观机制。研究发现，锂金属沉积过程附着在负极附近的气泡对电池沉积动力学具有较大的影响，静态气泡会抑制锂离子传输，从而促进枝晶生长，而动态气泡则由于搅拌效应使得浓度趋向均匀，从而抑制枝晶生长。

A08-57**原位中子散射方法探索离子电池动态结构演变**

肖荫果*

北京大学深圳研究生院

中子具有高灵敏性和强穿透性等诸多特性，因此是研究能源材料微观结构和物理特性的独特探针。利用中子散射方法并依托国内外多个中子源装置，我们对一系列金属离子电池材料的结构缺陷和结构演变进行了精确的表征。基于离位和原位中子散射实验结果，建立了几种过渡金属氧化物正极材料体系的微结构在不同材料合成工艺以及不同充放电状态条件下的形成和变化规律。这些结果有助于进一步澄清金属离子电池正极材料结构演变与其性能之间的关联关系，对进一步提高电池循环稳定性和能量密度提供指导。此外，北京大学深圳研究生院目前正在依托中国散裂中子源这一国家级大科学装置，并与散裂中子源科学中心联合开展高分辨中子谱仪的设计和建设。该谱仪将能够通过高分辨中子粉末衍射方法对新材料、新能源和新医药等前沿研究方向涉及到的材料体系进行快速精确的长程和局域有序结构表征，从而推动诸多前沿研究方向关键新材料的研发。

A08-58**分子模拟和机器学习加速锂金属电池中氟代醚溶剂的筛选**

孔宪*、袁雪迎

华南理工大学

锂金属电池普遍认为是下一代储能技术，然而其内在不稳定性制约了其商业化进程。当前广泛应用于锂金属电池的电解液与锂金属电极不兼容是其不稳定性的主要原因。因此，新型电解液的开发对于实现下一代锂金属电池至关重要。作为多组分的混合物，候选电解液的数量庞大。依赖于常规的经验试错法进行电解液的开发会耗费巨大的人力物力。基于高通量分子模拟和机器学习筛选的技术当前已在诸多领域如药

物开发和蛋白设计取得显著效果。

在本工作中,我们利用分子模拟和机器学习来辅助电解液中氟代醚溶剂的理性设计。基于模板分子 1, 2-二乙氧基乙烷 (1,2-diethoxy ethane, DEE), 构建了包含其所有的 1 到 6 氟取代的氟代醚 (FDEE) 溶剂的结构性能数据库。综合量子化学、分子动力学和非平衡分子动力学模拟方法计算了所有 FDEE 的氧化还原稳定性、离子传递性能和粘度等指标。并利用机器学习的方法分析氟代位点和数量对各性质的影响规律。根据性能指标和机器学习结果,我们确定了 4 个综合性能优异的 FDEE 作为高性能电解液的候选溶剂。本工作发展的方法可以拓展到其他类别的电解液体系,因此对于加速电解液的开发过程具有重要的指导意义。

A08-59

计算指导下的卤化物固态电解质的离子输运与稳定性特性研究

朱一舟*

西湖大学

全固态锂离子电池是极有希望的下一代储能系统。固态电解质作为一个重要的组成部分,其开发和研究是其中的关键。卤化物的固态电解质具有优异的离子输运性质,宽的电化学稳定窗口,因而在近年受到了广泛的研究关注。原子尺度的模拟与计算可以从微观尺度上揭示材料中离子输运的微观机制,加深我们对材料的基础理解并提供新的设计改性思路。我们使用第一性原理计算的数据集训练了机器学习原子间作用势函数,并搭建了大的原子模型来研究 Li_3YCl_6 材料中的离子输运性质。 Li_3YCl_6 是一种典型的具有各向异性离子输运的模式材料。与过往的报道相悖,我们发现,近室温的温度区间内,具有较低的激活能的离子快速传输的 c 方向是决定离子输运的主要因素。c 方向的离子输运还表现出极强的协同输运效应,与此相对,ab 方向的离子输运则以单离子的跃迁为主要的输运模式。 Li_3YCl_6 在低温下会发生锂离子亚晶格的无序-有序相变,并伴随着激活能的显著上升。一定程度的 Y 晶格的无序化,或者 Li/Y 反位缺陷的引入可以有效抑制这一不利的相变的发生,从而提高材料在低温下的离子电导率。我们的这些理解为进一步优化具有各向异性离子输运的卤化物电解质提供了优化的策略和方向。

A08-60

高稳定性且高离子电导率的碱金属电池固态电解质计算研究

罗光富*¹、王丽娜^{1,2}

1. 南方科技大学材料科学与工程系
2. 中国福建光电信息科学与技术创新实验室

碱金属充电电池的固态电解质需同时满足与强还原性和强氧化性电极材料接触时的长期稳定性以及优异的碱金属离子电导率,但现有的材料体系往往难以同时满足上述要求。本项目提出利用沸石材料极高的天然稳定性,采用第一性原理计算方法从纳米多孔沸石材料中优选出具有高碱金属离子电导率的结构。为此,作者开发了可以搜索任意结构中三维离子扩散网络的新算法以及高精度机器学习力场,最终从沸石数据库中筛选出多种同时具有高稳定性和高碱金属离子传导率的沸石材料。

A08-61

基于第一性原理的半导体材料电子输运探索

周嘉炜*

香港大学

半导体材料是许多能源转换和电子器件的核心组成部分。电子输运性质是半导体材料至关重要的物理性质,对能源和电子器件的工作性能有着极大的影响。通过开发基于第一性原理的精确电子输运计算方法,我们可以更好地理解材料内电子输运的关键因素,有助于合理设计能源和电子器件,并加速新型半导体材料的发掘。我们基于微扰密度泛函方法发展了一系列计算方法,可以精确描述电子、声子和点缺陷之间的

相互作用，并且可以直接计算材料在本征和掺杂态下的电子迁移率和其他电子输运相关性质（如热电系数和电子热导率等）。在本次报告中，我们将主要介绍（1）这种计算方法对已知半导体材料中电子声子相互作用的进一步理解；（2）如何帮助我们发掘新型电子和空穴高迁移率半导体材料 - 立方砷化硼；（3）不同类型和带电态掺杂原子对电子输运的特殊影响；（4）以及该方法在发掘具有高热电功率因子的热电能源转换材料方面的应用。

A08-62**电化学储能材料计算与设计**

施思齐 (sqshi@shu.edu.cn)

上海大学材料科学与工程学院/材料基因组工程研究院

锂离子电池和钠离子电池等电化学储能体系的关键是材料。研发新材料的传统方法是试错法，从材料的发现到应用往往需要十几年，很难满足产业界对更高性能电化学储能体系的要求。因此，迫切期望从物理学、材料学、化学和数据等学科交叉的角度，有机地融合理论、计算和实验方法，理解电池材料中电子/离子输运协同调控、界面电化学稳定性等关键科学问题，为电化学储能新材料和新体系的设计提供理论支持，以加快新材料和新体系的研发速度。本报告将着重结合本人和合作伙伴开展的一些工作介绍近些年来在这方面的主要进展，并对今后跨尺度计算在电化学储能新材料和新体系研发中扮演的角色进行了展望。

A08-63**中子成像技术原位监测固态锂金属电池**

曹大显*

华南理工大学

全固态锂电池因其高能量密度和相较于传统锂离子电池的更高安全性获得了广泛关注，但面临着诸多挑战，包括界面兼容性、结构稳定性、锂枝晶抑制以及大规模制造等，采用先进的表征方法来深度解译全固态锂电池内部的内在机制是至关重要的。中子成像作为一种无损检测方法，可以对全固态锂电池进行原位可视化，可以为锂浓度动态变化、反应机制和传输限制等提供独到见解，对于推动高性能全固态锂电池的快速发展提供新的思路。本报告将分享中子成像技术在中子原位检测固态锂金属电池的研究工作。

A08-64**Identifying the active sites of nanocatalysts by atomic electron tomography**

