

· 科学论坛 ·

## 超越传统体系的电化学能源\*

程 俊<sup>1</sup> 张 强<sup>2</sup> 程方益<sup>3</sup> 梁振兴<sup>4</sup> 赵天寿<sup>5</sup>  
陈 军<sup>3</sup> 孙世刚<sup>1\*\*</sup> 孟庆峰<sup>6</sup> 张国俊<sup>7\*\*</sup>

1. 厦门大学 化学与化工学院, 厦门 361005
2. 清华大学 化工系, 北京 100084
3. 南开大学 化学学院, 天津 300071
4. 华南理工大学 化学与化工学院, 广州 510641
5. 香港科技大学 机械及航空航天工程系, 香港 999077
6. 国家自然科学基金委员会 政策局, 北京 100085
7. 国家自然科学基金委员会 化学科学部, 北京 100085

**[摘 要]** 基于第 262 期“双清论坛”, 本文围绕超越传统体系电化学能源的重大需求、科学基础和发展途径, 总结了新型电化能源领域的关键科学问题, 提出了以典型电化能源化学体系为抓手, 构筑从电荷转移到电极材料, 再到器件系统的全链条电化能源理论, 建议了未来 5~10 年的重要研究方向。超越传统体系的电化能源研究将推动当代化学基础理论创新和物质科学研究范式变革, 助力原创化学思想转化成实用工程技术, 实现我国电化能源科技自立自强。

**[关键词]** 电化能源; 基础理论创新与研究范式变革; 新材料; 新体系; 多学科交叉; 碳中和

2020 年 9 月 22 日, 习近平总书记在第 75 届联合国大会讲话中指出, 中国将提高国家自主贡献力度, 采取更加有力的政策和措施, 二氧化碳排放力争于 2030 年前达到峰值, 努力争取 2060 年前实现碳中和。十九届五中全会公报也明确指出, 加快发展现代产业体系, 推进能源革命。以支撑国家“能源革命”和 2060 年前实现“碳中和”为牵引<sup>[1]</sup>, 国家自然科学基金委员会第 262 期“双清论坛”于 2020 年 10 月 26—27 日



程俊 博士, 厦门大学化学化工学院教授。主要研究方向为表界面模拟方法发展、计算电化、理论催化等。在 *Nature Materials*、*Nature Catalysis*、*Nature Communications*、*Science Advances*、*Physical Review Letters* 等学术期刊发表论文 90 余篇。2019 年获中国电化青年奖。现担任《电化》副主编、*ACS Catalysis* 青年编委、*Chemical Physics Reviews* 顾问编委、国际电化出版委员会委员等。



孙世刚 博士, 厦门大学化学化工学院教授、中国科学院院士、国际电化学会会士、英国皇家化学会会士。长期从事电化、表界面科学和能源电化研究。在 *Science*、*JACS*、《中国科学》等学术期刊发表论文 600 余篇, 获授权发明专利 34 项。获首届中国电化贡献奖、中国光谱成就奖、国际电化学会 Brian Conway 奖章、国家自然科学基金二等奖等奖项。现任固体表面物理化学国家重点实验室学术委员会主任、中国化学会副理事长。任 *Electrochimica Acta*、《化学学报》、《化学教育》等学术期刊主编、《电化》主编。



张国俊 博士, 研究员。国家自然科学基金委员会化学科学部化学五处副处长兼化学工程项目主任。自 2012 年 11 月起在国家自然科学基金委员会化学科学部工作, 历任工业化学项目主任、化学工程项目主任、能源化学项目主任。

收稿日期: 2021-01-21; 修回日期: 2021-02-08

\* 本文根据第 262 期“双清论坛”内容整理。

\*\* 通信作者, Email: sgsun@xmu.edu.cn, zhanggj@nsfc.gov.cn

在北京召开,论坛主题为“超越传统体系的电化学能源”。论坛邀请高等院校、科研院所、企业等从事电化学能源相关研究的专家代表38人,围绕发展超越传统体系的电化学能源展开研讨,研讨内容涉及化学、化工、材料、物理、数学、信息、计算机、工程科学等多个学科领域。论坛围绕三个议题进行研讨交流:(1)需求与政策;(2)原理变革与研究范式;(3)新材料与新体系。本期论坛在总结传统研究方法、材料和体系基础上,对如何定义和超越传统体系进行了深入研讨。

## 1 电化学能源研究背景

电化学能源是清洁、高效的二次能源。作为新能源革命的核心要素之一,在未来新能源结构和社会发展中的作用主要体现在以下几个方面:

