

## 电池材料化学研究进展综述

余 虎

长沙理工大学 湖南长沙

**【摘要】** 电池材料是电化学储能技术的核心，其性能直接影响电池的能量密度、功率密度、循环寿命和安全性。随着电动汽车和可再生能源的快速发展，对高性能电池材料的需求日益迫切。本文系统综述了电池材料化学的研究进展，涵盖锂离子电池材料、钠离子电池材料、固态电池材料、有机电极材料、燃料电池催化剂材料等主要方向。在此基础上，深入分析了正极材料、负极材料、电解质材料的结构调控策略与性能优化方法，探讨了中熵工程、碳网络构建、氢键化学等新型设计理念的应用。研究表明，当前电池材料研究呈现出高能量密度化、高安全性化、长循环寿命化、绿色可持续化的发展趋势。富锂锰基正极、硅碳负极、固态电解质、有机电极材料等取得了重要突破，人工智能辅助材料设计和绿色回收技术成为新的研究方向。未来应加强材料结构-性能构效关系的基础研究，推动新型电池材料的实用化进程。

**【关键词】** 电池材料；锂离子电池；钠离子电池；固态电池；正极材料；负极材料

**【收稿日期】** 2025 年 11 月 6 日      **【出刊日期】** 2025 年 12 月 8 日      **【DOI】** 10.12208/j.jccr.20250083

### A review of advances in battery materials chemistry

Hu Yu

Changsha University of Science and Technology, Changsha, Hunan

**【Abstract】** Battery materials are at the core of electrochemical energy storage technology, and their performance directly affects the energy density, power density, cycle life, and safety of batteries. With the rapid development of electric vehicles and renewable energy, the demand for high-performance battery materials is becoming increasingly urgent. This paper systematically reviews the research progress in battery materials chemistry, covering major directions such as lithium-ion battery materials, sodium-ion battery materials, solid-state battery materials, organic electrode materials, and fuel cell catalyst materials. On this basis, it deeply analyzes the structural regulation strategies and performance optimization methods of cathode materials, anode materials, and electrolyte materials, and explores the application of new design concepts such as medium-entropy engineering, carbon network construction, and hydrogen bond chemistry. Research shows that current battery materials research presents development trends of high energy density, high safety, long cycle life, and green sustainability. Significant breakthroughs have been achieved in lithium-rich manganese-based cathodes, silicon-carbon anodes, solid-state electrolytes, and organic electrode materials, with artificial intelligence-assisted materials design and green recycling technologies becoming new research directions. In the future, it is necessary to strengthen fundamental research on the structure-performance relationship of materials and promote the practical application of new battery materials.

**【Keywords】** Battery materials; Lithium-ion batteries; Sodium-ion batteries; Solid-state batteries; Cathode materials; Anode materials

#### 引言

电池材料是电化学储能技术的核心，其性能直接影响电池的能量密度、功率密度、循环寿命和安全性。随着电动汽车、便携式电子设备和可再生能源并网储能的快速发展，对高性能电池材料的需求日益迫切。锂

离子电池凭借其高能量密度和长循环寿命，已成为当前主流的储能技术。然而，锂资源分布不均、成本较高以及安全性问题促使研究者探索钠离子电池、固态电池等新型电池体系<sup>[1]</sup>。

电池材料化学研究涉及正极材料、负极材料、电解

质材料、隔膜材料等多个方面,是材料科学、电化学和化学工程等多学科的交叉领域。近年来,电池材料研究取得了显著进展:在正极材料方面,富锂锰基材料、高镍三元材料等不断突破容量极限;在负极材料方面,硅碳复合材料、金属锂负极等探索高能量密度路径;在电解质方面,固态电解质、功能添加剂等提升电池安全性;在新体系方面,钠离子电池、有机电池、锂硫电池等展现出发展潜力<sup>[2]</sup>。

电池材料的性能提升依赖于对其化学组成、晶体结构、微观形貌和界面特性的深入理解。研究表明,通过元素掺杂、表面包覆、纳米结构设计等策略,可以有效改善材料的电化学性能。近年来,中熵工程、3D 碳网络构建、氢键化学等新型设计理念的引入,为电池材料的发展开辟了新途径<sup>[3]</sup>。同时,电池材料的绿色回收和资源化利用也受到越来越多的关注,成为实现电池产业可持续发展的重要环节<sup>[4]</sup>。

