

能源催化转化全国重点实验室工作简报

< 2026 年 08 月 >

能源催化转化全国重点实验室编2026 年 08 月 31 日

研究进展

我室提出双界面配位调控策略构建高性能四电子水系锌碘软包电池..... 01

我室开发出高能量密度金属锂一次电池..... 02

我室提出轻石脑油全组分梯级膜分离策略..... 03

我室实现二维硼化物可控制备及微型储能应用..... 04

我室揭示电化学合成氨中活性位点"自发单原子化"机制..... 05

我室定量揭示单体不一致性对电动汽车电池包性能和资源利用的制约..... 07

我室发表质子导体固体氧化物电解质的综述论文..... 09

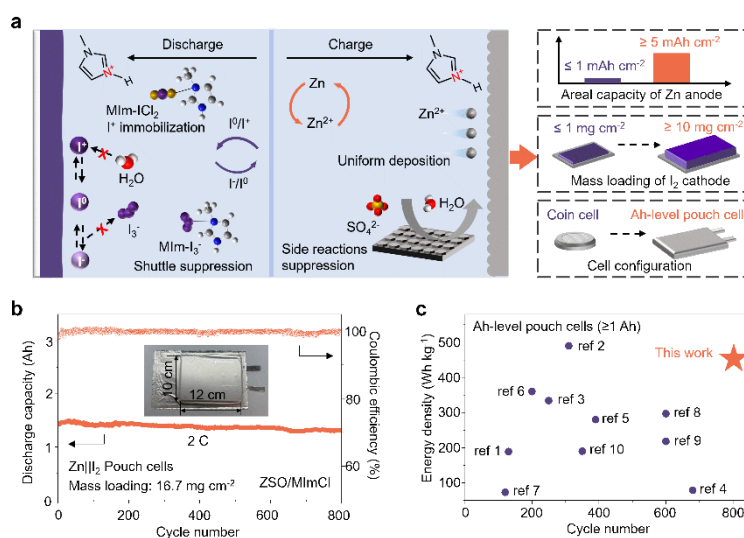
新闻动态

我室召开第一届学术委员会第三次会议..... 11

研究进展

我室提出双界面配位调控策略构建高性能四电子水系锌碘软包电池

近日，我室动力电池与系统研究部（DNL29）陈忠伟院士、汪冬冬研究员团队在高能量水系锌电池研究领域取得新进展。团队提出一种“双界面配位调控”电解液设计策略，通过系统筛选多类含氮阳离子配体，确定 N-甲基咪唑氯盐（MImCl）作为电解液双界面多功能添加剂，可实现对四电子锌碘电池正负极界面的同步稳定。该策略通过 MIm⁺在电池运行过程中的动态迁移，实现了“正极稳定碘物种、负极调控锌沉积”的双重功能。



水系锌碘电池具有高安全性、低成本和多电子反应优势，被认为是大规模储能的重要候选体系之一。然而，四电子 I⁻/I⁰/I⁺转化过程中，高价态碘物种易发生水解，多碘化物穿梭及锌负极枝晶和腐蚀等问题影响电池稳定性，制约了高载量正极和 Ah 级软包电池的发展。为解决上述问题，团队提出“双界面配位调控”策略，引入 MImCl 添加剂，实现了电解液对正负极界面的协同优化。研究发现，在充放电过程中，MIm⁺可动态迁移至不同电极界面：在碘正极侧，MIm⁺通过离子相互作用稳定多碘化物及 ICl₂⁻中间体，抑制活性碘物种溶解和穿梭，并促进可逆四电子 I⁻/I⁰/I⁺转化；在锌负极侧，MIm⁺优先吸附于锌表面，调控 Zn²⁺成核与沉积行为，实现均匀无枝晶锌沉积并抑制副反应。该动态界面调控机制实现了正负极反应过程的同步稳定。

基于该策略，团队构建了高负载四电子 Zn||I₂ 电池体系，实现了高容量和长寿命运行。在高碘载量条件下，Zn||I₂ 全电池表现出较好的倍率性能和循环稳定性，并进一步构筑了 1.4 Ah 级四电子 Zn||I₂ 软包电池。该软包电池实现 800 圈稳定循环，并获得基于正极活性物质量计算的 455 Wh kg⁻¹ 高能量密度，展现出实

