

数据驱动电解质设计，可实现水系锌电池万次稳定循环

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/39775.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！

数据驱动电解质设计，可实现水系锌电池万次稳定循环。

ADVANCED MATERIALS

RESEARCH ARTICLE |  Open Access |  

Data-Driven Cation Engineering Guides Electrolyte Design for Sustainable Aqueous Zinc Battery Chemistries

Xuesong Xie, Yinfei Lyu, Huorong Ren, Witold Pedrycz, Yifan Li, Yang Yang, Xuehai Tan, Minggang Xie, Yi Guan, Yuxuan Xue, Ning Chen, Zhi Li

First published: 08 April 2026 | <https://doi.org/10.1002/adma.202522059> | [VIEW METRICS](#)

网站截图。

水基锌电池是一种容量大、安全性高的可充电电池，2018年研制成功以来，被视为锂电池的潜在替代技术之一，可用于消费电子产品、电网存储单元或家庭太阳能存储系统，在航空航天、深海探测等极端环境领域也极具应用潜力。

如何跳出传统试错模式的窠臼，从根本上实现材料创新设计？研究团队给出的答案是：以数据驱动设计替代经验依赖和主观推测。团队开发的核心是一个创新的数据驱动多尺度分析框架。首先，依托高性能计算与密度泛函理论（DFT）模拟，解析基础离子与电极材料之间的微观相互作用；随后，借助小波变换对复杂宏观电化学信号进行解码，提取关键动力学特征；最终结合统计模型实现客观决策。该方法首次建立了从微观机理到宏观性能的可解释性设计桥梁。基于这一框架，团队精准预测并实验验证了一种全新的 $\text{Na}^+ - \text{Mg}^{2+} - \text{Zn}^{2+}$ 三阳离子电解质体系（NMZ），为破解新型储能电池长寿命难题提供了原理性解决方案。

研究表明，NMZ电解质可诱导一种电位驱动的顺序离子插入路径，即 Na^+ 、 Mg^{2+} 和 Zn^{2+} 依次参与反应，从而从源头上抑制了两类关键失效过程：一是在1.3伏以上引发结构破坏的质子嵌入，二是在约1.0伏附近导致钒溶解的水合 Zn^{2+} 嵌入。基于该电解质组装的Zn/钒氧化物电池展现出卓越的电化学可逆性和创纪录的长循环稳定性：在0.2安每克下可稳定循环500次（约1400小时），在5安每克下可稳定循环高达10000次。所开发的NMZ电解质体系在成本、安全性、环境友好性与综合电化学性能之间实现了优异平衡。

该研究不仅为通过离子工程与电化学调控提升电极材料插层稳定性提供了重要的数据驱动见解，揭示了以往常被忽视的关键离子相关因素，更重要的是，建立了一个具有可复用性和统计鲁棒性的通用设计框架。该框架可进一步拓展用于不同电池体系中电解质、正极和负极材料的设计，加速高性能储能材料的研发进程，并为新型储能技术的发展提供新的创新路径与设计思路。（来源：中国科学报 李媛）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1002/adma.202522059>

作者：Witold Pedrycz 来源：《先进材料》

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](http://www.iikx.com)转发