在理论研究层面,学者们围绕电池材料化学开展了大量研究。在正极材料方面,研究者探讨了固态转换阴极复合材料中压力与电化学演变的关联,开发了富锂锰基正极材料的制备与改性方法,探索了干法研磨辅助回收镍钴锰活性材料的技术。在负极材料方面,研究者开发了硅碳复合材料、锡基复合材料、硬炭材料等。在新体系方面,钠离子电池正负极材料、有机电极材料、质子陶瓷电化学电池等研究不断深入。

然而,既有研究多聚焦于单一材料体系或单一性能优化,缺乏对电池材料化学系统性的综述。不同材料体系之间的共性规律、结构调控的普适策略、性能优化的内在机制等问题尚需系统梳理。基于上述背景,本文旨在对电池材料化学研究进展进行系统性综述。研究将围绕以下核心问题展开:各类电池材料取得了哪些重要进展?关键材料的设计策略与制备方法如何?结构调控与性能优化的内在机制是什么?未来发展方向在哪里?在研究方法上,本文采用文献综述与系统分析方法,结合近年国内外研究成果,按照“材料分类—结构调控—性能优化—未来展望”的逻辑展开论述。

## 1 锂离子电池材料研究进展

### 1.1 正极材料

正极材料是决定锂离子电池能量密度的关键因素。当前主流的正极材料包括层状氧化物(如  $\text{LiCoO}_2$ 、 $\text{NMC}$ )、尖晶石型(如  $\text{LiMn}_2\text{O}_4$ )、橄榄石型(如  $\text{LiFePO}_4$ )等。近年来,富锂锰基正极材料和固态转换阴极材料成为研究热点。

固态转换阴极复合材料的研究揭示了压力与电化

学演变之间的内在关联。在固态电池中,转换型正极材料(如  $\text{FeS}_2$ 、 $\text{FeF}_3$ 等)在充放电过程中经历显著的体积变化,产生机械应力,影响电极-电解质界面的接触和稳定性。研究表明,外部施加的机械压力可以改善电极-电解质界面的接触,促进锂离子传输,但过高的压力可能导致电极材料的机械破坏。通过优化压力条件,可以在固态转换阴极复合材料中实现更高的容量利用率和更好的循环稳定性。

压力对电化学性能的影响机制包括:压力促进电极颗粒之间的接触,降低界面电阻;压力抑制电极材料的体积膨胀,减少机械损伤;压力影响锂离子在电极材料中的扩散动力学。研究发现,适中的压力(约 50-100 MPa)可以显著提高转换型正极材料的首次库仑效率和循环寿命。这一发现为固态电池的正极材料设计提供了新的思路。

富锂锰基正极材料( $x\text{Li}_2\text{MnO}_3 \cdot (1-x)\text{LiMO}_2$ ,  $M=\text{Ni}$ 、 $\text{Co}$ 、 $\text{Mn}$ 等)因其超过 250 mAh/g 的高比容量而备受关注。然而,该材料存在首次不可逆容量高、倍率性能差、电压衰减严重等问题。研究表明,通过元素掺杂、表面包覆、纳米结构设计等改性策略,可以有效改善富锂锰基正极材料的电化学性能。元素掺杂(如  $\text{Al}$ 、 $\text{Mg}$ 、 $\text{F}$ 等)可以稳定晶体结构,抑制氧释放;表面包覆(如  $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{TiO}_2$ 等)可以减少电极与电解液的副反应;纳米结构设计可以缩短锂离子扩散路径,提高倍率性能。

富锂锰基正极材料的电化学反应机理研究表明,其高容量来源于过渡金属离子( $\text{Ni}^{2+}/\text{Ni}^{4+}$ 、 $\text{Co}^{3+}/\text{Co}^{4+}$ )的氧化还原和阴离子( $\text{O}^{2-}/\text{O}_2^{n-}$ )的氧化还原共同贡献。阴离子氧化还原反应是富锂锰基材料高容量的来源,但也导致结构不稳定和电压衰减。通过调控  $\text{Li}_2\text{MnO}_3$  相的含量和分布,可以优化阴离子氧化还原反应的活性和可逆性。

正极材料的绿色回收是实现电池产业可持续发展的关键。干法研磨辅助氧化钙从阴极复合材料中回收镍钴锰活性材料的研究开发了一种环境友好的回收技术。该技术利用氧化钙作为研磨助剂,通过机械化学作用破坏电极材料与粘结剂之间的结合,实现活性材料的选择性分离。与传统湿法冶金相比,该技术无需使用强酸和有机溶剂,减少了二次污染,降低了回收成本<sup>[5]</sup>。