际应用潜力。该研究不仅揭示了电解液添加剂对四电子碘氧化还原过程和锌沉积行为的协同调控机制，也为高容量水系金属电池的界面工程设计提供了新思路。

相关研究成果以“Unveiling Dual-Interface Coordination Orchestration for Durable Aqueous Zinc-Iodine Pouch Cells with Four-Electron Chemistry”为题，于近日发表在《美国化学会志》（*Journal of the American Chemical Society*）上。该工作的第一作者是我室 DNL29 联合培养博士研究生陈玉峰。该工作得到中国科学院 B 类先导专项“能源电催化的动态解析与智能设计”、大连市科技创新人才支持计划、我所创新基金等项目的资助。（文/图 陈玉峰、汪冬冬）

文章链接：<https://doi.org/10.1021/jacs.6c11308>

我室开发出高能量密度金属锂一次电池

近日，我室动力电池与系统研究部（DNL29）陈忠伟院士团队在金属锂一次电池领域取得新进展，开发出 25Ah 软包金属锂一次电池。该电池具有高能量密度、高倍率和良好的低温能量保持率等特性。

无人机、机器人、航天器及野外传感设备等应用场景对电池提出了高功率输出和长期贮存可靠性的双重需求。传统锂一次电池虽能贮存多年电力，但在需要大电流放电时性能受限。

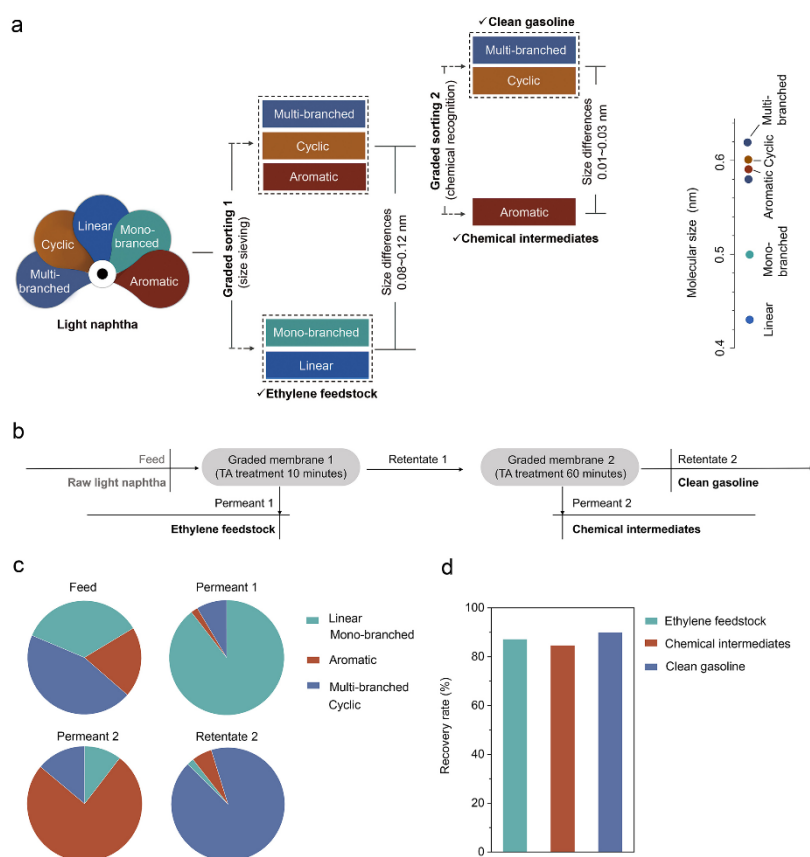
为解决上述难题，团队研制出 25Ah 软包金属锂一次电池，经中国电子技术标准化研究院赛西实验室安全实验室检测，该电池低倍率下能量密度超过 750 Wh/kg & 1285 Wh/L，属于一次电池中的高能量密度区间；1C 倍率下放电，该电池的能量密度可达到 656 Wh/kg & 1130 Wh/L。此外在上述能量段内，该电池可实现 10C 短时大电流放电，常温比功率达 4487 W/kg，并具备 4C 持续放电能力；在 -40℃低温条件下，1C 能量密度保持 447 Wh/kg，年自放电低于 1%，实现了高能量密度下的高功率输出。

