
摆出196种方案后，他们“搭”出高性能锂硫电池

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/39674.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！

摆出196种方案后，他们“搭”出高性能锂硫电池。近年来，低空经济已成为了人们关注的一个热点领域。发展低空经济离不开无人机，无人机能飞多远、续航多久，关键又在于电池能提供多少电量，即所谓能量密度有多大。

当前，常规的锂离子电池已逼近能量密度的上限，理论能量密度更高的锂硫电池正成为无人机迈向长续航的重要候选电池体系。接受《中国科学报》采访时，清华大学深圳国际研究生院副教授周光敏说。

周光敏团队的一项重要工作，就是在现有基础上尽可能提升锂硫电池的能量密度。

不久前，他们的这项工作取得了突破性进展——他们成功设计出一种新的硫电化学预分子介体，借助这种介体，可极大提升锂硫电池的能量密度，显著延长无人机的续航时间。相关成果近日在线发表于《自然》。

有意思的是，他们的这项成果是以搭积木的方式，搭出来的。

两个关键问题

锂离子电池与锂硫电池的性能差别，源自其内部结构的不同。

传统锂离子电池的工作原理很简单，即通过锂离子在电池正负极之间的插嵌反应实现充放电。论文共同第一作者、清华大学深圳国际研究生院博士生高润华说，现有商用锂离子电池的正极多由锂氧化物材料或磷酸铁锂材料组成，电池充电时，锂离子从正极材料跑出，钻进由石墨构成的负极中；放电时又从石墨回到正极。

锂硫电池的工作原理却要复杂得多——电池的正极为单质硫，负极则是锂金属。放电时，锂金属在负极失去电子并生成锂离子；在正极侧，单质硫被逐步还原，并与锂离子结合，依次生成多硫化锂中间体，最终转化为固态产物硫化锂。

多硫化锂中间体有很多类型，比如由8个硫原子和2个锂原子组成的八硫化二锂（ Li_2S_8 ），或者由6个硫原子和2个锂原子组成的六硫化二锂（ Li_2S_6 ），以及四硫化二锂（ Li_2S_4 ）和二硫化锂（ Li_2S_2 ）。这些化合物就像长度不同的链条，硫原子越多，链条越长，不同的链条之间还会相互转化，最终生成固态终产物硫化锂（ Li_2S ）。

锂硫电池的充放电过程，正是在这一系列硫物种的可逆转化中完成的。

这就带来两个关键问题。高润华说，一是长链条的多硫化锂（如 Li_2S_8 、 Li_2S_6 ）很容易溶解在电池内部的电解液中，这会导致活性物质的损失，从而降低电池充放电的可逆性。

二是整个反应网络十分复杂，中间还会经历固态和液态的状态变化——单质硫是固态，长链多硫化锂容易溶解在电解液中，短链产物和最终产物又变成固态。这种固—液—固之间的转变速度很慢，导致转化效率难以提升。

换句话说，提升锂硫电池能量密度的关键，就是如何让这些多硫化物之间的转化更有秩序、速度更快，同时让长链条的多硫化锂尽量少地溶解、流失。周光敏说。

寻找最优催化剂

研究中，周光敏团队想到的解决之道，是在上述化学反应中添加一种特殊的催化剂——预分子介体。

之所以称其为‘预分子介体’，是因为这种物质被加入电解液中时，会处于一种未激活的‘待命’状态，激活它的‘密码’便是多硫化锂。周光敏解释说，该物质的分子结构中存在着一个氯原子，当电池内部产生多硫化锂时，后者就会将该结构中的氯原子挤走，并占据这一位置，由此形成一种新的分子。该分子会进一步和多硫化物发生动态配位作用，形成分子复合体。

这会带来两个好处。

这种分子复合体不易溶于电解液，因此能防止长链多硫化物的溶解和流失；同时，该分子复合体的反应速度要远快于单独存在的多硫化锂。周光敏说，换言之，这种物质的存在，能同时解决此前硫转化反应时的反应动力学差、速度慢、效率低的问题。

这一高效介导机制的发现令团队很是兴奋，但新问题也随之出现——如何设计预分子介体的分子结构，才能最大限度提升它的催化效果？

高润华告诉《中国科学报》，预分子介体的最初分子结构没有任何装饰，但如果在其结构的侧链加上不同的官能团，就能在一定程度上改变其功能。

这个过程有些类似于搭积木。高润华解释说，分子骨架就像积木拼搭的基础底板，侧链官能团作为功能分子的组成部分，就像一块块‘积木’。不同积木的种类、大小，以及在底板上的不同位置，都会影响最终拼搭出的分子具有什么功能。

传统的功能分子设计类似于凭经验试着搭积木。凭借经验把积木换一下、位置改一下的方式，虽然也能找到一些有效分子，但效率相对较低，也不容易从中总结出普遍规律。高润华说。

周光敏团队并不愿这样做，他们想到了量子化学计算和机器学习筛选。

我们构建了196种候选分子作为‘积木’，并借助量子化学计算，理解每一块‘积木’的本征特性，以及研究它们组合起来后，会如何影响分子的反应行为。周光敏说，此基础上，团队还通过机器学习，从大量搭建方案中总结规律，进而掌握了积木搭建的最佳方案。

几经探索，周光敏团队结合理论计算和可解释机器学习模型，对预分子介体的元素组成和几何构型进行了定向优化设计，最终筛选出了催化效果最好的预分子介体：4-三氟甲基-2-氮嘧啶。

更广阔的前途

实验表明，相比使用常规电解液的锂硫电池，使用预分子介体的锂硫电池，其电荷转移阻抗可以下降75%左右，这意味着电池内部的硫转化反应效率被大大提升。

目前，市面上常见的锂离子电池，其能量密度大多低于300瓦时/每千克，更重要的是，这一数值已经逼近材料体系本身的极限，提升的潜力已经十分有限。高润华说，相比之下，使用预分子介体的锂硫电池，现阶段能量密度就已经能达到549瓦时/每千克。

与此同时，此类锂硫电池在标准快充强度（即1小时可将电池充满）下，即便反复充放电800次，还能保住原本电量的81.7%，

对于高端无人机、电动垂直起降飞行器等低空装备来说，电池能量密度越高，就越有可能在有限重量下实现更长续航、更大任务半径和更强载荷能力。周光敏说，如果将该电池应用于无人机等低空飞行器，将有望大幅提升其单次续航时间和里程，从而为无人机在消费级航拍、物流配送、长距离电力巡检等领域的应用释放更多潜力。

值得一提的是，由于当前锂硫电池技术尚不如传统锂离子电池技术成熟，特别是在安全性等方面的性能也有待提升，因此使用范围还相对较小。不过，相关技术一旦成熟，锂硫电池将凭借其更大的能量密度，在电动汽车等领域得到更广泛应用。

未来，我们还会将这套‘搭建积木’的方法，用到锂金属电池溶剂分子设计、电池直接回收中的有机补锂剂设计等前沿领域，进一步助力产业生态向智能化转型，为推动新能源产业高质量发展提供关键技术支撑。周光敏说。（来源：中国科学报 陈彬）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41586-026-10505-8>

作者：周光敏等 来源：《自然》

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