
转化型高比能锂电池用催化材料的新设计准则

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/39250.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

转化型高比能锂电池用催化材料的新设计准则。在转化型高比能锂电池中，固相绝缘放电产物的沉积会覆盖催化位点，阻断催化材料与后续反应物间的电子传输，导致催化活性丧失和电池性能衰减。为解决这一难题，中国科学院金属研究所成会明院士团队重新定义了电池催化材料的设计准则，提出以产物电子性质为核心的创新思路，突破了常规热力学描述符的局限性。所发展的催化材料能改变产物的绝缘性，从而维持高效的催化活性，显著提升锂硫、锂氧电池的性能。基于此构建的安时级软包锂硫电池能量密度超过450 Wh/kg。

2026年4月15日，相关成果以Breaking insulating barriers in solid-phase conversion reactions with dual-atom catalysts for high-energy lithium batteries为题发表在Nature Catalysis期刊上。论文通讯作者是孙振华研究员、李峰研究员和成会明院士，第一作者是于彤副研究员和肖茹博士。

催化材料与反应物间的电子转移是实现催化活性的关键。有效的电子传输能够提升转化反应效率，是发挥转化型电池能量密度的核心所在。然而，不同于典型催化体系中反应物吸附-催化反应-产物脱附过程，金属-硫、金属-空气等高比能电池中的转化反应呈现反应物吸附-催化反应-产物沉积特征。固相绝缘产物沉积随着反应进行，会持续覆盖催化位点，阻断催化材料与后续反应物间的电子传输，导致催化活性丧失。因此，对于转化型高比能锂电池而言，催化材料面临的核心挑战不仅是提升本征催化活性，更是在固相产物覆盖的情况下维持有效的电子传输，从而实现转化反应的持续高效进行。

在这项工作中，成会明院士团队聚焦于电池催化材料与反应物质间的电子输运，重新定义了电池催化材料的设计准则，提出以产物电子性质为核心的创新思路，突破了常规热力学描述符的局限性。基于该准则发展的催化材料能改变产物的绝缘性，在反应过程中，维持高效的催化活性，显著提升了转化型锂硫电池与锂氧电池的性能。所构建的安时级软包锂硫电池的能量密度超过450 Wh kg⁻¹，验证了上述准则在实际复杂体系中的有效性。