该电池的正极材料采用高熵氧化物，其比容量超过 430 mAh/g，团队已建成年产 10 吨级中试线，完成了从材料制备到电芯集成的全链条开发。该电池已通过第三方检测认证，正在无人机、机器人、航天器及野外传感设备等场景中开展应用验证。（文/徐磊）

我室提出轻石脑油全组分梯级膜分离策略

近日，我室无机膜与催化新材料研究组（504 组）杨维慎研究员、班宇杰研究员等联合中山大学陈小明院士、张杰鹏教授、周东东教授团队提出“轻石脑油梯级膜分离”策略，为轻石脑油全组分精准分离提供了新思路。

原油初馏得到的轻石脑油是重要化工原料之一，主要由 C5 至 C7 的直链和单支链烷烃、多支链烷烃和环烷烃、芳烃等组成，可分别作为裂解制乙烯原料、高辛烷值汽油燃料、化工中间体等。然而，各组分间具有相似的物理化学性质，传统精馏技术难以实现精准分离且能耗高。



针对上述问题，研究团队提出轻石脑油梯级膜分离策略，构建了尺寸筛分与化学辨识协同耦合的梯级分离机制，旨在通过一级尺寸筛分，实现直链和单支链烷烃与多支链烷烃、芳烃、环烷烃（分子尺寸差异为 0.08 至 0.12 nm）的初步分离；通过二级化学辨识，实现芳烃与多支链烷烃、环烷烃分离（分子尺寸差异仅为 0.01 至 0.03 nm）。

基于上述策略，研究团队采用鞣酸分子微刻蚀方法，对金属—有机框架（CuBTC）膜的孔径及表面化学性质进行连续调控，分别构筑了尺寸筛分及化学辨识两类功能膜。团队通过二者级联，可将 15 组分模拟轻石脑油精细拆分为三类高值产品：富含直链及单支链烷烃的乙烯原料、富含芳烃的化工中间体、富含

多支链与环烷烃的汽油调和组分。各产品回收率均可达 85 至 90%，总体能耗较精馏降低约 91%。该工作为实现从“馏分切割”到“分子炼油”转变提供了科学基础。

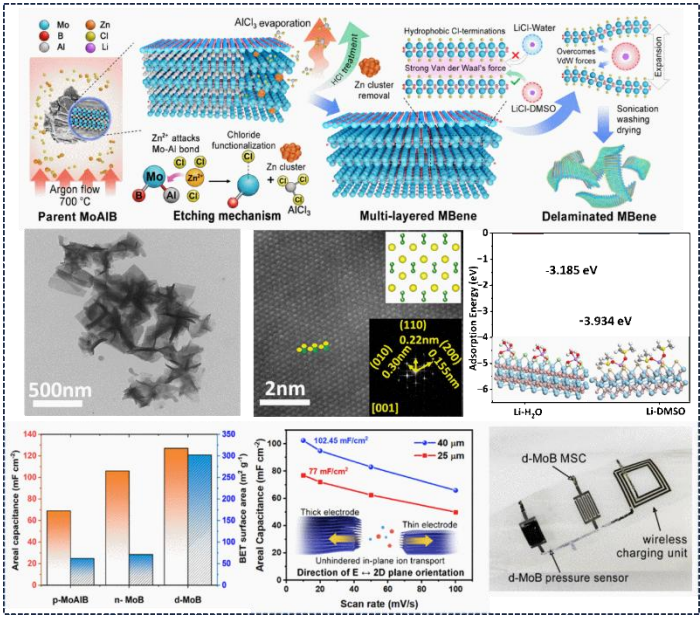
相关工作以“Molecular-Level Petroleum Refining by Graded Membranes”为题，于近日发表在《国家科学评论》（*National Science Review*）上。该工作的第一作者为我室 504 组王悦诚副研究员和中山大学博士研究生董方帝。以上工作得到国家自然科学基金、能源催化转化全国重点实验室等项目的资助。（文/图 班宇杰、王悦诚）