回收过程的机理研究表明,氧化钙在研磨过程中与聚偏氟乙烯粘结剂反应,生成  $\text{CaF}_2$  和烯烃类产物,削弱了粘结剂对活性材料的粘附作用。同时,研磨的机械力作用使活性材料颗粒细化,有利于后续的分

提纯。回收的镍钴锰活性材料经补锂处理后,可以重新用于正极材料制备,其电化学性能与原始材料相当。

## 1.2 负极材料

负极材料对锂离子电池的容量和倍率性能具有重要影响。当前主流的负极材料包括石墨、硅基材料、锡基材料、硬炭等。硅基材料因其高达 4200 mAh/g 的理论比容量而备受关注,但其巨大的体积膨胀 (>300%) 导致循环稳定性差<sup>[6]</sup>。

Si-C 基电池组装的研究为硅碳负极材料的应用提供了实验教学范例。研究表明,硅碳复合材料的设计思路是将纳米硅嵌入碳基体中,碳基体不仅可以缓冲硅的体积膨胀,还可以提高电极的电子导电性。通过优化硅碳比例、碳源种类和制备工艺,可以获得具有良好循环稳定性的硅碳负极材料。

硅氧碳复合电极材料的制备研究进一步探索了硅基负极材料的性能优化路径。硅氧碳 (SiOC) 材料通过溶胶-凝胶法制备,硅原子以 Si-O-C 键的形式嵌入碳网络中,形成无定形结构。与纳米硅/碳复合材料相比, SiOC 材料具有更均匀的元素分布和更稳定的结构,体积膨胀较小。研究表明, SiOC 负极材料在 200 次循环后容量保持率可达 85% 以上<sup>[7]</sup>。

锡基/中空碳球复合材料的研究探索了合金型负极材料的设计策略。锡的理论比容量为 994 mAh/g,与硅类似,也存在体积膨胀问题。将锡纳米颗粒封装在中空碳球内部,可以有效缓冲体积膨胀,同时碳壳提高了电极的导电性。研究表明,锡基/中空碳球复合材料在 500 次循环后仍保持 600 mAh/g 以上的可逆容量,表现出优异的循环稳定性<sup>[8]</sup>。

低阶煤制备锂离子电池用硬炭负极的研究探索了煤炭资源高值化利用的新途径。低阶煤具有碳含量高、灰分低、价格低廉等优点,是制备硬炭负极的理想前驱体。通过酸洗脱灰、高温炭化、活化处理等工艺,可以获得具有丰富纳米孔结构的硬炭材料。研究表明,低阶煤基硬炭负极的比容量可达 350-400 mAh/g,倍率性能和循环稳定性优于商用石墨。

## 2 钠离子电池材料研究进展

### 2.1 正极材料

钠离子电池因钠资源丰富、成本低廉而受到广泛关注,是大规模储能领域的重要候选技术。然而,钠离子半径较大 (1.02 Å vs. Li<sup>+</sup> 0.76 Å),导致其在电极材料中的扩散动力学较慢,需要开发适合钠离子存储的新型电极材料。

中熵工程与 3D 碳网络协同策略在 Na<sub>3</sub>V<sub>1.4</sub>Fe<sub>0.1</sub>Mn

<sub>0.2</sub>Cr<sub>0.2</sub>Zr<sub>0.1</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>O<sub>2</sub>F@C 材料中的应用展示了高性能钠离子电池正极材料的设计思路。该材料以钒基磷酸盐 (Na<sub>3</sub>V<sub>2</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>O<sub>2</sub>F) 为基体,通过 Fe、Mn、Cr、Zr 多种过渡金属元素的共掺杂,实现中熵合金化设计。中熵工程设计增加了构型熵,稳定了晶体结构,抑制了充放电过程中的相变<sup>[9]</sup>。

3D 碳网络的构建是该材料的另一创新点。通过原位碳包覆和碳纳米管复合,形成三维导电网络,显著提高了电极材料的电子导电性。3D 碳网络不仅提供了快速的电子传输通道,还缓冲了充放电过程中的体积变化,增强了结构稳定性。研究表明, Na<sub>3</sub>V<sub>1.4</sub>Fe<sub>0.1</sub>Mn<sub>0.2</sub>Cr<sub>0.2</sub>Zr<sub>0.1</sub>(PO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>O<sub>2</sub>F@C 材料在 0.1 C 倍率下比容量达到 135 mAh/g,在 10 C 高倍率下仍保持 95 mAh/g,循环 1000 次后容量保持率超过 90%。