### 1.1 电化学能源是可再生能源规模利用的基础

我国在“十三五”规划中提出的能源革命和能源结构调整战略方针是:到2020年,我国累计风能发电装机容量达到2.81亿千瓦,光伏发电达2.53亿千瓦。由于风能、太阳能等新能源具有不稳定、不连续的特性,其开发和利用受到昼夜、季节、地理位置等诸多因素的限制,需要大规模储能技术与之配套。世界许多国家都将大规模储能技术定位为支撑新能源发展的战略性技术。我国已于2016年成为全球最大的可再生能源生产和消费国。但由于储能设施发展不足,我国弃风、弃光率处于较高水平。

电化学储能的能量密度高、可靠性好、负荷调节能力强,在可再生能源并网、电网电力辅助、基站备用电源、分布式及微网、家庭储能系统、电动汽车充换电站等方面已得到广泛应用,其技术水平和应用在很大程度上决定了可再生能源的发展水平。因此,我国需要加大电化学储能技术的研发,通过配置储能设备平衡发电和用电,确保电网稳定,实现安全、稳定供电,为可再生能源的规模应用提供技术支撑。

### 1.2 电化学能源是新能源汽车产业发展的核心

新能源汽车是全球重点支持的战略新兴产业,对于保障能源安全、节能减排、促进汽车工业可持续发展具有重要意义。

基于电驱动动力系统的电动汽车具有效率高、化石燃料依赖度低、在使用地点“零排放”等特点,是代替内燃机汽车最具竞争力的技术之一。电动汽车的动力系统主要以电化学能源为主<sup>[2]</sup>。中国新能源汽车产业发展战略的提出与实施推动了电化学能源产业的发展,并在逐渐占据和开拓出广阔的市场空

间。2015年,我国已超越美国成为全球最大电动汽车产销国。如何率先突破下一代二次电池技术,获得更加安全、能量密度更高、成本更低廉的电化学能源系统是关乎我国新能源汽车产业可持续发展的核心问题。

### 1.3 电化学能源是国防安全、太空和深海探测的保障

当今处于信息化战争时代,特种电化学能源技术支撑了数字化武器装备发展。与常规技术相比,特种电化学能源技术需要适应深空、深海、高原以及极寒、高温、高湿、高腐蚀等极端环境,满足高安全性、长循环寿命和高比能等综合要求。例如,各类航天器需要高安全性、高可靠性的空间电源;深海战略的水下无人机、舰船需要续航能力强、短时高功率输出的深海特种电源。根据应用场景的需求,需要突破电化学极限,满足国防安全、太空和深海探测的需求。

### 1.4 电化学能源是5G、人工智能等高新技术发展的保障

5G通讯时代方兴未艾,人工智能、数据中心、云计算、物联网等高新技术迅猛发展,驱动新一轮科技革命和产业变革,促使人类社会全面进入数字化时代。基站和终端驱动电源是上述高新技术发展的基础保障。具体应用场景对化学电源的功率密度、响应速度、负载/转化效率、设计灵活性等参数提出了个性化要求;电源全服役周期健康管理技术(例如运行状态检测、寿命预测、故障排除与修复等)是保证智能设备的可靠运行的前提。

## 2 总体科学目标

从电化学能源科学基础入手,通过化学、化工、材料、物理、数学、信息、计算机、工程科学等多学科和多领域的交叉,发现新原理、建立新机制、发展新方法、开发新材料、创制新体系,通过思想创新和体系创制,实现我国电化学能源科技的自立自强,推动新能源产业的技术革命和绿色发展。

从人才队伍建设的角度,通过学科间的深度交叉,引入不同学科背景的优势力量,培养一支在国际上名列前茅的复合型人才队伍,支撑我国电化学能源领域的战略科技力量发展;从国家战略支撑的角度,通过加强顶层设计引领电化学能源发展方向,提升我国在电化学能源领域原创研究水平和国际竞争力,支撑国家能源战略和能源安全。

### 2.1 创新电化学能源的研究方法和研究范式

充分发挥我国在电化学基础研究方面的优势,

发展和创建电化学能源工况条件下的先进表征方法和理论计算方法,形成电化学能源基础研究新范式。

## 2.2 电化学能源转化与存储的新机制和新理论

探索电化学能源转化与存储的新机制,为突破传统体系框架提供指导;发展面向电化学能源研究的离子化学、复杂界面电化学等理论,引领国际前沿发展。

## 2.3 突破现有电化学能源技术瓶颈的新材料

开展基于构效关系和人工智能平台的材料设计与高通量筛选,探索突破现有技术瓶颈的电化学能源新材料,建立我国电化学能源材料数据库。

## 2.4 超越传统电化学能源的新体系

着眼未来电化学能源需求,以新材料和新机制为抓手,构建超越传统电化学能源的新体系,发展面向应用场景的颠覆性技术,支撑电化学能源科技的自立自强,提升我国在该领域的国际竞争力。