文章链接：<https://doi.org/10.1093/nsr/nwag488>

我室实现二维硼化物可控制备及微型储能应用

近日，我室二维材料化学与能源应用研究组（508 组）吴忠帅研究员团队，在二维过渡金属硼化物（Boridene）的可控制备及微型储能应用方面取得新进展。团队发展了一种无水锂离子溶剂辅助剥离策略，可将钼铝硼（MoAlB）衍生的层状硼化钼（MoB）转化为高质量二维 MoB 纳米片，并构建了高性能微型超级电容器和柔性集成微系统。

二维过渡金属硼化物因其独特的电子结构、高电导率和丰富的表面化学特性，在电化学储能领域具有广阔应用前景。MoB 可通过选择性刻蚀去除层状 MoAlB 中的铝（Al）层获得。然而，该方法常面临 Al 去除不完全以及刻蚀后 MoB 层间再堆叠等问题，难以获得充分剥离的二维纳米片。这会降低材料的可利用表面积，阻碍电解质离子进入层间活性位点，从而制约 MoB 在高倍率储能器件中的性能。



针对上述问题，研究人员首先采用氯化锌（ ZnCl_2 ）熔盐刻蚀法，选择性去除 MoAlB 中的 Al 层，得到具有 Cl/O 混合表面端基的层状 MoB ；随后，引入无水氯化锂-二甲基亚砜（ LiCl-DMSO ）插层策略，利用 Li^+ - DMSO 溶剂化配合物扩大层间距，并结合温和超声处理，实现了少层剥离 MoB(d-MoB) 纳米片的制备。所得 MoB 纳米片物相纯度高、表面氧化程度低，平均厚度约 3 nm ，横向尺寸约 300 nm ，提升了有效可接触表面积。结合实验表征与理论计算，科研人员进一步阐明了溶剂辅助插层作用机制：与水合 Li^+ 相比， Li^+ - DMSO 配合物具有更强的进入 MoB 层间并促进结构膨胀的能力。密度泛函理论计算表明， Li^+ - DMSO 在 MoB 表面可实现良好吸附并产生电子局域效应；不同溶剂的对照插层实验也证实， Li^+ 的溶剂化与配位环境对层间膨胀和剥离效率具有重要影响。

得益于少层结构、更多暴露的活性表面和缩短的离子传输路径， d-MoB 纳米片展现出增强的电化学性能。基于该材料制备的平面叉指微型超级电容器，面积比电容为 102.4 mF cm^{-2} ，面积能量密度为 $4\text{ }\mu\text{Wh cm}^{-2}$ ，并可在低至 $-30\text{ }^\circ\text{C}$ 的条件下稳定工作。此外，团队还将微型超级电容器与无线充电线圈、 d-MoB 基压力传感器集成，构建了柔性无线充电—储能—传感微系统，展示了 d-MoB 在微型储能和柔性电子领域的应用潜力。

相关研究成果以“Solvent-Assisted Delamination of Boridene toward High-Performance Micro-Supercapacitors and Integrated Microsystems”为题，于近日发表在《美国化学会志》（*Journal of the American Chemical Society*）上。该成果的共同第一作者是我室 508 组博士研究生 Tasmia Azam、博士后 Pratteeek Das 和博士研究生任志浩。上述工作得到国家自然科学基金、“一带一路”国际科学组织联盟（ANSO）、我所创新基金等项目的资助。（文/图 Tasmia Azam、Pratteeek Das、任志浩）