Yao Yang*

Westlake University

Proton-exchange membrane fuel cells (PEMFCs) represent an attractive and sustainable power generation technology in automotive applications [1–3]. It could play an important role in utilizing hydrogen energy due to its high energy conversion efficiency, lower emissions, and quieter operation. The Pt alloy nanocatalysts are commonly used in cathode side to facilitate the sluggish oxygen reduction reaction (ORR) while reducing the cost of Pt metal. There have been intensive amount of theoretical, experimental and computational studies were performed on Pt alloy nanocatalysts [4-11]. However, the synthesis of high-performance Pt alloy nanocatalysts is not provided a practical and justifiable path for guidance yet, since identifying the active sites of alloy nanocatalysts remains a major challenge. This limitation is mainly due to an incomplete understanding of the three-dimensional (3D) atomic and chemical arrangement of different constituents and structural reconstructions driven by catalytic reactions [12-15]. Here we introduce a pipeline, based on atomic electron tomography (AET), to determine the electro-catalytic activity of each individual atomic site on the surface of Pt alloy nanocatalysts [16]. Taking PtNi and Mo-PtNi alloy nanocatalysts as examples, we achieved three-dimensional atomic structures

and chemical species of 17 nanoparticles by AET, which combines the aberration corrected high-angle annular dark field (HAADF) projection series and state-of-art reconstruction algorithm. We reveal the facet, surface concaveness, structural and chemical order/disorder, coordination number, and bond length with unprecedented 3D atomic detail. During the activation process, the Pt alloy nanocatalysts leak more Ni atoms and both the surface concaveness and disorderness become larger, which is consistent with the larger-scale experiment observation. Besides, we also find that Mo-PtNi nanoparticles have more disordered structure and chemical arrangements and can preserve more Ni atoms during activation process than the PtNi nanoparticles. Then the experimental 3D atomic coordinates are used by first-principles trained machine learning to identify the activity of each surface site on the nanocatalysts. The overall activities for different nanoparticles are consistent with the electrochemical measurements. By performing this pipeline, we can analyse the structure-activity relationship of heterogeneous nanocatalysts in single atomic level. For the case of PtNi and Mo-PtNi nanocatalysts, we formulate an equation named the local environment descriptor (LED) to effectively balance the strain and ligand effects and gain quantitative insights into the ORR active sites atomically. The equation is proved universal for both Pt and Pt alloy nanocatalysts. We expect this method could transform our fundamental understanding of the catalytic active sites on a wide range of different heterogeneous nanocatalysts and provide a guidance for the rational design of optimal nanocatalysts.

References

1. Debe, M. K. Electrocatalyst approaches and challenges for automotive fuel cells. *Nature*, 2012, 486: 43–51
2. Wang X. X. et al. Achievements, challenges and perspectives on cathode catalysts in proton exchange membrane fuel cells for transportation. *Nat Catal*, 2019, 2: 578–589
3. Kodama K. et al. Challenges in applying highly active Pt-based nanostructured catalysts for oxygen reduction reactions to fuel cell vehicles. *Nat Nanotechnol*, 2021, 16: 140–147
4. Stamenkovic, V. R. et al. Improved oxygen reduction activity on Pt₃Ni(111) via increased surface site availability. *Science* 315, 493-497 (2007).
5. Nørskov, J. K. et al. The nature of the active site in heterogeneous metal catalysis. *Chem. Soc. Rev.* 37, 2163-2171 (2008).
6. Greeley, J. et al. Alloys of platinum and early transition metals as oxygen reduction electrocatalysts. *Nat. Chem.* 1, 552-556 (2009).
7. Strasser, P. et al. Lattice-strain control of the activity in dealloyed core-shell fuel cell catalysts. *Nat. Chem.* 2, 454-460 (2010).
8. Calle-Vallejo, F. et al. Finding optimal surface sites on heterogeneous catalysts by counting nearest neighbors. *Science* 350, 185-189 (2015).
9. Zhang, L. et al. Platinum-based nanocages with subnanometer-thick walls and well-defined, controllable facets. *Science* 349, 412-416 (2015).
10. Escudero-Escribano, M. et al. Tuning the activity of Pt alloy electrocatalysts by means of the lanthanide contraction. *Science* 352, 73-76 (2016).
11. Kulkarni, A. et al. Understanding Catalytic Activity Trends in the Oxygen Reduction Reaction. *Chem. Rev.* 118, 2302-2312 (2018).
12. Tao, F. et al. Reaction-Driven Restructuring of Rh-Pd and Pt-Pd Core-Shell Nanoparticles. *Science* 322, 932-934 (2008).
13. Cui, C. et al. Compositional segregation in shaped Pt alloy nanoparticles and their structural behaviour during electrocatalysis. *Nat. Mater.* 12, 765-771 (2013).
14. Zugic, B. et al. Dynamic restructuring drives catalytic activity on nanoporous gold-silver alloy catalysts. *Nat. Mater.* 16, 558-564 (2017).

15. Jacobse, L. et al. Correlation of surface site formation to nanoisland growth in the electrochemical roughening of Pt(111). *Nat. Mater.* 17, 277-282 (2018).

16. Yang, Y. et al. Atomic-scale identification of the active sites of oxygen reduction nanocatalysts. *Nature Catalysis*, in press

A08-65

表征数据结合模拟计算定向优化阳离子无序氧化物正极材料

焦思晨, 孙毓健, 王雪龙*, 禹习谦, 李泓

中国科学院物理研究所, 北京市海淀区中关村南三街八号, 100190

北京清洁能源前沿研究中心, 北京市怀柔区雁栖经济开发区永乐北二街 EA 楼, 101407

E-mail: wangxuelong@iphy.ac.cn

提升能量密度是锂离子电池的主要研发目标之一, 开发高容量正负极材料是实现高能量密度锂离子电池的重要途径。近年来, 富锂阳离子无序岩盐 (DRX) 正极材料凭借其高容量, 低成本, 化学组分丰富等特点受到了广泛的关注和研究。由于 DRX 材料结构和组分的高度复杂性, 传统的实验表征方法, 如 X-射线和中子衍射, 难以精准解析阳离子无序氧化物材料的结构; 仅依赖原子尺度理论计算难以厘清材料电化学性能与组分-结构间的构效关系, 更缺乏直接实验证据的支持。阳离子无序氧化物正极材料的理性设计方案和性能调控策略缺少基于物理化学原理的指导。

本报告将介绍本课题组近期通过紧密结合先进表征、数据挖掘和理论计算, 围绕 DRX 材料开展的一系列研究工作[1-3], 首先建立了结合中子全散射表征技术和逆蒙特卡罗 (RMC) 模拟的研究方法, 实现了对 DRX 内复杂结构的定量统计和描述, 并进一步结合第一性原理密度泛函理论 (DFT) 计算, 初步建立起了 DRX 材料中组分-结构-性能之间的关系框架, 通过材料理性设计实现了定向的性能优化。

参考文献:

[1] Y. Sun, S. Jiao, et al. *J. Am. Chem. Soc.* 2023, 145, 21, 11717–11726.

[2] S. Jiao, Y. Sun, et al. *Adv. Energy Mater.* 2023, 13, 2301636.

[3] S. Jiao, Y. Sun, et al. *Energy Environ. Sci.* 2024, In resubmission.