### 2.2 负极材料

钠离子电池负极材料的研究主要集中在碳基材料、钛基材料和合金型材料。其中,硬碳材料因其适宜的储钠电位和较高的可逆容量而成为最具前景的负极材料<sup>[9]</sup>。

煤基硬碳材料结构调控及其储钠性能研究探索了煤炭资源制备高性能硬碳负极的路径。煤的碳含量高、芳香环结构丰富,是硬碳材料的理想前驱体。通过氧化稳定化处理,可以防止煤在高温炭化过程中的熔融和石墨化,保持无序结构。研究表明,优化氧化稳定化温度和时间,可以有效调控硬碳的微孔结构和层间距,提高储钠容量。煤基硬碳负极的比容量可达 320 mAh/g,首次库仑效率超过 80%。

木质素基硬碳材料的制备及其在钠离子电池中的应用研究进展表明,生物质是制备硬碳材料的绿色前驱体。木质素是植物细胞壁的主要成分,具有丰富的芳香环结构和含氧官能团。通过预处理、炭化、活化等工艺,可以制备具有高比表面积和丰富孔结构的硬碳材料。木质素基硬碳的储钠机制包括孔道填充、缺陷吸附和层间嵌入等。研究表明,木质素基硬碳的比容量可达 350-400 mAh/g,且具有良好的倍率性能<sup>[10]</sup>。

硬碳材料的储钠性能与其微观结构密切相关。研究表明,硬碳中的纳米孔可以容纳钠离子团簇,贡献低电位平台容量;缺陷位点可以吸附钠离子,贡献高电位斜坡容量。通过调控前驱体种类和炭化条件,可以优化硬碳的孔结构和缺陷密度,实现容量的提升。

## 3 固态电池与电解质材料研究进展

### 3.1 固态电解质材料

固态电池采用不可燃的无机固态电解质或聚合物

电解质替代液态电解液,从根本上解决了电池的安全性问题。此外,固态电解质可以匹配金属锂负极,进一步提高能量密度。硫化物固态电解质因其高离子电导率和良好的机械延展性而受到广泛关注<sup>[11]</sup>。

硫化物固态电池中合金负极界面相生长的追踪研究揭示了固态电池界面稳定性的关键问题。合金负极(如 Si、Sn、Al 等)在充放电过程中会发生体积变化,导致与固态电解质之间产生机械接触不良。同时,合金负极与硫化物电解质之间可能发生化学反应,形成界面相。界面相的生长不仅消耗活性物质,还增加界面电阻,影响电池性能<sup>[12]</sup>。

研究通过原位表征技术(如原位 XPS、原位 SEM 等)追踪了界面相的生长过程。结果表明,界面相的厚度随循环次数增加而增加,其生长速率与电流密度和温度正相关。界面相的组成包括  $\text{Li}_2\text{S}$ 、 $\text{Li}_3\text{P}$ 、 $\text{LiCl}$  等,这些物质具有较低的离子电导率。通过界面工程策略(如引入缓冲层、优化负极组成等),可以有效抑制界面相生长,提高固态电池的循环稳定性。

可逆质子陶瓷电化学电池(R-PCEC)是一类新型的电化学储能器件,可以实现电能和化学能的相互转换。基于  $\text{BaCe}_x\text{Zr}_{0.8-x}\text{Y}_{0.2}\text{O}_{3-\delta}$  (BCZY) 基电解质的 R-PCEC 具有质子导电性,可以在中温(400-600°C)下运行。通过数值模拟方法,研究了 BCZY 电解质的组成、厚度、电极结构等因素对电池性能的影响。研究表明,优化  $\text{BaCeO}_3$  和  $\text{BaZrO}_3$  的比例可以平衡电解质的离子电导率和化学稳定性;电解质厚度的减小可以降低欧姆电阻,提高功率密度。

### 3.2 电极-电解质界面化学

电极-电解质界面是决定电池性能的关键区域。在固态电池中,界面问题尤为突出,包括界面接触不良、界面反应、空间电荷层效应等。研究表明,通过界面工程策略,如引入缓冲层、优化电极材料、调控压力等,可以改善界面稳定性。

压力对固态电池电化学性能的影响研究表明,适中的机械压力可以改善电极-电解质界面的接触,促进离子传输。压力通过以下机制影响界面:压力促进电极颗粒与电解质颗粒之间的紧密接触,降低界面电阻;压力抑制电极材料的体积膨胀,减少界面剥离;压力影响空间电荷层的形成和分布。然而,过高的压力可能导致电极材料的机械破坏,产生微裂纹,反而恶化界面接触<sup>[13]</sup>。