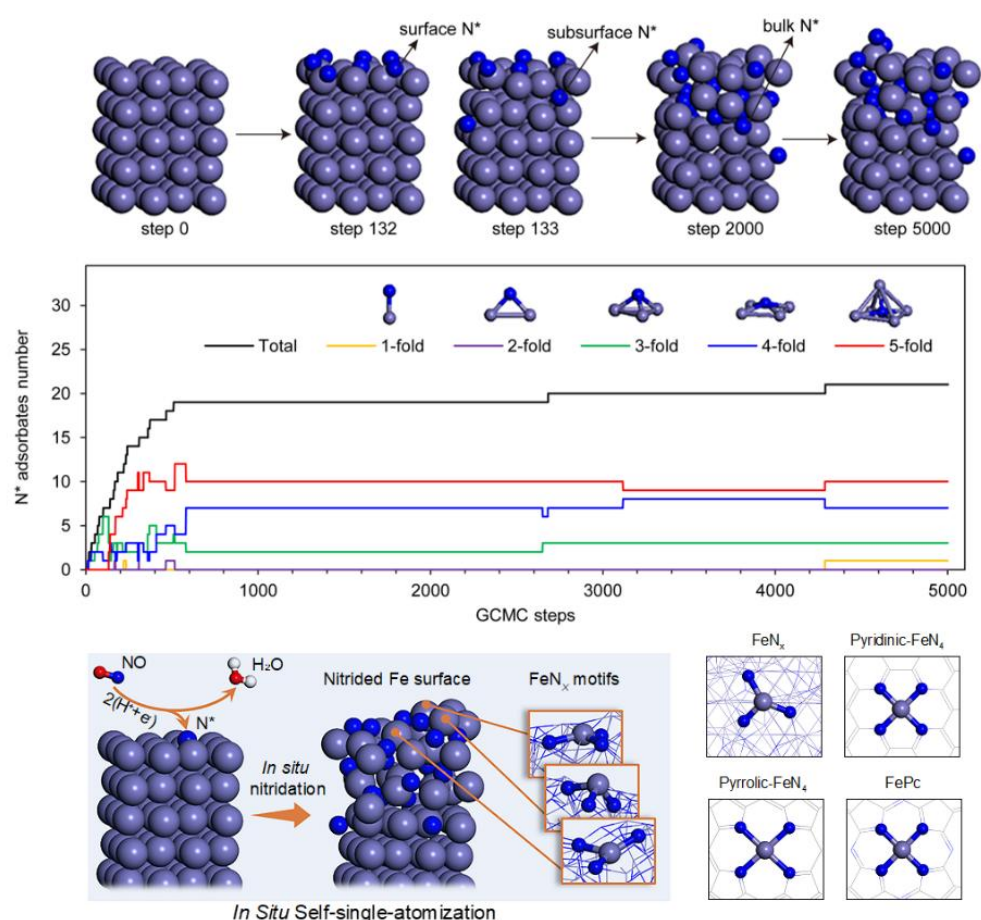
文章链接：<https://doi.org/10.1021/jacs.6c08895>

我室揭示电化学合成氨中活性位点"自发单原子化"机制

近日，我室计算和数据驱动催化研究组（511 组）肖建平研究员团队，在电化学合成氨催化剂动态结构演变方面取得新进展。团队利用机器学习势（MLP）驱动的巨正则系综蒙特卡洛（GCMC）模拟，揭示了电化学一氧化氮还原反应（eNORR）过程中催化剂活性位点"自发单原子化"的动态演化机制，为理解实际工况下催化活性位点的真实结构提供了新视角。

电化学一氧化氮还原反应是合成绿色氨的技术路线之一。肖建平团队在前期工作中提出了电催化合成氨的新路线，同时发现铜(Cu) ([Angew. Chem. Int. Ed.](#), 2020)和铜锡(Cu-Sn)合金 ([Nat. Energy](#), 2023)可实现高效合成氨；并在 eNORR 产物选择性方面进行了多维度的研究 ([J. Phys. Chem. Lett.](#), 2021; [Nat. Commun.](#), 2023; [Natl. Sci. Rev.](#), 2024; [J. Am. Chem. Soc.](#), 2024; [J. Am. Chem. Soc.](#), 2025)。

实验表明，铁催化剂对电化学合成氨具有较好的活性和选择性。本工作发现，铁的电化学性能并非源于其本征活性，而是源于其在工况条件下自发单原子化的自适应能力。团队采用机器学习势驱动的巨正则蒙特卡洛模拟，系统探索了约 250 万种可能的活性结构，模拟了它们随电极电位升高而发生结构演化的过程。微观动力学模拟表明，反应过程中铁(Fe)表面将被吸附态的氮(N^*)物种覆盖，进而通过自发单原子化形成 FeN_x 活性构型。统计分析表明，孤立的 FeN_x 构型中的 Fe 顶位比桥位和空位具有更高的氨合成活性。基于这些自发单原子化的活性位点，团队重现并解释了不同产物法拉第效率随电极电位变化的实验规律，验证了活性位点模型的可靠性。该工作揭示了催化剂在反应条件下的结构自适应行为，为设计适用于更多反应体系的活性位点提供了参考。