A08-66

硅基薄膜负极的计算开发与储锂机制研究

林杰*, 王来森、谢清水、彭栋梁

厦门大学

硅基薄膜负极具有极高的体积比容量 ($\sim 834 \mu\text{Ah cm}^{-2} \mu\text{m}^{-1}$), 但是充放电时剧烈的体积变化导致其循环性能不佳, 目前主要通过结构设计、材料复合和界面改性等方法来改善该问题; 同时, 以硅基薄膜负极为研究对象, 能够准确、直观地研究纯电极材料 (无导电剂、粘结剂) 的电化学性能和反应机理。通过系统的理论计算和实验制备, 研究了不同结构、组分硅基薄膜负极的电化学性能差异, 探究其表界面反应机理和性能衰减机制, 旨在通过结构、组分等多重因素的协同调控, 制备出适用于薄膜锂电池的高性能硅基薄膜负极, 同时为粉末型硅基负极的设计和开发提供理论指导和实验依据。

A08-67

新型质子传导电解质 YbCoO₃ 的第一性原理研究

令狐佳珺¹、Mehwish Khalid Butt²、冯鹏²、杨科³、杨通³、王学智¹、车军伟⁴、杨明³、李致朋*²

1. 长安大学

2. 西北工业大学

3. 香港理工大学

4. 西安科技大学

固体氧化物燃料电池可不经燃烧将含氢燃料中的化学能直接转换为电能，效率高且无污染。其核心组件电解质要求材料具有良好的稳定性和高的离子电导率。新型质子传导型电解质中，常见的 Ba 基钙钛矿材料一方面存在稳定性问题，另一方面其电导率受氧空位浓度和杂质束缚作用的限制难以提升。最近，在含有过渡金属元素的铁铝酸钙矿石和钙钛矿材料中发现了极高的质子电导率，其中过渡金属元素起了关键的作用。本文通过第一性原理计算系统地研究了 YbCoO_3 材料的性能。该钙钛矿结构具有良好的热力学和化学稳定性，其半导体特性也能阻碍漏电流经过，特别是其高质子浓度和低质子迁移势垒预示着其高质子电导率。这些性能表明 YbCoO_3 作为燃料电池电解质的巨大潜力。本文的结果还表明，质子在氧离子之间的跃迁，不论是在八面体内还是八面体间，都需要缩短两个氧离子之间的距离，而这种局部畸变的幅度和难度以及 Co-H 之间的排斥力是决定跃迁能垒大小的重要因素。本文的研究可以加深对质子跃迁过程中局部结构变形的理解，促进对质子传导电解质的开发和应用。

A08-68**面向物理化学不均一性的二维恒流固态电池模型**

孙哲韬、薄首行*

上海交通大学

固态电池相比于传统锂离子电池，理论上拥有更高的安全性和能量密度。然而，由于不同物理化学场的强耦合，使用固态电解质替代液态电解质为固态电池系统引入了显著的复杂性。为了理解这些场（物理场）的演化并释放固态电池的潜力，理论方法必不可少。

在传统锂离子电池研究中，伪二维 (Pseudo 2D, P2D) 和单颗粒 (Single Particle, SP) 电池模型常用于电池性能预测和失效分析。然而，随着固态电池的发展，这些方法面临着新的挑战，需要对复杂界面进行精确描述并获得准确的场分布。为了克服这些挑战，恒电流反应下的二维或三维全电池模型变得至关重要。我们的研究将相场法与尖锐界面方法结合起来，对固态电池负极和正极的物理场与化学反应同时进行建模。这一举措帮助我们创建能够用于研究固态电池多物理场耦合与界面演化的真实二维 (Real 2D, R2D) 恒流反应模型。

A08-69**新型高离子电导氯化物固态电解质的第一性原理研究**

符晓、肖睿娟*

中国科学院物理研究所

固态电解质 (SE) 的开发是提高传统锂离子电池能量密度和安全性的有效途径。自发现具有较高的离子电导率和良好的化学稳定性的 Li_3YCl_6 电解质以来^[1]，氯化物电解质作为有前途的电解质受到了广泛的关注，其中 Li_3MCl_6 ($\text{M} = \text{Y, Er, In, Sc}$), LiMCl_4 ($\text{M} = \text{Al, Ga, In}$) 和 Li_2MCl_4 ($\text{M} = \text{Mg, Mn, V, Zn}$) 三种类型的电解质是已有广泛研究的氯化物电解质^[2]。探索新型结构并研究其离子传输机制对于氯化物固态电解质的发展至关重要。本工作利用高通量计算筛选将已有的钠离子化合物作为结构框架进行离子替换得到对应的锂离子化合物，通过键价 (BV) 方法初步评估离子输运性能，发现了具有低迁移势垒的 LiSbCl_6 (LSC)^[3]。通过进一步的计算和研究我们认为 P4/m 相 LSC 在继承了原始 NaSbCl_6 (NSC) 结构稳定性的基础上，改善了其中的锂离子迁移性能。ab initio 分子动力学 (AIMD) 结果显示 LSC 和 NSC 中的离子迁移势垒分别为 0.16 eV 和 0.19 eV，且 LSC 的 c 方向迁移势垒仅有 0.12 eV，通过锂的概率密度分布可以判断，其 c 轴方向的快速迁移是由与 NSC 不同的 2a 位置的低能间隙位所形成的。为了深入研究 LSC 中 c 轴离子运输的关键作用，本工作利用爬升图像轻推弹性带 (CI-NEB) 方法计算了锂离子在 LSC 中各种迁移机制的能垒，证明了多种传输机制共同作用促进了 c 轴的离子传输。除此之外，通过 CI-NEB 方法还研究了 SbCl_6

阴离子基团的运动对锂离子传输的影响。因此 LSC 优越的离子输运可以归因于两个主要因素：一是晶格锂位点与 c 轴上低能间隙位点之间的协同迁移，以及由多个低能缺陷产生引起的多种输运机制的协同作用；二是氯离子在 SbCl_6 八面体中心位置附近的振动在不影响整体结构框架的稳定性的基础上，促进了阳离子的传输。基于上述讨论，我们认为通过高通量筛选-替换策略得到的新型氯化物电解质 LiSbCl_6 有可能达到接近液态电解质的离子电导率，有望进一步的扩展氯化物电解质体系。

参考文献：

[1] T. Asano, A. Sakai, S. Ouchi, M. Sakaida, A. Miyazaki and S. Hasegawa, *Adv. Mater.*, 2018, **30**, 1803075.

[2] X. Li, J. Liang, X. Yang, K. R. Adair, C. Wang, F. Zhao and X. Sun, *Energy Environ. Sci.*, 2020, **13**, 1429–1461.

[3] X. Fu, Y. Wang, J. Xu, Q. Yang, H. Mao, R. Xiao and H. Li, *J. Mater. Chem. A*, 2024, **12**, 10562-10570

A08-70

空间解析过冷电解液中的有序结构

谢宇俊*

上海交通大学

跨越多个长度尺度理解材料的结构秩序对于控制材料的物理特性至关重要。在许多非晶态固体中，原子的相关性在小于 5 埃的短程秩序（SRO）范围内被发现。越来越多的实验证据证实了 SRO 的存在以及其对电导、离子传输、机械强度和晶化过程的强烈影响。然而，尽管用 x 射线在液体中观察到结构有序性已经有几十年的历史，但在相似的空间尺度下，直接使用透射电子显微镜（TEM）观察 SRO 在液体中的存在尚未实现。这个挑战在一定程度上是由于液体对电子束的高灵敏度和通常组成液体的低原子序数元素的弱散射所致。到目前为止，液体结构的研究仍然局限于在相对大的材料体积上平均的散射测量。对液体中结构秩序的程度和空间范围缺乏信息，极大地阻碍了微观结构和 SRO 形成条件的阐明，这些往往影响到液体溶液中的关键过程，如成核、自组装和相分离，特别是在热化学非平衡状态下。

液态电解质在锂离子电池中代表了一个重要的材料类别，其宏观性质与其组成部分的微观结构，即盐离子和溶剂分子密切相关。例如，在高盐浓度电解质中，盐阳离子和阴离子倾向于高度结合并形成超结构，从而改善界面稳定性和库仑效率；这种超结构也导致了类似于 0 °C 以下锂离子电池低温性能的降低离子导电率和增加黏度。这些研究结果强调了需要了解分子水平上的结构顺序以及在介观尺度上的空间范围。此外，结构顺序的形成条件对于在各种工作条件下理性设计功能电解质至关重要。能够以高空间分辨率表征液态电解质的基础结构对于提高未来电池性能至关重要。