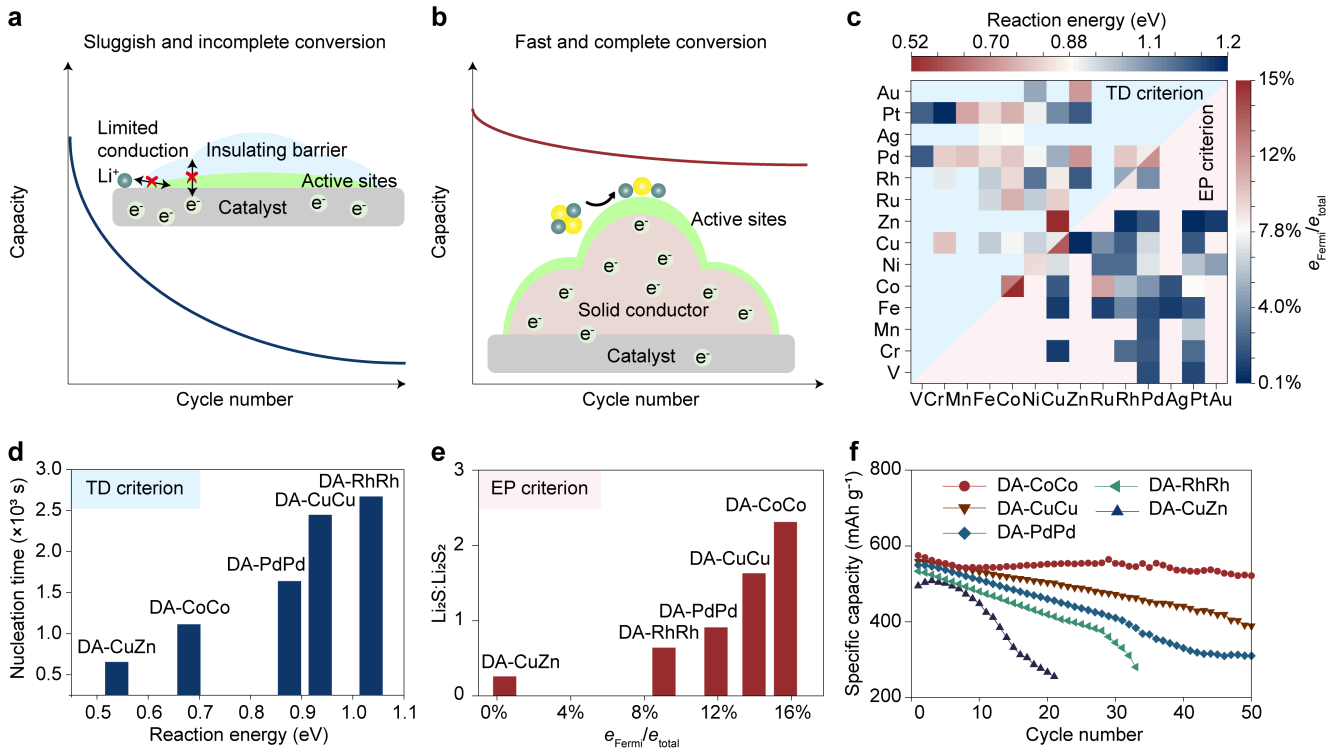


图1：催化材料的热力学性质和产物电子性质对锂硫电池固相转化反应的作用。

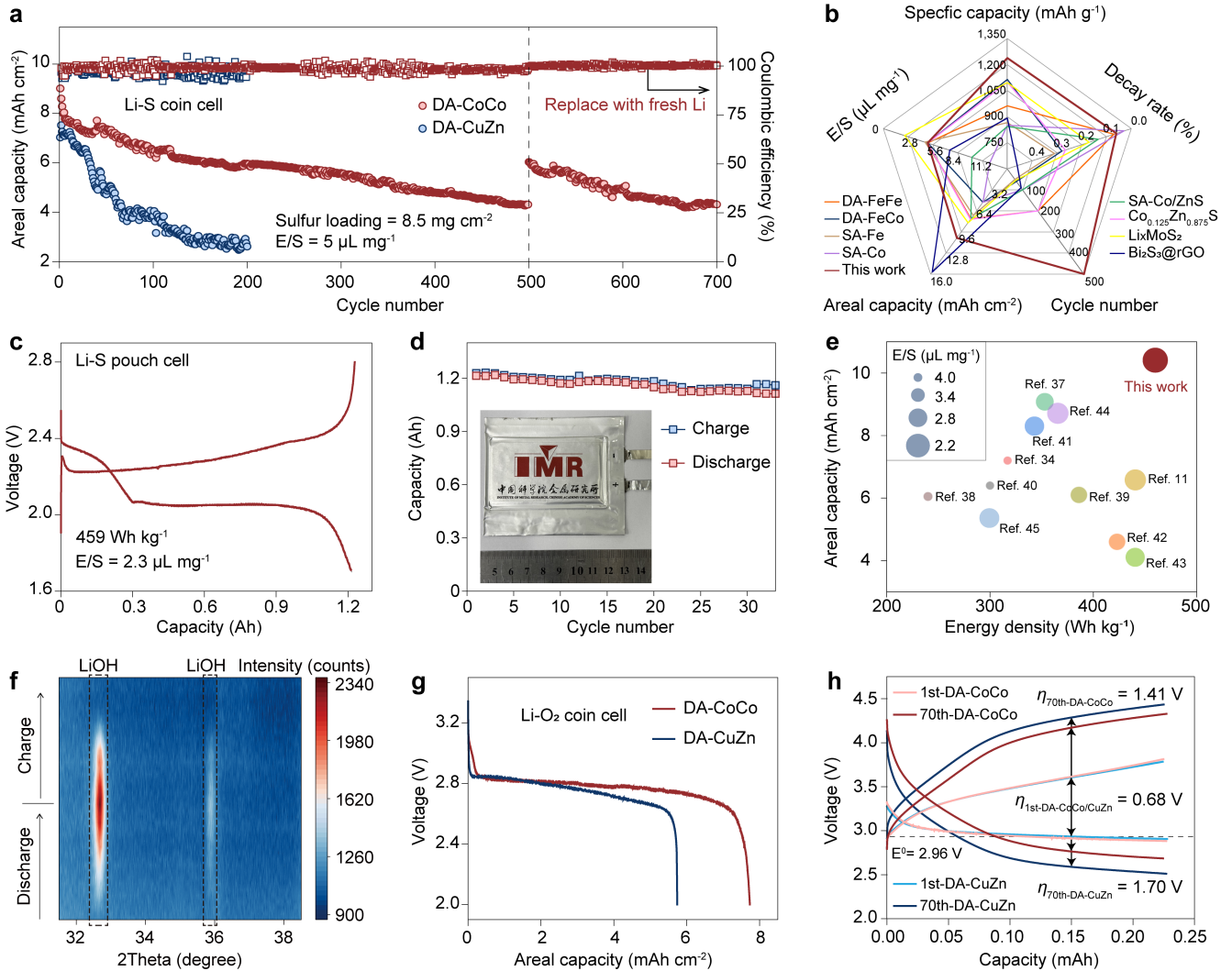


图2：双原子催化材料促进锂硫和锂空气电池的性能提升。

该研究不仅为受绝缘固相转化限制的电化学体系确立了普适性设计原则，也为电催化反应设计开辟了新方向。（来源：科学网）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41929-026-01525-8>

作者：成会明等来源：《自然-催化》

更多科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发