相关研究成果以“Self-single-atomization of active sites in electrochemical ammonia synthesis unveiled by machine learning potential”为题，于近日发表在《国家科学评论》（*National Science Review*）上。该工作的第一作者是我室 511 组龙军副研究员，上述工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金等项目的资助。（文/图 龙军、董雪）

文章链接：<https://doi.org/10.1093/nsr/nwag417>

我室定量揭示单体不一致性对电动汽车电池包性能和资源利用的制约

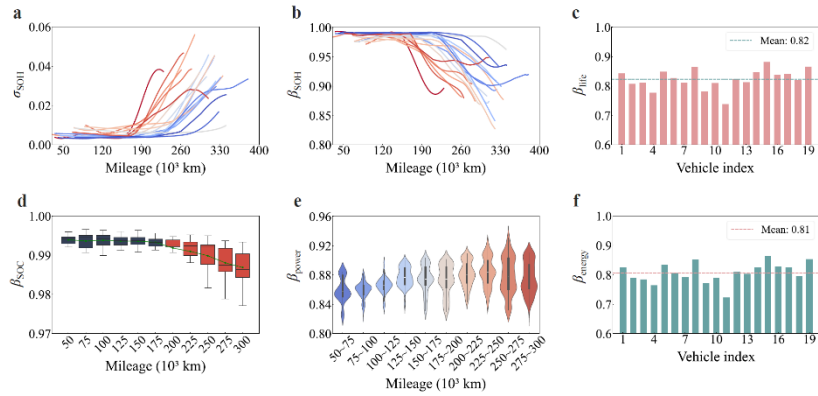


近日，我室动力电池与系统研究部陈忠伟院士团队，联合瑞典查尔姆斯理工大学邹长福教授团队、北京理工大学和极氪科技欧洲公司的相关研究团队，在电动汽车动力电池真实运行退化与资源利用研究方面取得新进展。合作团队基于长期实车运行数据，建立了面向车队尺度的电池单体老化诊断与整包性能评估框架，系统定量揭示了单体不一致性对电池包健康状态、可用电量、寿命、功率能力和全寿命能量资源利用率的影响。研究发现，受性能最弱单体的制约，电池包寿命可缩短约 18%至 23%，约 19%至 27%的潜在能量资源未能得到充分利用。该工作为提高电动汽车电池系统利用效率、延长服役寿命和优化电池管理策略提供了数据依据与量化评价工具。

电动汽车动力电池包通常由数十甚至上百个单体电池集成。受原材料、制造工艺、成组匹配、局部温度分布及实际运行工况等因素影响，即使位于同一电池包内，不同单体在长期运行中会逐渐表现出不同的老化速度。串联电池包因而呈现典型的“木桶效应”：充电时，容量较小的单体最先达到电压上限；放电和大功率运行时，内阻较大的单体率先触及安全边界；当老化最快的单体达到退役阈值时，整个电池包往往需要提前退出使用。此前的相关研究大多基于实验室测试数

据, 单体不一致性在真实道路和长期运行条件下对系统性能和资源损失的影响程度, 仍缺乏长周期、系统性的量化研究。

针对上述问题, 研究团队构建了面向车队尺度的电池单体老化诊断与系统性能评估框架。研究数据覆盖装载三元锂电池的电动乘用车和装载磷酸铁锂电池的电动公交车, 车辆运行时间超过三年, 单车累计里程最高达 30 万公里。团队基于车辆日常采集的电压、电流、温度和荷电状态等信号, 结合电池模型识别不同单体的容量和内阻随里程的老化轨迹; 随后利用神经网络将不同温度、荷电状态和运行条件下获得的估计结果映射至统一参照工况, 以降低季节变化和使用条件差异对老化比较的干扰。在此基础上, 团队建立了涵盖单体健康状态离散度、电池包健康利用率、寿命利用率、荷电状态利用率、功率能力利用率和能量资源利用率的六项评价指标, 系统刻画了单体不一致性对电池包长期服役性能的影响。