A08-71

固态电解质离子输运的研究

肖睿娟*、王宇琦、许晶、符晓、杨其凡

中国科学院物理研究所

可充放的二次电池已应用于我们日常生活的方方面面，应用需求对其能量密度、充放电速率、循环寿命和安全性提出了进一步的要求，开发适用于下一代固态二次电池且综合性能优异的固态电解质材料是提升电池器件性能的关键之一。离子导电性是描述固态电解质材料中离子扩散现象最常采用的物理量，在相同温度下，离子导电性主要取决于迁移离子的浓度和离子迁移激活能。精确的离子迁移激活能计算需要使用第一性原理分子动力学模拟或轻推弹性带方法，计算量大且耗时。通过运用新兴数据技术，我们发展了基于多精度传递的高通量计算流程和基于机器学习的离子迁移势垒评估模型[1]，有效将其应用于固态电解质离子输运性质的研究，并基于团簇搭建和输运机制设计了几种新的固态电解质材料[2-3]。除了常见的晶态结构的固态电解质，我们还采用计算模拟的方法研究了非晶态固体电解质中的离子传输过程，在无序结构中观察到其类似于聚合物的链段连接方式，以及离子通过链内迁移和链间跳跃的方式实现离子传输的过

程[4]。

References:

1. Y. Q. Wang, S. Y. Wu, W. Shao, X. R. Sun, Q. Wang, R. J. Xiao and H. Li, *Journal of Materiomics*, 8,1038 (2022)
2. J. Xu, Y. Q. Wang, S. Y. Wu, Q. F. Yang, X. Fu, R. J. Xiao and H. Li, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 15, 21086 (2023)
3. X. Fu, Y.Q.Wang, J. Xu, Q.F. Yang, H.C. Mao, R.J.Xiao and H. Li, *Journal of Materials Chemistry A*, 12, 10562 (2024)
4. T. Dai, S. Y. Wu, Y. X. Lu, Y. Yang, Y. Liu, C. Chang, X.H. Rong, R. J. Xiao, J. M. Zhao, Y. H. Liu, W. H. Wang, L.Q. Chen and Y.-S. Hu, *Nature Energy* 8, 1221 (2023)

A08-72

高安全锂电池隔膜

徐桂银*、朱美芳

东华大学

锂电池在近几十年取得了重大进展，并对便携式电子产品、电动汽车和大规模能量存储做出了巨大贡献。鉴于电池事故频繁发生，电池安全问题严重而紧迫。作为电极之间的电子屏障和离子通道，隔膜是必不可少的关键材料¹⁻³。尽管它不涉及电化学反应，但隔膜能够影响离子迁移能力、倍率性能等，尤其是锂电池安全性能。因此，迫切需要开发功能隔膜，保障锂电池能够持续、安全地工作。我们团队主要基于有机-无机复合功能隔膜改善锂电池、锂硫电池性能的研究，制备具有锂离子导通能力强、耐高温、机械性能优异、热传导速度快的高安全新型隔膜复合材料，借助原位/非原位表征方法深入阐明循环过程中隔膜的结构演变机制，揭示材料微结构、表界面性质与电化学性能之间的构效关系。本次会议交流主要围绕纤维隔膜材料在能源方面的应用展开，也将对锂电隔膜材料在该领域的应用前景、面临挑战和回收利用方向进行展望。

参考文献:

- [1] Lagadec, M.; Zahn, R.; Wood, V. *Nat. Energy*, **2019**, *4*, 16-25.
- [2] Zhu, D.; Xu, G.; Barnes, M.; Tseng, C.; Zhang, Z.; Zhang, J.; Li, Y.; Zhu, Y.; Khalil, S.; Rahman, M.; Verduzco, R.; Ajayan, P. *Adv. Funct. Mater.*, **2021**, *31*, 2100505.
- [3] Xu, G.; Yan, Q.; Wang, S.; Kushima, A.; Bai, P.; Liu, K.; Zhang, X.; Tang, Z.; Li, *J. Chem. Sci.*, **2017**, *8*, 6619-6625.

A08-73

基于多因子协同调控的固态电解质设计

朱虹*

上海交通大学

固态电解质中金属离子的传导受诸多因素影响，例如与晶体拓扑结构相关的阴离子骨架结构，与晶格动力学相关的软晶格，与电子结构相关的低阴离子电荷等。目前，单一因子对离子传导的影响规律往往存在体系依赖性以及片面性，各因子的耦合交互作用也有待深入挖掘。本报告将重点介绍如何运用材料基因组方法，揭示结构、电子、声子等因素对离子传导动力学的协同作用机制，指出低库伦作用、软晶格等传统固态电解质设计原则的局限性，提出超离子导体的多因子协同调控策略，并介绍基于这些认识所设计和预测的新型固态电解质材料。

A08-74

次电池关键材料设计与界面科学

王任衡*

深圳大学

基于高性能锂二次电池材料设计和界面科学行为，从正极材料的改性、功能电解液的开发以及新型负极材料的设计等方面，进行了探究。首先提出了多物理场稳定界面新策略；其次，通过优化电解液改善锌界面新体系；最后，创制了抑制锂界面枝晶新方法。

A08-75

人工智能设计锂电池电解液

陈翔*

清华大学

锂电池作为先进储能技术代表之一，在电动汽车、消费电子器件、移动通讯、无人机等领域中取得了广泛的应用，极大地促进了当代社会智能化、便携化和多元化发展，也是我国实现“碳中和”目标、构建可再生能源体系的关键技术之一。电解液是电池的重要组成部分之一，发挥导通离子、绝缘电子的作用，被形象地誉为“电池血液”，很大程度上决定电池的实际电化学性能。探究锂电池电解液微观化学机制、理解电解液材料的工作原理和构效关系，对构建下一代高比能电池体系具有重要的科学价值和实践意义。

本报告将围绕理解电解液溶剂化学原理和机器学习设计先进电解液研究展开。具体而言，结合第一性原理计算和分子动力学模拟等多尺度模拟方法探究电解液溶剂化学规律，发现离子-溶剂结构的形成是影响电解液界面稳定性的关键因素，从而建立离子-溶剂化学模型；发展介电常数、粘度等多种电解液物性预测方法，可以精准预测设计电解液所需的关键物理化学性质；集成多种物性计算方法和高通量计算，搭建电解液大数据库，包括 20 万种分子结构和 20 余种电解液性质；基于所构建的电解液大数据库，发展机器学习学习模型，定量关联电解液分子结构与理化性质，从而实现电解液分子的高通量筛选与反而设计，得到了十余种新分子体系，进一步开展实验验证。以上研究内容构建了电解液大数据库，发展了人工智能设计先进锂电池电解液的新方法，在上亿分子空间实现了电解液分子的快速、精准设计，推动了下一代高比能电池的实际应用，为实现我国“双碳”目标提供关键技术支撑。

A08-76

功能型硫银锗矿电解质设计及固-固界面调控构筑高性能全固态电池

余创*

华中科技大学

随着交通电气化和分布式储能市场的快速增长，基于液态电解液的传统锂离子电池体系已经不能满足对高安全性、高能量密度、低成本及更长循环寿命的迫切要求。采用液态电解液的锂离子电池存在易泄漏、易腐蚀、易燃烧等安全隐患，而高能量密度要求必然造成安全问题更加突出，因此提高锂电池本征安全性其在规模化储能中的应用至关重要。将液态电解液替换为不可燃性固态电解质构建而成的全固态电池具有高安全、高能量/功率密度、长寿命、低成本、环境适应性及更容易回收，被视为解决目前锂离子电池安全性问题的终极方案。锂硫银锗矿基电解质 $\text{Li}_6\text{PS}_5\text{X}$ ($\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}$) 因其高室温锂离子导电率 ($10^{-3}\sim 10^{-2} \text{ S/cm}$) 和低成本在众多电解质中最具产业化前景。除了高导电率和低成本的电解质，要实现实用化的硫化物基全固态锂电池仍面临许多挑战，如化学/电化学稳定性、与电极材料和锂金属的兼容性、热稳定性、成本等。本研究研究了基于锂硫银锗矿固态电解质的全固态电池的界面离子传导，为设计高性能和环境适应性好的全固态锂硫电池奠定基础。