## 3 关键科学问题

电化学能源是研究电能与化学能之间相互转换及其规律的领域,电化学能源的创新将为发展新型能源技术提供科学基础。聚焦典型电化学能源体系中非均匀、非连续界面上传输行为和反应过程等核心科学问题,借助电化学能源器件多时空尺度的工况表征和计算模拟新方法等手段,揭示工作状态电化学界面微观结构、动态演化和反应构效关系,采用定向结构构建、环境介质调变、外场耦合等手段对界面过程进行有效调控,发展能量高效转化与存储的新材料、新体系、新机制和新理论,为发展超越传统体系的电化学能源提供科学基础。其中所涉及的关键科学问题具体包括:

(1) 电化学能源高效转化与储存的新机制与新体系;

(2) 电化学能源体系复杂多相界面结构、过程与反应机制;

(3) 电化学能源转化与存储过程中多场、多维、多尺度的耦合传输和调控机制;

(4) 面向复杂电化学界面和过程的高灵敏高分辨原位动态表征和多尺度计算方法。

## 4 研究内容重点建议

电化学能源领域的发展应以国家“能源革命”和2060年前实现“碳中和”目标为牵引,以若干先进材料为抓手,推动原理机制和研究范式变革,开展从材料到器件系统、从原创研究到工程技术的创新研究,发展超越传统体系的电化学能源。目前电化学能源

基础研究的广度和深度较为欠缺,在基础研究和反应机制方面需要静心深耕;在材料可控制备与宏量应用方面需要匠心细挖;在器件创新与系统集成方面需形成自主知识产权;关注电化学能源器件在特殊条件或极端环境下的应用,服务国家需求。围绕前述关键科学问题,建议未来在以下四个研究内容方面进行资助布局:

### 4.1 创建电化学能源的新理论

当代电化学能源体系往往在组分结构复杂的微纳尺度多孔电极中发生能量转化与存储过程。具体过程涉及电子、离子如何在电极材料及其非连续界面中迁移、转化与存储。如果能突破传统双电层理论认知,构建新型电化学界面理论研究模型,重塑能量转化与存储的电化学基础理论,将为实现我国电化学能源技术自立自强奠定基础。需要重点研究的方向:

(1) 电解质和双电层新理论:提出离子溶剂化及其性质的检测新技术,获取离子结构微观图像,推进双电层理论发展与变革,认识离子在介质中的热力学稳定性以及在不同介质间的迁移动力学行为规律,建立非均匀、非连续电解质理论。

(2) 模型/新型能源电化学界面构建与研究:聚焦模型电化学体系和以超浓、限域、远离平衡态、固/固界面、固/液/气三相界面等为特征的新型能源电化学体系;建立自洽描述电化学界面上双电层/空间电荷层、电子转移和化学吸附的模型和研究方法,创新电化学能源的理论与工程基础;阐明电极表界面结构以及动态演变规律,明晰溶剂化对电荷和分子传递过程的影响,建立界面双电层(含空间电荷层)内电荷相互作用规律的分子理论基础。

(3) 定量描述复杂界面过程的创新理论:解析电荷传输与化学转化界面过程,创新工况条件下电化学界面上的电荷传输与化学转化耦联模型和定性/定量模型;发展基于外加电场下的量子效应、电荷转移和材料结构尺度上的新理论和新模型;提出适应新型电化学能源体系的多孔电极理论、电催化表面理论及电化学能量与物质高效转化理论模型。

(4) 多场耦合作用下界面电化学反应理论:阐明电场、化学场、磁场、机械力场、热场等多场耦合作用下电极界面电子转移与成键断键的动态反应规律,实现界面电化学反应活性和选择性理论创新,实现电极、电解质材料及二者界面的理性设计与微观调控。

### 4.2 发展新的电化学能源研究方法与研究范式

创新理论面临着电化学能源体系过程繁多、动

态响应快、原位监测困难等共性问题,需要协同采用功能互补的多种原位表征技术和理论计算方法,发展工况条件下高时、空、能量分辨的动态表征技术和理论计算模拟方法,多维度观察电化学能量转化与存储的动态过程。需要重点研究的方向:

(1) 电化学能源体系高分辨原位表征技术:依托同步辐射光源、自由电子激光、中子散射等大型科学仪器装置,研制配套的电化学能源体系原位表征仪器装置用于研究电化学能源体系,从分子水平、高能量、高空间和高时间分辨层次重新诠释电化学能源反应中的微观和动态过程;发展高时空分辨率技术研究高时空分辨测量溶剂化结构、双电层结构和离子、电子迁移过程;建立高带宽微弱电流检测分析系统,发展单纳米粒子/单团簇/单分子/单原子电化学测量技术,结合原位扫描隧道显微镜、原子力显微镜等方法,实现高时间分辨、超微瞬时电流、大规模数据采集/分析、非平衡态纳米界面性质(界面电荷、双电层、缺陷等)分析等目标。原位表征过程中需要重点关注以下几个方面的信息:跨尺度结构信息与电化学功能信息;晶格、元素、价态的动态演变信息;界面元素、价态、配位、成键等信息。

(2) 电化学能源体系理论计算与模拟方法:发展针对复杂电化学多相多尺度界面体系的计算方法(第一性原理、多尺度、机器学习势函数、分子动力学、蒙特卡洛等)及恒电子/离子电化学电势的理论方法;实现电化学界面双电层结构、界面电荷转移、离子/电子耦合转移反应的计算模拟;结合宏观空间和时间尺度,利用连续质模型、多物理场耦合数值仿真等方法,在电化学器件层次上开展理论及方法创新,实现由微观到宏观的多尺度电化学体系模拟。

(3) 大数据、人工智能、自动机器人等技术为基础的研究范式:构建多学科交叉的新范式。发展基于大数据的统计分析,注重特征描述符的分析和提取,确立电化学能源材料结构和性能的内在关系及关键参数,开展高通量筛选;通过数据挖掘和人工智能机器学习建立几何结构、电子结构、物化性质和材料性能等多级构效关系,预测新材料性能,缩短性能优化和测试周期;发展基于机器学习和自动机器人技术加速电化学能源体系实验和计算数据获取,运用自动机器人技术开发规范化、自动化计算和实验 workflow 集成平台<sup>[3]</sup>,建立开源共享的计算和实验数据库。

### 4.3 突破现有电化学能源技术瓶颈的新材料

近年来,电化学能源材料研究呈现加速发展的态势。但是,电极材料纳米化使得能量与物质转化过程日趋复杂,亟需深入研究材料的构效关系、反应机制、

失活机制等科学问题,为新材料的理性设计和体系创新提供理论依据和指导。需要重点研究的方向:

(1) 现有电化学能源材料的研究模型:微纳尺度上非均匀结构中电子、离子、原子、分子、团簇、颗粒的传递过程与反应机制;材料组成、结构与性能的构效关系及长期服役条件下的结构演变规律。

(2) 材料数据分析与理论模拟:基于现有数据和知识,建立材料基因数据库;提出大数据统计分析的机器学习方法,研判材料筛选方向;发展基于图论的材料结构与性能描述方法,结合人工智能技术进行材料开发。

(3) 突破现有瓶颈的电化学能源新材料:石墨炔和分子碳材料使定制化、去资源化电极材料设计成为可能;非晶材料和高熵材料具备原子无序分布的特点,为调控电极反应可逆性和循环稳定性提供了广阔空间;发展新型电催化剂和电解液,提升二氧化碳、氮气等惰性气体的转化效率和选择性;降低或者避免贵金属催化剂的使用是电催化材料研究的重点;具有耐高电压、宽工作温区、阻燃等功能的新型电解液是电池领域的研究重点;新型碱性膜、高温膜是创新电化学能源体系的关键部件之一,如何同步提高离子传导率和稳定性是研究重点。

### 4.4 发展电化学能源新体系和新机制

针对高能量密度、高功率密度和高稳定性的需求,需要探索新型电化学能源体系,发展能量高效转化与存储的新机制<sup>[4-7]</sup>。需要重点研究的方向:

(1) 电化学能源新体系:非常规条件下的电化学能源器件的机、热、电一体化体系创新;发展具有高能量和高功率密度、低成本、安全可靠、长寿命、环境友好的储能新体系,如:以有机电极材料为核心的有机电池体系,以(准)固态电解质为中枢的(准)固态电池体系,以新型锂金属负极为核心的下一代锂电池,以钠、钾碱金属离子和多价碱土金属离子作为能量载体的“后锂”二次电池体系,以高能量密度为特征的“全要素”一次电池体系,以自修复为特征的智能电池,电容型与电池型材料复合储能的“内并型”和“内串型”新型超级电容器体系,以流动相参与电化学反应的“流体电池”体系,面向柔性化、可穿戴的纤维状电池体系,以热驱动电化学反应为特征的“热-电化学电池”体系等。

(2) 能量高效转化与存储的新机制:基于阴离子电荷补偿的高容量正极储锂新机制;基于氧、硫元素的多电子反应机制;有机分子电化学储能机制;团簇类、超分子类电极材料局域和离域性驻留双重特征的储能新机制;“离子-电子”共轭态储能机制;自旋电子调控电荷转移机制;工况环境下活性材料协

同反应与长稳服役新机制；基于多学科交叉研究，获得电化学能源体系寿命预测、失效分析和高效安全管理的新机制。

**致谢** 衷心感谢吴川、李先锋、曹安民、郑耿锋、季恒星、李印实、王朝、杨晓伟、赵志坚等对论坛研讨内容进行记录、整理和总结工作。

### 参 考 文 献

- [1] Mallapaty S. How China could be carbon neutral by mid-century. *Nature*, 2020, 586(7830), 482—483.
- [2] Cano ZP, Banham D, Ye SY, et al. Batteries and fuel cells for emerging electric vehicle markets. *Nature Energy*, 2018, 3(4): 279—289.
- [3] Angelone D, Hammer AJS, Rohrbach S, et al. Convergence of multiple synthetic paradigms in a universally programmable chemical synthesis machine. *Nature Chemistry*, 2021, 13(1), 63—69.
- [4] Liang YL, Dong H, Aurbach D, et al. Current status and future directions of multivalent metal-ion batteries. *Nature Energy*, 2020, 5(9), 646—656.
- [5] Assat G, Tarascon JM. Fundamental understanding and practical challenges of anionic redox activity in Li-ion batteries. *Nature Energy*, 2018, 3(5): 373—386.
- [6] Simon P, Gogotsi Y. Perspectives for electrochemical capacitors and related devices. *Nature Materials*, 2020, 19(11): 1151—1163.
- [7] Lu Y, Chen J. Prospects of organic electrode materials for practical lithium batteries. *Nature Reviews Chemistry*, 2020, 4(3), 127—142.

## Beyond Traditional Electrochemical Energy Technologies

Cheng Jun<sup>1</sup>   Zhang Qiang<sup>2</sup>   Cheng Fangyi<sup>3</sup>   Liang Zhenxing<sup>4</sup>   Zhao Tianshou<sup>5</sup>  
Chen Jun<sup>3</sup>   Sun Shigang<sup>1\*</sup>   Meng Qingfeng<sup>6</sup>   Zhang Guojun<sup>7\*</sup>

1. *College of Chemistry and Chemical Engineering, Xiamen University, Xiamen 361005*
2. *Department of Chemical Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084*
3. *College of Chemistry, Nankai University, Tianjin 300071*
4. *School of Chemistry and Chemical Engineering, South China University of Technology, Guangzhou 510641*
5. *Department of Mechanical and Aerospace Engineering, Hong Kong University of Science and Technology, Hong Kong 999077*
6. *Bureau of Policy, National Natural Science Foundation of China, Beijing 100085*
7. *Department of Chemical Sciences, National Natural Science Foundation of China, Beijing 100085*

**Abstract** The 262<sup>nd</sup> Shuangqing Forum titled “Beyond Traditional Electrochemical Energy Technologies” focused on the major national needs, scientific foundation and technological development of electrochemical energy. Based on the conclusions drawn from the Forum, this work summarizes the key scientific issues in the field of new electrochemical energy research and emphasizes the importance of the development of novel electrochemical energy materials and systems, as well as new methods that study the electrochemical systems and theories behind the applications of energy storage and conversion. Important research directions pertinent in the next 5 – 10 years are suggested. A theme-based research on the formation of fundamental theories in electrochemistry and the paradigm shift in materials research is proposed to promote and transform scientific ideas into technological innovations to ultimately propel China to the forefront of electrochemical energy research.

**Keywords** electrochemical energy; fundamental theories and new paradigms; novel materials; new systems; multidisciplinary collaboration; carbon neutral

(责任编辑 张强)

\* Corresponding Author, Email: sgsun@xmu.edu.cn, zhanggj@nsfc.gov.cn