研究结果显示, 在该乘用车队中, 较低里程阶段的单体健康差异总体较小; 当累计里程超过约 17 万公里后, 不少车辆中的个别单体开始进入加速老化阶段, 单体间差异随之明显扩大, 但其出现时间和严重程度因车辆而异。按照统一退役阈值进行评估, 单体不一致性使电动乘用车和公交车电池包的可用健康状态分别降低 6.2%和 7.5%; 相对于包内所有单体的平均寿命, 整包寿命分别缩短 17.7%和 22.8%; 由内阻差异造成的功率能力损失分别达到 12.9%和 15.1%。相比之下, 在所研究车辆的充电与均衡策略下, 荷电状态不一致对单次可用充电量的影响通常低于 2%。综合提前退役和荷电状态不一致造成的影响, 电动乘用车和公交车电池包的全寿命能量资源利用率分别仅为 80.7%和 72.9%。换言之, 当最弱单体迫使整个电池包达到退役条件时, 仍分别有约 19.3%和 27.1%的潜在能量资源未得到充分利用。结果说明, 电池包退化不能仅用所有单体的平均老化程度来衡量, 少数提前进入加速老化阶段的单体可能对整包寿命和资源利用产生显著制约。

两类车队的对比进一步显示, 均衡策略与单体不一致性的长期演化密切相关。提高动力电池利用效率需从电池制造、成组筛选和运行管理等多个环节协同控制单体差异。一方面, 降低初始单体差异、优化电池成组策略, 有助于抑制服役过

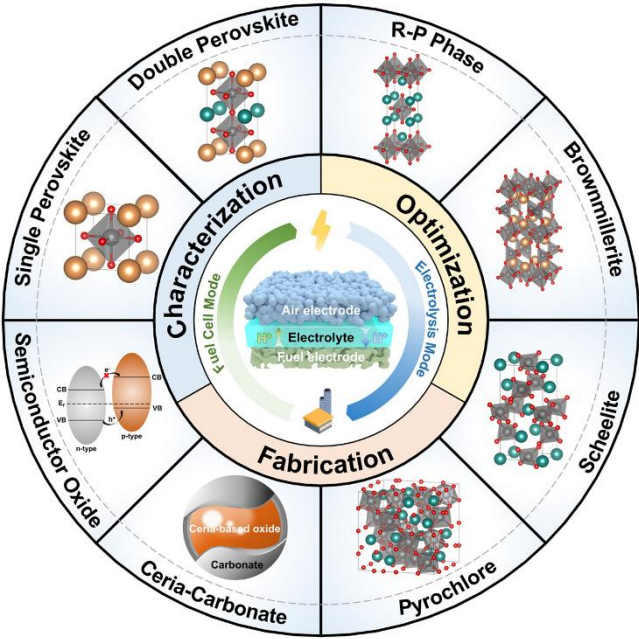
程中不一致性的放大；另一方面，先进均衡控制、热管理和可重构电池系统等技
术，有望缓解“最弱单体”对整包性能的限制。研究提出的量化指标和实车分析框
架，可为电池制造与成组优化、电池管理系统设计、车队健康监测、退役评估和
梯次利用决策提供参考，并帮助评估不同一致性改善技术所能带来的系统级收益。

相关研究成果以“Quantifying the impact of cell-to-cell inconsistency on electric
vehicle battery degradation and utilisation”为题，于近日发表在《自然—能源》
(*Nature Energy*) 上。该工作的共同第一作者为我室博士后周立涛和瑞典查尔姆
斯理工大学边小雷研究员。上述工作得到国家自然科学基金、中国科学院战略性
先导科技专项“能源电催化的动态解析与智能设计”、瑞典研究理事会、瑞典能源
署和欧盟“地平线欧洲”计划等项目的资助。（文/图 周立涛）

文章链接：<https://doi.org/10.1038/s41560-026-02131-5>

我室发表质子导体固体氧化物电解质的综述论文

近日，我室纳米与界面催化研究中心碳基资源电催化转化研究组（523 组）
宋月锋研究员等联合美国佐治亚理工学院刘美林院士合作发表了质子导体固体
氧化物电解质的综述文章，全面梳理了质子导体电解质在可逆固体氧化物电池领
域的研究进展，并系统性分析讨论了该领域当前面临的挑战与机遇。



质子导体可逆固体氧化物电池是一种高效且灵活的能源转化技术,可以实现电能和化学燃料的双向转化,与风电,光伏发电等间歇性可再生能源适配。在电解模式下,它能利用富余绿电进行电解水制氢;燃料电池模式下,可利用氢气、甲烷、氨等轻质燃料反向发电,用于分布式供能、电网负荷调峰。质子导体电解质材料关系电池器件的离子输运,化学耐受性和整体稳定性,是决定电池效率与服役寿命的关键。近年来,有关质子导体电解质的研究从电解质材料的设计优化逐步走向规模化制备及工业化应用,目前正处于成果转化的关键时期。