A08-77

高比能锂电池力-化学失效机理及调控策略

许荣*

西安交通大学

使用高比容量电极是提高锂电池能量密度的一个有效途径,然而高比容量电极材料在循环中常伴随较大的体积变化,易引起电池力-化学失效,影响其稳定性与安全性。为解决这一问题,我们开发了一系列原位表征方法和力-化学耦合模型,揭示了高比容量电极内部电化学反应(扩散、反应等)与力学响应(变形、受力、破坏等)的关联关系,为锂电池力-化学失效的起源及其对电池性能的影响提供了机理性解释。进而,针对全固态锂电池电极与电解质变形失配引起的界面失效问题,我们基于力学指导下的材料/结构设计,构筑了新型全固态锂电池,通过调控电极与电解质界面处的蠕变和电化学反应以稳定其界面形貌,使其循环性能得到显著提升。

A08-78

钠离子电池层状氧化物正极:相转变机制、空气稳定性、高能量密度

肖遥*

温州大学化学与材料工程学院

钠资源丰富且分布广泛,钠离子电池在智能电网以及大规模储能等领域中具有广阔的应用前景,其经济价值和战略意义重大。相比于其他钠离子电池正极材料,层状过渡金属氧化物具有制备工艺简单、比容量高、离子电导率高的优势,是当前最具有应用前景的正极材料之一。然而,在实际应用中,层状氧化物正极材料仍存在一些关键性的基础科学问题:钠空位有序重排,复杂的多相转变以及空气稳定性等。本报告主要从相转变机制、空气稳定性和高能量密度三个方面展开,借助先进的原位光学与谱学表征技术以及集成功率学、电学和热学手段探究钠离子存储机制以及反应特性。重点探讨钠离子电池在实验室研究与大规模生产中的融合问题以及未来钠离子电池的水系涂布及回收,旨在进一步降低生产成本、提升电池性能,推动其在智能电网、工业储能以及低速电动汽车等领域的商业化和规模化应用,助力实现碳达峰碳中和目标。

A08-79

预碱金属化负极在固/液二次电池中的应用研究

赵婕*

Fudan University

开发高容量的负极材料是提高动力电池能量密度的必要条件。合金负极是最有前途的新一代负极材料之一,但负极侧没有预存储的锂或钠,单体能量密度受到低容量正极材料的限制。最近,碱金属作为一种低电位高容量的负极受到了广泛的关注,但有着高反应活性和不可控枝晶生长等问题。首次提出以安全高容量的锂合金/石墨烯箔作为锂箔的替代品,将紧密堆积的锂合金(Li_xM , $\text{M} = \text{Si}, \text{Sn}, \text{Al}$ 等)纳米颗粒包裹在石墨烯片层中,制备了一系列自支撑的锂合金/石墨烯箔。石墨烯的疏水性、不透气和导电性,使得锂合金/石墨烯箔在空气环境和电化学反应中均具有良好的稳定性。因为具有更高的化学活性,钠金属负极相比于锂金属问题更为严重。将钠锡合金与新合成的反钙钛矿型固体电解质相匹配, $\text{Na}_x\text{Sn}|\text{Na}_2\text{BH}_4\text{NH}_2|\text{Na}_x\text{Sn}$ 对称电池在 0.1 mA cm^{-2} 的电流密度下循环使用了 500 小时。

A08-80

钠/镁金属负极关键材料设计及电化学性能研究

瞿佰华^{1,2*}, 王敬丰^{1,2}, 潘复生^{1,2}

1 重庆大学材料科学与工程学院, 重庆市沙坪坝区沙正街 174 号, 400044

2 重庆新型储能材料与装备研究院

*Email: bhqu@cqu.edu.cn

储能技术的诸多特性使其在电力系统的发、输、配、用及调度等各个环节都具有广泛应用前景。锂离子电池是目前最成熟的电化学储能技术，但是锂离子电池面临资源和安全两大问题，发展低成本、高安全和金属资源丰度的二次电池是解决锂离子电池面临资源和安全两大问题的关键。钠和镁元素在地壳丰度远远高于锂资源，近年来，新型钠/镁二次金属电池引起了广泛的关注。本报告聚焦基于丰度元素的钠/镁二次电池体系，将从钠/镁金属负极关键材料微纳界面调控及电化学性能优化，建立了金属负极微纳结构调控策略与电化学性能间的构效关系，探索了协同提升钠/镁金属极材料的电化学性的有效策略，为构筑低成本和高安全钠/镁金属二次电池提供理论基础。

参考文献：

- [1] Tiantian Wen, Yujie Deng, **Baihua Qu***, Guangsheng Huang, Jiangfeng Song, Chaohe Xu, Aobing Du, Qingshui Xie, Jingfeng Wang, Guanglei Cui, Dong-Liang Peng, Xiaoyuan Zhou*, Fusheng Pan*, Re-envisioning the Key Factors of Magnesium Metal Anodes for Rechargeable Magnesium Batteries, *ACS Energy Letters*, 2023, 8, 4848-4861
- [2] Menghong Li, Guanjie Lu, Weikang Zheng, Qiannan Zhao, Zhipeng Li, Xiaoping Jiang, Zuguang Yang, Zongyang Li, **Baihua Qu***, Chaohe Xu*, *Advanced Functional Materials* 2023, 33, 2214759.
- [3] Tiantian Wen, **Baihua Qu***, Shuangshuang Tan, Guangsheng Huang*, Jiangfeng Song, Zhongting Wang, Jingfeng Wang, Aitao Tang, Fusheng Pan*, *Energy Storage Materials*. 2023, 55, 816.
- [4] Jin Wang, Zhixiao Liu, **Baihua Qu***, Zhipeng Li, Yiming Zhang, Chunliu Xu, Zhao Chen, Qingshui Xie, Ming-Sheng Wang, Miao Lu, Junmei Zhao*, Jingfeng Wang, Dong-Liang Peng, Fusheng Pan, Yong-Sheng Hu*, *Energy Storage Materials*. 2023, 59, 102793.

A08-81

高性能钠离子电池磷酸盐正极材料的研究

郭晋芝、吴兴隆*

东北师范大学

对于钠离子电池正极材料而言，钠超离子导体(NASICON)磷酸盐正极材料具有优异的结构稳定性、高安全性和放电/充电过程中体积变化小等优势而备受关注。然而，该类材料仍然面临着电子导电性低、循环稳定性差以及多电子转移导致的复杂相变等问题，限制了其实际应用。因此，激发材料的氧化还原活性、调控反应机制对于改善磷酸盐正极材料的电化学性能具有重要意义。

A08-82

芳纶基固态电解质的构筑及性能研究

刘建伟¹、张亚婷¹、延卫²、丁书江^{*2}

1. 西安科技大学

2. 西安交通大学

锂电池因具有循环寿命长、能量效率高、无记忆效应等优势，在各类电子设备和新能源汽车市场中有广阔的应用前景。其中，隔膜作为锂电池的重要组成部分，对电池的安全性至关重要。目前，商业聚烯烃隔膜熔点低及机械强度差，在高温环境下易收缩，导致电池短路甚至引发火灾。因此，耐热性好、性质稳定的芳纶材料就成为实现高容量、高安全锂电池体系的理想替代选择。本报告以开发一种高安全性固态凝胶电解质为导向，利用静电纺丝技术联用不同后处理技术，开发出系列 MOFs 改性芳纶纳米纤维柔性凝胶电解质及 LAGP 复合芳纶基柔性固态电解质，分析了其对锂离子传输、锂枝晶生长和多硫化物穿梭的作用机制，为开发新型柔性芳纶基固态电解质提供了一定的理论指导和实验基础。