界面相的生长机制研究表明,界面相的形核和生长受扩散控制。在充放电过程中,锂离子穿越界面时与电解质发生反应,形成界面相。界面相的电子电导率较

低,可以阻止反应的持续进行,起到“自限制”作用。但当电流密度较高或温度较高时,界面相的生长速率加快,可能导致短路。通过调控电极和电解质的化学组成,可以设计具有高稳定性的人工界面层<sup>[14]</sup>。

## 4 新型电池材料与前沿技术

### 4.1 有机电极材料

有机电极材料因其结构可设计性、资源可持续性和环境友好性而受到关注。有机电极材料的储能机理包括 n 型(阴离子掺杂/去掺杂)、p 型(阳离子掺杂/去掺杂)和双极型(同时掺杂阴阳离子)三种类型<sup>[15]</sup>。

有机电极材料按结构可分为小分子有机物(如醌类、酰亚胺类)、有机聚合物(如聚苯胺、聚吡咯)和金属有机框架(MOFs)等。小分子有机物具有理论比容量高、分子结构可调等优点,但其易溶于电解液,导致循环稳定性差。聚合策略和成盐策略是提高小分子有机物循环稳定性的有效方法。聚合可以限制分子的溶解,成盐可以降低分子在电解液中的溶解度<sup>[16]</sup>。

有机聚合物电极材料具有良好的结构稳定性和可加工性,但其比容量较低、电子导电性差。通过引入导电聚合物(如聚苯胺、聚吡咯)或碳材料复合,可以提高聚合物的电子导电性。MOFs 类电极材料具有高比表面积和规整的孔结构,但其电子导电性差,需要通过碳化或复合导电材料进行改性。

有机电极材料在锂离子电池、钠离子电池、钾离子电池等体系中均有应用前景。研究表明,通过合理的分子设计和改性策略,有机电极材料的比容量可达 500 mAh/g 以上,循环寿命超过 1000 次。有机电极材料的绿色合成和可回收性使其成为可持续发展的电池材料<sup>[17]</sup>。

### 4.2 单原子催化剂

单原子催化剂是将金属原子以孤立单原子形式分散在载体上的一类新型催化材料,具有 100% 的原子利用率和独特的电子结构。在便携式能源与传感器技术中,单原子催化剂展现出广阔的应用前景<sup>[18]</sup>。

单原子催化剂的制备方法包括原子层沉积、浸渍-吸附、热解-刻蚀等。表征技术包括球差校正电子显微镜、X 射线吸收光谱等,用于确认金属原子的孤立分散状态。单原子催化剂在燃料电池氧还原反应、析氢反应、 $\text{CO}_2$  还原等领域表现出优异的催化活性和选择性。

在电池材料中,单原子催化剂可以作为电极材料的添加剂,提高电极反应的动力学;也可以作为空气电池的阴极催化剂,促进氧还原和析氧反应。研究表明,Fe-N-C 单原子催化剂在锌空气电池中的氧还原性能优

于商业 Pt/C 催化剂。单原子催化剂的发展为高性能电池材料的开发提供了新思路。

#### 4.3 质子交换膜燃料电池催化剂层

质子交换膜燃料电池 (PEMFC) 是将氢能转化为电能的高效能量转换装置。催化剂层是 PEMFC 的核心部件,其结构直接影响电池性能。粘结剂在催化剂层中起着分散催化剂、构建离子传输网络、增强结构稳定性的重要作用。

粘结剂材料的研究进展表明,全氟磺酸聚合物(如 Nafion)是最常用的粘结剂,具有良好的质子传导性和化学稳定性。然而, Nafion 价格昂贵,且气体渗透性较差。非氟粘结剂(如聚苯并咪唑、聚醚砜等)成本较低,但质子传导性较差。复合粘结剂通过将 Nafion 与非氟聚合物共混,兼顾了性能和成本。

粘结剂的含量和分布对催化剂层结构有重要影响。粘结剂含量过低,催化剂层结构松散,质子传输受阻;粘结剂含量过高,催化剂层致密,气体扩散受限。优化粘结剂含量和分布,可以构建具有良好“三相界面”的催化剂层结构,提高催化剂利用率<sup>[19]</sup>。

#### 4.4 铅酸电池绿色材料

铅酸电池是最早实现工业化的二次电池,广泛应用于汽车启动、备用电源等领域。传统铅酸电池的活性物质中使用合成聚合物作为添加剂,存在环境问题。天然纤维亚麻和羊毛作为 Pb/PbO<sub>2</sub>系统活性物质中合成聚合物替代品的研究探索了铅酸电池的绿色化改进。