该综述从构效关系出发,详细梳理了近三十年主流质子导体电解质体系,分类对比了各类电解质材料的离子电导率与适用场景;同时系统归纳了元素掺杂、缺陷调控、界面工程、微结构优化等主要改性策略,全面汇总了有关质子结合与传导能力的多维度表征手段,以及从实验室制备到规模化生产的多种电解质膜制备方法;并提出了一种基于机器学习与实验评估的螺旋式研究框架,为新一代质子导体电解质的理性设计和电池器件的多角度评估提供了方法指引。

该综述以“Recent Advances and Future Perspectives of Proton-Conducting Electrolytes for Reversible Solid Oxide Cells”为题,发表在《化学评论》(*Chemical Reviews*)上。我室 523 组博士研究生杨晨辉为该工作的共同第一作者。上述工作得到国家自然科学基金等项目的支持。(文/图 杨晨辉、宋月锋)

文章链接: <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.5c00529>

新闻动态

我室召开第一届学术委员会第三次会议

8月20日，能源催化转化全国重点实验室（以下简称“实验室”）第一届学术委员会第三次会议在我所召开。实验室学术委员会主任何鸣元院士，委员包信和院士、李灿院士、刘中民院士、孙立成院士、孙学良院士、田中群院士、谢在库院士、杨学明院士、俞书宏院士、张涛院士、赵东元院士、赵天寿院士、黄倬、孟海军、肖成伟、吴青，我所战略咨询委员会委员欧阳明高院士、唐勇院士，我所党委书记王峰、科研和职能部门相关人员近100人通过线上和线下的方式参加会议。会议开幕式由实验室主任陈忠伟院士主持，我所所长刘中民致辞。



刘中民表示，我所高度重视能源催化转化全国重点实验室的建设，并强调实验室建设重在产出实效成果，从体制机制改革到战略方向规划和人才队伍建设需整体统筹、协同推进；希望实验室立足能源领域，紧扣国家重大战略部署开展科研攻关，培育形成一批标志性成果，推动基础研究与技术创新成果向产业端落地转化，为国民经济建设发展贡献力量。

随后，陈忠伟作了实验室工作总结汇报，全面介绍了实验室自重组以来取得的科研成果及未来发展规划，并重点汇报了在催化基础与前沿、化石能源低碳利用、电化学与储能、氢能与多能融合四个方向的重要研究进展及取得的成果。实验室青年科研人员代表也分别作了专题报告。

与会委员围绕实验室整体工作开展了充分研讨，对实验室各项工作给予了肯定，同时也对实验室发展提出了建议。委员们提出，实验室需进一步明晰核心定位，以催化为主线贯通四大研究方向的协同联动，发挥从基础研究到工业化的全链条优势，将科技创新与产业创新融合模式打造为示范样板，孵化标杆示范项目；理顺化石能源与新能源的关系，以氢能为纽带，前瞻布局重点方向，服务我国新

型能源体系建设；在人才队伍建设方面，坚持引育并重，关注人才流动的动态平衡，营造宽松自由的科研环境，保护原创学术思想，保障科研团队规模稳定发展；同时，要重视并加强内部协同合作，积极拓展包括与有色金属、半导体等领域的外部合作，实现合作共赢。

何鸣元对会议进行了总结，他指出，实验室从基础研究到工业化应用成效突出，未来应紧密围绕国家需求，主动服务我国新型能源体系构建，积极布局绿氢、绿碳、循环碳、生物质、废塑料转化等前沿方向，着眼长远发展，加快打造新型能源技术试验基地。同时，要持续加强人才梯队建设，关注青年科研人员成长，切实为年轻人创造更多机会、搭建更广平台。

会议最后，陈忠伟对委员们的悉心指导与宝贵建议表示衷心感谢。他表示，实验室将认真梳理并逐条落实委员提出的意见建议，以此次会议为新的起点，全面助推实验室高质量发展。（文/方堃 图/夏一丁）