A08-83

金属电池界面化学行为研究

王骞*

太原理工大学

当下，锂离子电池在消费类电子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，现阶段的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。

A08-84

基于两性离子聚合物电解质固态电池研究

王师*

南京邮电大学

为解决锂枝晶问题，人们做出了各种努力，如引入电解添加剂、优化电极、改进隔膜、构建人工固态电解质界面 (SEI)、设计新型固态电解质等。这些方法虽然极大地推动了锂金属电池的发展，但大多数策略都是为了在电极表面均匀沉积 Li^+ ，而忽略了对系统中阴离子的调节。根据 Chazalviel 的空间电荷理论，锂成核点的突起不仅因阴离子耗尽而产生的电场远高于锂表面的其他部分，从而吸引了更多的 Li^+ ，促进了锂在尖端的生长，而且因其高曲率而为 Li^+ 的不均匀沉积提供了一个大的表面，进一步加速了锂枝晶的生长。因此，除了调节 Li^+ 的分布外，如何实现对阴离子分布的有效调节是有效抑制锂枝晶的关键。由阳离子和阴离子分子在主链或侧链上组成的两性离子聚合物不仅可以作为同时与锂离子和相应的阴离子作用，而且由于两性离子具有较大的偶极矩，还能增强离子导电性。然而，多数两性离子聚合物链段通常是刚性的，导致两性离子聚合物电解质通常太硬，无法与电极充分接触，这可能导致高界面电阻和电池有限的寿命。如何设计两性离子聚合物，有效平衡其强度、柔性和离子导电性仍是一大挑战。

我们从渔网独特的网状几何结构和可同时增强材料强度和变形性的结状纤维结构中获得启发，提出了在聚两性离子电解质中引入新型交联剂和弹性聚合物，从而构建高强度、超柔性的聚合物电解质。两性聚离子电解质骨架可以协同调节体系中 Li^+ 和阴离子的分布，从而实现 Li^+ 的稳定沉积，实现无枝晶的固态电池。相关研究为设计和合成具有阳离子-阴离子协同调节功能的高性能 LMB 电解质提供了新的视角。

相关论文：

1. Dendritic Solid Polymer Electrolytes: A New Paradigm for High-Performance Lithium-based Batteries, *Advanced Materials*, 2023, 35, 35, 2303355. (通讯)
2. Designing Polymer Electrolytes via Ring-Opening Polymerization for Advanced Lithium Batteries, *Adv. Energy Mater.* 2024, 14, 3, 2302876. (第一作者)
3. In Situ Construction of Zwitterionic Polymer Electrolytes with Synergistic Cation–Anion Regulation Functions for Lithium Metal Batteries, *Adv. Funct. Mater.* 2023, 34, 2307248. (通讯)
4. Recent Development in Topological Polymer Electrolytes for Rechargeable Lithium Batteries, *Adv. Sci.* 2023, 10, 2206978. (通讯)
5. In-Situ Construction of Ceramic-Polymer All-Solid-State Electrolytes for High-Performance Room-Temperature Lithium Metal Batteries, *ACS Mater. Lett.* 2022, 4, 1279. (通讯)

A08-85

聚酰亚胺基粘结剂在硅碳负极中的应用及影响机制

张强^{*1}、于毓秀²、刘耀东²

1. 中北大学

2. 中国科学院山西煤炭化学研究所

硅材料作为锂离子电池负极材料，具有超高的理论比电容、较低的工作电位以及丰富的储量等优点，是非常有应用前景的下一代商用负极材料。但由于硅在锂离子嵌入/脱出过程中会产生巨大的体积膨胀（300%），容易引起电极结构破坏，导致循环性能差。作为电极的重要组成部分，聚合物粘结剂在提高硅负极的循环稳定性方面展现着关键作用。然而，在多功能硅负极粘结剂的开发和粘结剂的作用机理分析方面仍是需要亟待解决的挑战。本文通过改善的化学亚胺化法成功制备了一种由双氨基硅氧烷改性的部分酰亚胺化聚酰胺酸聚合物粘结剂(S-PA)。S-PA 粘结剂在 0.5 C 高电流密度下具有 2736 mAh g⁻¹ 的高比容量，循环 200 圈后容量保持率高达 84%，以及 87% 的高首次库伦效率，显示出了巨大的应用潜力。并通过系统研究有机硅含量和环化程度对聚酰亚胺基粘结剂性能的影响，探讨了粘结剂的作用机制及构效关系，为硅负极粘结剂结构优化提供了方向。

A08-86**通过多功能电解液添加剂的新颖界面设计实现稳定的锌金属负极**梁振业¹、李超²、曾林²、韩佳甲³、万佳雨^{*1}

1. 上海交通大学溥渊未来技术学院

2. 南方科技大学机械与能源工程系

3. 厦门大学材料学院

可充电水系锌电池(RAZBs)因其本质安全、经济高效且环保等特点，在储能系统中具有广阔的前景。然而，枝晶和副反应在循环过程中的持续发生限制了 RAZBs 的可逆性和规模化应用。由于锌在常规水性电解质中不均匀的锌成核和副反应，导致副产物的形成并且形成枝晶。我们报道次氨基三乙酸(NTA)作为一种高效的功能添加剂，可以优先吸附在锌表面，避免锌和水分子之间的直接接触，从而显著减轻腐蚀。因此，这种清洁、受保护的锌表面可以促进均匀的锌电镀/剥离。此外，吸附的 NTA 分子可以吸引水分子，促进 Zn²⁺ 的脱溶剂化，加速 Zn²⁺ 的传递，实验和计算均也证实了这一点。更惊人的是，仅痕量的 NTA(0.15 wt%)就足以形成稳定的电极/电解质界面，将腐蚀速率从 3.63 mA cm⁻² 降低至仅 0.22 mA cm⁻²。在对称电池中这种稳定的界面能够在 5 mA cm⁻² 和 0.5 mAh cm⁻² 下实现高度可逆的锌剥离/电镀，稳定循环约 2100 小时，并在锌铜电池的 800 个循环中还实现了 99.40% 的高库伦效率。这项研究为通过添加高效、多功能的电解质添加剂来实现 RAZBs 的高度可逆锌负极提供了新的观点，其设计原理可以推广到许多可充电电池系统。

A08-87**锂-氯气二次电池**

陈维*

中国科学技术大学

高能量密度电池体系的开发至关重要。本报告中，我将介绍一种锂-氯气二次电池新体系，通过正极材料的开发和优化，锂-氯气二次电池的性能得到大幅提升，但依然存在诸多问题。对锂-氯气二次电池的进一步探索将促进其在高能量密度电池领域的发展。

墙报**A08-P01****基于阴离子动力学的新反钙钛矿固态电解质设计**

官朝红、朱虹*

钠反钙钛矿超离子导体, 因其具有良好的结构容忍性与易合成性, 被认为是极具竞争力的固态电解质材料。但较低的离子电导率限制了钠反钙钛矿的进一步应用, 亟需探索未知的反钙钛矿相空间, 以实现电导率的有效提升。因此, 本次工作结合粒子群优化算法与高通量第一性原理计算, 设计具备阴离子旋转动力学的新型反钙钛矿固态电解质。结果表明阴离子位点互换与阴离子团簇的引入能在兼顾材料稳定性的同时提升离子电导率, 如设计的 Na_3BrSO_4 , 其理论室温离子电导率为 39 mS/cm , 相比于 Na_3OCl 有着数量级的提升。此项工作突出了阴离子旋转动力学在促进离子扩散上的重要作用, 为超离子导体离子电导率的进一步改进提供基于阴离子动力学的理论指导。