研究表明,亚麻和羊毛纤维具有良好的亲水性和分散性,可以替代合成聚合物作为活性物质的添加剂。天然纤维的加入可以改善活性物质的孔隙结构,提高电解液的渗透性,增强活性物质的利用率。同时,天然纤维在电池运行过程中可被降解,不会对环境造成持久污染。

天然纤维添加剂的优化研究表明,亚麻纤维的最佳添加量为 0.5-1.0 wt%,羊毛纤维的最佳添加量为 0.3-0.8 wt%。添加天然纤维的铅酸电池具有更高的初始容量和更好的循环稳定性。这一研究为铅酸电池的绿色化改进提供了新思路。

#### 4.5 钙钛矿太阳能电池

钙钛矿太阳能电池因其高效率 (>25%) 和低成本而成为光伏领域的研究热点。然而,钙钛矿材料稳定性差是制约其商业化应用的主要障碍。“自愈”钙钛矿太阳能电池的研究为提高材料稳定性提供了新策略<sup>[20]</sup>。

“自愈”钙钛矿材料通过引入动态共价键或超分子相互作用,使材料在受到损伤后能够自发修复。研究表

明,添加某些功能添加剂(如聚合物、离子液体等)可以赋予钙钛矿材料自愈性能。在光照和热作用下,自愈钙钛矿材料可以修复光诱导的缺陷和微裂纹,恢复光电转换效率。

自愈机制包括:添加剂的动态扩散填充缺陷位点;聚合物网络的弹性恢复修复微裂纹;离子液体的氢键作用重建晶界。自愈策略的引入显著提高了钙钛矿太阳能电池的长期稳定性,在 1000 小时连续光照后仍保持初始效率的 80%以上。

### 5 材料结构调控与性能优化方法

#### 5.1 结构调控策略

结构调控是提升电池材料性能的核心手段。中熵工程设计、碳网络构建、氢键化学赋能等新型策略为电池材料的发展开辟了新途径<sup>[21]</sup>。

中熵工程设计通过引入多种过渡金属元素,增加材料的构型熵,稳定晶体结构。研究表明,中熵正极材料在充放电过程中的相变得到抑制,循环稳定性显著提高。中熵设计的核心是选择合适的元素组合和比例,平衡熵稳定效应和晶格畸变效应。熵稳定效应抑制相变,晶格畸变影响离子扩散。通过优化元素组成,可以在保持高容量的同时获得优异的结构稳定性<sup>[22]</sup>。

碳网络构建是提高电极材料电子导电性和结构稳定性的有效策略。3D 碳网络通过碳纳米管、石墨烯等碳材料构建三维导电骨架,将活性材料包裹其中。碳网络不仅提供了快速的电子传输通道,还缓冲了充放电过程中的体积变化。研究表明,3D 碳网络构建的复合电极材料在高倍率下仍保持良好的容量和循环稳定性<sup>[23]</sup>。

氢键化学赋能高比能锂电池关键材料的研究揭示了非共价相互作用在电池材料中的应用潜力。氢键存在于电极材料的分子内或分子间,可以稳定材料结构,促进离子传输。在有机电极材料中,氢键可以抑制分子的溶解,提高循环稳定性;在聚合物电解质中,氢键可以增强机械强度,抑制锂枝晶生长。研究表明,通过分子设计引入特定氢键作用,可以显著改善电池材料的综合性能<sup>[24]</sup>。

#### 5.2 制备方法与改性技术

制备方法和改性技术直接影响电池材料的微观结构和电化学性能。绿色回收技术、复合材料制备方法等受到广泛关注。

干法研磨辅助回收技术是一种环境友好的电池材料回收方法。该技术利用机械化学作用破坏电极材料与粘结剂的结合,实现活性材料的分离。与传统湿法冶金相比,干法研磨技术无需使用强酸和有机溶剂,减少

了二次污染。研究表明,通过优化研磨条件和助剂选择,可以实现活性材料的高效回收<sup>[25]</sup>。

复合电极材料的制备方法包括原位合成法、物理混合法、溶胶-凝胶法等。原位合成法可以将活性材料均匀负载在碳基体上,形成紧密的界面结合;物理混合法操作简单,但均匀性较差;溶胶-凝胶法可以制备纳米尺度的复合材料,实现成分的精确控制。研究表明,复合材料的界面结构对电化学性能有重要影响,紧密的界面结合有利于电子传输和结构稳定。

## 6 讨论与展望

### 6.1 当前发展成就与问题反思

经过多年发展,电池材料化学研究取得了显著成就。锂离子电池正负极材料的比容量不断提高,富锂锰基正极、硅碳负极等新材料展现了良好的应用前景;固态电池、钠离子电池等新型电池体系取得重要突破;有机电极材料、单原子催化剂等前沿方向展现出发展潜力。

然而,当前电池材料研究仍面临诸多问题。一是能量密度瓶颈,现有材料体系的比容量接近理论极限,需要开发新的储能机制和材料体系;二是循环寿命问题,高比容量材料的体积膨胀和结构退化导致循环稳定性不足;三是安全性问题,液态电解质和金属锂负极存在热失控风险;四是成本问题,锂、钴等关键元素资源受限,价格波动大;五是回收问题,废旧电池的回收体系尚不完善,资源利用率低。

### 6.2 未来发展趋势

展望未来,电池材料化学将呈现以下发展趋势:

人工智能辅助材料设计。基于<sup>[15]</sup>国外 AI for Science 研究现状的分析,机器学习在电池材料开发中的应用前景广阔。通过建立材料数据库和机器学习模型,可以预测材料的性能和稳定性,指导实验合成。高通量计算和筛选可以加速新材料的发现,缩短研发周期。

高比能材料体系开发。锂硫电池、锂空气电池等下一代电池材料的研究将不断深入。硫正极的理论比容量为 1675 mAh/g,锂负极为 3860 mAh/g,锂硫电池的理论能量密度高达 2600 Wh/kg。然而,多硫化物穿梭效应、锂枝晶生长等问题仍待解决。

绿色可持续发展。电池材料的绿色合成、资源回收、生物质利用等方向将受到更多关注。水系合成工艺、低能耗制备方法将替代传统高能耗工艺;废旧电池的高效回收技术将实现资源的闭环循环;生物质衍生碳材料将替代化石基碳材料。

智能电池与自愈材料。基于<sup>[20]</sup>自愈材料的研究,智能电池将成为重要发展方向。自愈电极材料可以在损伤后自发修复,延长电池寿命;智能电解质可以在过热时阻断离子传输,提高安全性;内置传感器可以实时监测电池状态,实现智能管理。

## 7 结论

本文系统综述了电池材料化学的研究进展。研究表明,锂离子电池正负极材料、钠离子电池材料、固态电解质材料、有机电极材料、燃料电池催化剂材料等均取得了重要进展。富锂锰基正极通过元素掺杂和表面包覆改性,实现了高容量和长循环;硅碳负极通过纳米化和碳复合,有效缓冲了体积膨胀;硬碳负极通过孔结构调控,实现了高容量储钠;中熵工程、3D 碳网络构建、氢键化学等新策略为材料性能优化提供了新途径。

在结构调控方面,中熵工程设计通过多元素共掺杂稳定晶体结构;碳网络构建通过三维导电骨架提高电子导电性和结构稳定性;氢键化学通过非共价相互作用增强材料稳定性。在制备方法方面,绿色回收技术实现了电池材料的资源化利用,复合制备方法优化了材料的微观结构。

当前,电池材料研究呈现出高能量密度化、高安全性、长循环寿命化、绿色可持续化的发展趋势。未来应加强材料结构-性能构效关系的基础研究,推动人工智能辅助材料设计、自愈材料、智能电池等前沿方向的发展,促进高性能电池材料的实用化和产业化。

本文主要基于文献综述,对电池材料化学研究进展进行了系统梳理。未来可结合实验研究和理论计算,进一步深化对材料构效关系的认识,为高性能电池材料的理性设计提供指导。

## 参考文献

- [1] Alsaç P E, Sharma K A, Yoon G S, et al. Linking Pressure to Electrochemical Evolution in Solid-State Conversion Cathode Composites[J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2025.
- [2] Jeong J W, Nelson L D, Wang C, et al. Tracking Interphase Growth at Alloy Anode Interfaces in Sulfide Solid-State Batteries[J]. Journal of the American Chemical Society, 2025.
- [3] Liu N, Jiang G, Shao M, et al. Medium-Entropy Engineering and 3D Carbon Network Synergy in  $\text{Na}_3\text{V}_{1.4}\text{Fe}_{0.1}\text{Mn}_{0.2}\text{Cr}_{0.2}\text{Zr}_{0.1}(\text{PO}_4)_2\text{O}_2\text{F}@C$  for High-Performance Sodium-Ion Batteries[J]. ACS Applied