A08-P02

$\text{LiM}(\text{SeO}_3)_2$ 中特殊声子模式与锂离子迁移的相互作用

欧阳润昕、朱虹*

上海交通大学密西根学院

锂离子扩散本质上是一个热激活的离子跳跃过程。近期, 软晶格、非谐振声子和明轮机制被提出可能有利于离子传输, 但针对迁移离子与阴离子振动耦合的认识仍非常有限。在 $\text{LiM}(\text{SeO}_3)_2$ ($\text{M}=\text{Al}$ 、 Ga 、 In 、 Sc 、 Y 和 La) 材料体系中存在两种氧离子, 分别是边共享和角共享氧离子, 探究不同连接方式的阴离子振动和锂离子迁移的交互作用或能提供离子传导机理认识的新策略。本文中, 我们探讨了 $\text{LiM}(\text{SeO}_3)_2$ 的离子导电性、稳定性和晶格动力学。我们详细研究了 $\text{LiM}(\text{SeO}_3)_2$ 非谐和谐振声子贡献, 以及锂氧多面体中边共享或角共享氧离子振动对锂离子扩散的影响。由于锂离子与边共享氧离子之间的原子相互作用更强, 使得边共享氧离子振动为主的声子模式对锂迁移的贡献大于角共享氧离子。随着 M 从 La 变为 Sc , 材料的刚度增加 (更高的整体声子带中心), 但边共享氧离子的声子带中心降低, 且非谐性增加, 同时锂扩散的活化能降低。因此, 在设计全固态电池的锂离子超导体时, 重点不应仅仅放在整体晶格的柔软性上, 而应降低影响锂离子扩散的关键声子频率, 并增强材料非谐性。

A08-P03

构建拓扑自适应的固态电解质界面实现高度可逆的锌负极

闫童、宋慧宇*

华南理工大学

水系锌离子电池因其高理论容量、资源丰富和低成本等优点备受瞩目。然而, 水诱导的析氢和腐蚀等副反应持续发生, 导致锌负极的可逆性降低和循环寿命缩短。在循环过程中, 负极-电解液界面 (AEI) 上的钝化层易于与动态变化的锌金属表面分离或断裂, 从而暴露出新鲜锌, 进一步与水发生反应。这最终导致钝化层变得厚实和松散, 造成库仑效率降低和循环性能下降。此外, 锌离子优先在锌表面的凸起或破裂处沉积, 导致枝晶生长并对隔膜造成损伤, 最终导致电池短路。目前的研究重点是通过添加剂在锌负极上促进固体电解质界面相 (SEI) 的形成, 以抑制相关的副反应。SEI 的形成与 AEI 上的电双层 (EDL) 结构密切相关, 因为锌离子的沉积/剥离和不希望的副反应都发生在 EDL 处。因此, 通过引入添加剂来调节 EDL 的结构是实现理想 SEI 的关键因素。此外, 了解 SEI 的力学行为至关重要, 因为它决定了 SEI 对锌金属负极体积变化、断裂或变形引起的应力响应。在本研究中, 我们引入 L-谷氨酰胺 (Gln) 作为电解液添加剂来调节 EDL 吸附环境, 并原位生成由 ZnS 和 Gln 相关物种组成的混合型 SEI。纳米压痕测试表明, 该混合型 SEI 具有低模量和低硬度的特性, 并具有出色的形状恢复能力, 在抑制副反应的同时能够适应锌离子沉积/剥离过程中的体积变化。因此, Zn/Zn 对称电池在扣式电池中表现出了长达 4000 小时的超长循环寿命, 在软包电池中展现出了高达 18000 mA h 的累积容量。更重要的是, 在 N/P 比为 5.2、4.9、3.5 和 2.4 时, $\text{Zn}/\text{NH}_4\text{V}_4\text{O}_{10}$ 全电池也进一步证明了该策略的优越性。

A08-P04

钠离子固态电解质的超快合成

杨林¹、左达先¹、万佳雨^{*2}

1. 南方科技大学
2. 上海交通大学

NASICON 结构的固态电解质 (SSE) 被认为是钠固态金属电池 (NaSMB) 的一种极具潜力的材料。然而, 目前的合成方法往往劳动密集且效率低下, 需要消耗大量的能量和时间。在此, 我们利用超快高温合成 (UHS) 技术从混合前驱体粉末直接合成了 NASICON 型固态电解质, 将其合成时间从数小时缩短到仅几秒。在这项工作中, 我们成功地证明了使用 UHS 方法快速制备 NASICON 型固态电解质的可能性, 并分析了其反应途径。我们的实验表明, 当不添加额外的锆位掺杂元素时, NASICON 型固态电解质不可以被超快合成。进一步实验和分析表明, 当 Tm、Yb 和 Lu 等特定元素被掺杂时, 这些选定的元素可以帮助形成催化 NASICON 相形成的中间相。我们认为, 具有 Na₃PO₄ 结构的中间体在 NASICON 型 SSE 的快速合成过程中发挥了关键作用, 最终形成了最终的 NASICON 相。此外, 我们的实验表明, UHS 快速合成的 Na_{3.3}Zr_{1.7}Lu_{0.3}Si₂PO₁₂ (NZLSP) SSEs 的室温离子电导率几乎是 NZSP SSEs 的三倍。这项研究为精确和有针对性地合成复杂氧化物固态电解质提供了新的见解和验证。

A08-P05

用于可解释的少样本电池寿命预测的半监督学习

陈思慧²、郭南麟¹、陶俊¹、刘洋³、万佳雨^{*2,4}、李昕³

1. 复旦大学, 微电子学院, 集成芯片与系统国家重点实验室
2. 南方科技大学, 机械与能源工程系
3. 昆山杜克大学, 数据科学研究中心
4. 上海交通大学, 全球未来技术研究所

准确预测电池寿命对于确保电池的及时维护和安全至关重要。 尽管数据驱动的方法已经取得了显著的进步, 但它们的模型准确性往往受到标记数据稀缺的阻碍。 为了应对这一挑战, 我们开发了一种名为部分贝叶斯协同训练 (PBCT) 的半监督学习技术, 增强了电池寿命预测的建模。 利用低成本的无标签数据, 我们的模型提取隐藏信息, 以提高对底层数据模式的理解并实现更高的寿命预测精度。 PBCT 的寿命预测精度比现有方法高出 21.9%, 且数据采集的开销可以忽略不计。 此外, 我们的研究表明, 将无标签数据纳入训练过程可以帮助发现影响电池寿命的关键因素, 而仅使用有限数量的有标签数据可能会忽略这些因素。所提出的半监督方法揭示了高效且可解释的数据驱动电池状态估计的未来方向

A08-P06

锂离子电池用 LiCoO₂ 正极微波加速直接再生研究胡雪山、尹云超、李超、万佳雨^{*}

上海交通大学

回收废旧锂离子电池是当今低碳环保工作不可或缺的一部分。直接再生废旧锂离子正极材料的概念因其环境可持续性、经济可行性和回收材料的一致性能而得到普遍认可。本研究工作提出了一种利用超快微波技术直接再生废钴酸锂(LCO)正极材料的高效、无损方法。与传统基于炉烧的工艺相比, 这种方法显著缩短了再生时间: 修复时间从数小时缩短至 300 s。实验中混合锂源的废旧 LCO 进行三次微波加热循环(温度约 1350 K), 便可实现 LCO 直接再生, 产生 140.8 mAh g⁻¹ (0.2 C)的放电比容量, 并且在 300 圈后仍具有良好的循环稳定性 (124.0 mAh g⁻¹)。考虑到进一步的环境和经济效益, 超快微波技术在直接再生正极材料方面具有科学前景, 同时为工业应用建立了竞争力。

A08-P07**Development of an Autonomous Blade Coating Device with in situ Characterization for Perovskite Solar Cells**

Pengxiao Bao, Songyuan GENG, Shuyan Chen, Tongyi ZHANG*
HKUST(GZ)

The efficiency of perovskite solar cells (PSCs) is determined not only by the perovskite layer (PVK) itself but also heavily relies on the quality of the hole transport layer (HTL) and electron transport layer (ETL). The qualities of HTL and PVK films are directly tied to the reliability of blade coating processes. However, current manual or semi-automated coating systems cannot consistently reproduce uniform HTL and perovskite layers due to variability in coating speed and human intervention, since different recipes will have different key processing parameters. And when exploring new recipes, the selection and quantification of processing parameters often rely on human intuition. As a result, high-efficiency PSCs are often produced by chance rather than through a consistent, reproducible process. To address this, we propose developing an autonomous blade coating device equipped with in situ photoluminescence (PL) detection for the perovskite layer and in situ ellipsometry and UV-Vis spectroscopy for the HTL and PVK layer and industrial camera for other operating parameters quantifying. This setup will provide real-time film quality feedback to automatically adjust coating parameters, ensuring high reproducibility and precision. By integrating artificial intelligence (AI) using reinforcement learning, the system will autonomously test a wide range of recipes to identify optimal parameters for producing high-efficiency PSCs. Feedback loops will refine the parameters, resulting in consistent film quality and providing a scalable production process, aligning with the objectives of our AI lab of materials. This approach will significantly improve the reproducibility of coating processes and enhance overall solar cell efficiency, making it an invaluable tool for the scientific community and industry alike.