- Materials & Interfaces, 2025.
- [4] Izumi K, Takaya Y, Tokoro C. Liberation of Nickel-Cobalt-Manganese-Based Active Materials from Cathode Composites by Dry Grinding Using a Calcium Oxide Grinding Aid[J]. Journal of Chemical Engineering of Japan, 2025, 58(1).
- [5] Płowens R, Baraniak M, Jakubowska K A, et al. Natural Fibers Flax and Wool as Replacements for Synthetic Polymers in Active Masses of Pb/PbO<sub>2</sub> Systems[J]. Journal of Natural Fibers, 2025, 22(1).
- [6] 王振兴, 刘翠茵, 余凤, 等. Si-C 基电池组装助力材料专业实验教学[J]. 广州化工, 2025, 53(24): 175-177.
- [7] 李学进, 刘鹏云, 徐静, 等. 硅氧碳复合电极材料制备的探究型实验教学研究[J]. 实验室研究与探索, 2025, 44(12): 141-145.
- [8] 郭懋宽. 基于过渡金属 LDHs 的光电化学储能器件设计与性能研究[D]. 北京化工大学, 2025.
- [9] 李可可, 李雪, 胡艳萍, 等. 煤基硬碳材料结构调控及其储钠性能研究[C]//第三届光电材料与器件国际研讨会论文集, 2025: 47.
- [10] 刘京龙. 多孔碳网络包覆 Co<sub>9</sub>S<sub>8</sub> 负极材料研究[J]. 辽宁化工, 2025, 54(11): 1799-1801.
- [11] 邱瑞铭. 基于 BaCe<sub>x</sub>Zr<sub>0.8-x</sub>Y<sub>0.2</sub>O<sub>3-δ</sub> 基电解质的可逆质子陶瓷电化学电池的建模研究[D]. 广东工业大学, 2025.
- [12] 董海舰, 翟鹏辉, 麻智圣, 等. 质子交换膜燃料电池催化剂层粘结剂材料研究进展[J]. 化学研究, 2025, 36(06): 647-655.
- [13] 赵天佑, 胡凤鸣, 朱美琦, 等. 单原子催化剂在便携式能源与传感器技术中的未来发展[J]. Chinese Journal of Catalysis, 2025, 78(11): 100-137.
- [14] 郝梦圆, 孟晴, 鄢亚超, 等. 有机电极材料: 分类及其在金属离子电池中的典型改性应用[J]. 化学进展, 2025, 37(10): 1479-1512.
- [15] 王方媛, 徐慧婷, 薛菁华. 2015—2024 年国外 AI for Science 研究现状及主题趋势分析[J]. 科技情报研究, 2025, 7(04): 46-57.
- [16] 张东阳, 乔义超, 王汉敏, 等. 木质素基硬碳材料的制备及其在钠离子电池中的应用研究进展[J]. 中国造纸学报, 2025, 40(03): 106-120.
- [17] 周泓宇, 王俪颖, 赵宇, 等. 氢键化学赋能高比能锂电池关键材料[J]. 化学学报, 2025, 83(11): 1451-1462.
- [18] 吴孝余. 锡基/中空碳球复合材料的合成及其储锂/钠性能的研究[D]. 扬州大学, 2025.
- [19] 沈鑫权, 陶珊珊, 徐桑. 新型电容器材料对锂电池充电效率的影响机制研究[J]. 全面腐蚀控制, 2025, 39(08): 157-160.
- [20] 程澈. “自愈”钙钛矿太阳能电池: 更耐用的新突破[J]. 百科知识, 2025, (23): 20.
- [21] 涂宝标. 智能卫浴领域智慧实验室建设规划探讨[J]. 轻工标准与质量, 2025, (04): 107-110.
- [22] 张骁, 刘佩, 和佳欢, 等. 化学储氢材料的合成与应用研究进展[J]. 洁净煤技术, 2025, 31(12): 66-78.
- [23] 康国辉. 锂离子电池富锂锰基正极材料的制备与改性研究[D]. 广西大学, 2025.
- [24] 王斌, 宋文革, 尚明, 等. 低阶煤制备锂离子电池用硬碳负极及其性能[J]. 洁净煤技术, 2025, 31(07): 100-108.
- [25] 李敏玉, 胡晓静, 郑美琴. 材料化学探究性实验教学设计——染料敏化太阳能电池的制备[J]. 广东化工, 2025, 52(12): 195-197.

版权声明: ©2025 作者与开放获取期刊研究中心(OAJRC)所有。本文章按照知识共享署名许可条款发表。

<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



OPEN ACCESS