A08-P08**NiV-LDH/CNT 修饰隔膜在锂硫电池中对多硫化锂的催化和吸附作用**

赵若彤、杨金龙*
深圳大学

锂硫电池作为锂金属电池中最具吸引力的储能系统之一，其发展受到硫利用率低、循环稳定性差等问题的严重阻碍。在锂硫电池的放电过程中，可溶性的中间多硫化锂(LiPSs)会产生穿梭效应，而硫的绝缘会导致氧化还原动力学的迟缓。LiPSs 的穿梭和迟缓的动力学是导致电化学性能低下的本质原因。隔膜的改性是一种可以有效抑制穿梭效应的策略，从而提高倍率性能和循环稳定性。高导电性、多孔道结构的碳材料可物理吸附 LiPSs，然而非极性的特点只能抑制少部分 LiPSs 穿梭，所以需要极性材料作为硫宿主。因此，为了解决这个问题，本论文基于碳材料优良的导电能力和镍钒层双氢氧化物高吸附、高催化的协同作用，设计了 NiV-LDH/CNT 复合材料并将其用于隔膜修饰。这种隔膜有效地抑制了穿梭效应，促进了反应动力学，提升了电化学性能。

A08-P09**协同改性构建超长循环的富锂锰基层状正极材料**

张潜、杨金龙*
深圳大学材料学院

层状结构的富锂锰正极材料因其高的能量密度、低廉的价格和环境友好等优点，被认为是下一代锂电池正极材料的有利竞争者。然而，当前的层状结构富锂锰正极材料面的临氧流失、界面副反应和相转变等问题严重阻碍了富锂锰正极材料的商业化应用。因此本文提出了 Al 掺杂结合喷雾干燥引入 Si 的改性策略，

通过 Al 掺杂调控了材料中阳离子的无序程度，并且结合喷雾干燥进行 Si 掺杂进一步铆钉了晶格氧，实现材料结构的稳定。协同改性的样品在 1000 (2-4.7@1C) 次循环依旧保持着 86% 的容量保持率，且每圈的电压衰减仅为 0.4mV，本研究为下一代锂离子电池设计稳定的富锂层状阴极提供了一种有效的方法。

A08-P10

界面工程协同颗粒组装实现富锂锰超高循环稳定及倍率性能提升

李艳、杨金龙*

深圳大学材料学院

虽然富锂基层状氧化物阴极 (LLO) 具有高的比容量优势，但是严重的容量，电压衰减阻碍其商业化进程。LLO 原有结构的破坏被认为是产生这些问题的重要原因，在此，利用喷雾干燥法对 LLO 进行二次颗粒组装，并在其表面引入 C 和 Li_3PO_4 混合物 (P-A 层) 表面包覆层及尖晶石中间过渡层，P-A 层在一次纳米颗粒表面形成的强大的双包覆层大大提升了 LLO 的结构稳定性，抑制氧的不可逆脱出，延缓结构从层状到尖晶石再到岩盐相的转变，同时还促进了锂离子和电子的传输速率；而 P-A 层在二次微球表面组成的包覆层可极大地抑制电解液对材料的腐蚀。因此，LLO@P-A 获得了优异的循环稳定性 (0.5C 下循环 300 次后容量保持率为 84.87%) 和极大的倍率性能提升 (4C 时由 LLO 的 68mAh g^{-1} 提升至 LLO@P-A 的 124mAh g^{-1})。这项工作为开发高循环稳定性性能的层状富锂氧化物提供了有效的改性策略。

A08-P11

通过聚合物辅助固相合成镍锰酸锂提高元素分布的均匀性并增强其电化学性能

曾春琳、杨金龙*

深圳大学丽湖校区材料学院

锂离子电池因具有使用寿命长、能量效率高、环境友好等诸多优点，而在能源存储与转换领域得到广泛使用。在众多正极材料中，尖晶石型的无钴 $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ (LNMO) 因具有三维 Li^+ 离子通道、高能量密度、高电压平台和低生产成本等优点而备受关注，是一种极具发展前景的阴极材料。然而，在高电压下，LNMO 与有机电解液的直接接触会导致严重的界面副反应， Mn^{3+} 的歧化反应与 Jahn-Teller 畸变和充放电过程发生的两相转变导致结构崩塌，均表现出较显著的容量衰减，进而阻碍了 $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ 材料的商业化进展。因此，在实际应用之前，阴极的设计对于获得良好的高压电化学稳定性至关重要。本文通过表面活性剂 pvp 辅助固相法制备了高压 $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ 正极材料，为了比较，我们制备了无 pvp 和添加不同浓度 pvp 的 $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ 样品。XRD 结果表明 pvp 的加入没有改变其结构，抑制了杂质相 $\text{Li}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}$ ；SEM 结果表明 pvp 的加入使得八面体颗粒棱角清晰，表面较少小颗粒；FT-IR 和 CV 结果表明，改性材料具有较低的阳离子无序度和较低的 Mn^{3+} 含量，有利于循环稳定性。EIS, GITT 分析表明，改性材料具有较低的电荷转移电阻和较高的锂离子扩散系数，具有较好的电化学动力学特性。采用 pvp 制备的正极材料在 2C 下循环 1000 次后的容量保持率为 95.27% 优于纯样的容量保持率。证实表面活性剂 pvp 辅助固相合成镍锰酸锂提高了元素分布的均匀性并增强了其电化学性能。

A08-P12

Lithium Nitrate Modulated Deep Eutectic Electrolyte for Lithium-O2 Batteries

Jiaxian Wang, Deping Li, Lijie Ci*

Harbin Institute of Technology, Shenzhen

In recent years, deep eutectic electrolyte (DES) has been widely studied and applied in lithium metal batteries (LMBs) due to its high electrochemical and thermal stability, however, it has been less studied in lithium oxygen batteries (LOBs). We have found that the non-flammable and non-volatile characteristics of DES due to their unique inter-ionic interactions precisely satisfies the safety requirements of LOBs (a semi-open system). In

this study, we take the N-methylacetamide (NMAC) -based DES as a research object, and by doping different contents of LiNO_3 additives, we have found that NO_3^- can play the role of a competitive solvent in the DES, and the electrolyte containing 2 wt.% LiNO_3 can better inhibits the corrosion of the lithium metal by the active hydrogen ions in the NMAC. At the same time, the N element in the LiNO_3 optimises the SEI (Solid Electrolyte Interface) components. In addition, we also found that the addition of different contents of LiNO_3 changed the size of the discharge products that were more easily decomposed during charging, and improved the decomposition efficiency. NMA-2.0 (NMA with 2 wt.% LiNO_3) has superior rate performance and longer cycling performance (779 cycles, 500 mA g^{-1} , 500 mAh g^{-1}). This study provides a good opportunity to gain insight into the application and structural design of DES in Li-O_2 batteries.