

2020 年度湖北省自然科学奖拟提名项目公示

一、项目名称：先进钠离子电池材料构筑与存储机理研究

二、提名者及提名意见：

电化学储能技术是新能源发展的热点，钠离子电池由于钠资源丰富、成本低、与锂离子电池相似的工作原理，使其在储能领域比锂离子电池具有更为广阔的应用前景，其关键在于电极材料。然而钠离子电池电极材料的可选择性少、离子/电子快速输运困难、效率低下、产品安全是制约储能技术发展的重大瓶颈，开发新型钠离子电池电极材料，构建快速离子/电子传输路径、提高效率，揭示钠离子的存储机理和输运机制是攻克这一瓶颈的关键科学问题。

该项目在国家 863 计划、自然科学基金委的资助下，针对钠离子电池电极材料的开发、离子/电子快速输运、离子存储机理和输运机制，开展了系统的基础性研究。发现了三维快速离子通道的新体系通过碳包覆构筑了电子快速传输的路径，提高了功率密度，同时减少了副反应，提高了循环稳定性和安全性，首次将 NaFSI 基电解液用于钠离子电池，实现了电极材料的高效稳定循环；首次开发了数款多维钠离子传输通道的正负极材料开发，如具有 α -NaFeO₂ 结构的二维钠离子通道铜系正极材料和具有尖晶石结构的三维钠离子通道的负极材料；采用原位/非原位 XRD 技术观察电极材料的结构演变，通过球差校正透射电子显微技术，在原子尺度直接观察钠离子脱嵌过程中的离子占位变化，揭示了材料的存储机理和输运机制。为新型高性能储能电池材料的研制与开发提供实验基础和理论指导。

该项目发表的5篇代表性论文具有较大的国际影响力，2篇入选ESI前1%高被引论文，总他引次数为1143次，其中SCI他引1109次，获得诺贝尔奖得主、锂电先驱、国内外院士等许多国际著名学者正面引用。

同意提名该项目为湖北省自然科学一等奖。

三、项目简介：

该项目属于材料科学领域。

电化学储能是发展新能源汽车、提高电网对间歇性可再生能源发电接纳能力的关键技术，锂/钠离子电池储能因其独特的性能已成为优先发展方向。然而离子/电子快速输运困难、产品效率低下以及机理不明是制约储能技术发展的重大瓶颈。开发高离子电导、缩短离子传输距离以及碳材料复合增加电子电导构建快速离子/电子传输路径、通过新型电解液成膜特性提高效率、通过球差矫正技术在原子尺度揭示材料存储机理和输运规律，是攻克这些技术瓶颈的关键，进行了创新性和系统性的研究工作。主要科学发现如下：

1. 发明了三维快速离子通道的 $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ 新体系通过碳包覆构筑了电子快速传输的路径，大大提高了功率密度，同时减少了副反应，提高了循环稳定性，首次采用 NaFSI 基电解液进一步改善其循环稳定性、提高库伦效率。

2. 设计了具有 $\alpha\text{-NaFeO}_2$ 结构的二维钠离子通道铜系正极材料，实现了 $\text{Cu}^{2+}/\text{Cu}^{3+}$ 的可逆循环，提高材料的循环性和工作电压；开发了具有尖晶石结构的三维钠离子通道的负极材料，放电平台电压约为 0.8 V，避免钠枝晶的形成，提高材料的安全性。

3. 通过原位/非原位 XRD 分别观察了 $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ 和 $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ 材料在充放电过程中结构的演变，分别表现为两相反应和三相反应。并在原子尺度直接观察了电极材料在脱嵌锂/钠离子过程中的离子占位变化，揭示了离子的存储机理和输运机制： $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ 材料中占据 18e 位置的两个 Na^+ 可逆脱嵌， Na^+ 沿 $\text{M2}(18\text{e}) \rightarrow \text{M2}$ 位置直接传输。

该项目发表的 5 篇代表性论文包括 *Adv. Energy Mater.*、*Adv. Funct. Mater.*、*Electrochem. Commun.* 各 1 篇，中国期刊 *Chinese Phys. B* 2 篇。他引总数为 1143 次，其中 SCI 他引 1109 次，2 篇入选 ESI 前 1% 高被引论文，被诺贝尔奖 J. B. Goodenough、Linda Nazar，吴锋、陈军等多位院士及专家正面引用。该项目成果应邀在 *Adv. Mater.* (2017, 29, 1601925)、*Energy Environ. Sci.* (2013, 6, 2338-2360) 和 *Adv. Energy Mater.* (2018, 8, 1703012) 上撰写了多篇综述文章。项目组成员担任英国物理学会 *J. Phys. Condens. Matter* 期刊材料物理板块主编；美国科学出版社 *Materials Express* 副主编；*ACS Energy Lett.* 责任编辑。项目组成员在该成果的指导下开发了世界首台钠离子电动汽车和世界首座钠离子储能电站。

四、代表性论文专著目录

序号	论文（专著）名称/刊名/作者	年、卷、页码	发表时间（年月日）	通讯作者（含共同）	第一作者（含共同）	国内作者	他引总次数	检索数据库	论文署名单位是否包含国外单位
1	Carbon coated $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ as novel electrodematerial for sodium ion batteries. <i>/Electrochemistry Communications/</i> Zelang Jian, Liang Zhao, Huilin Pan, Yong-Sheng Hu, Hong Li, Wen Chen, Liquan Chen	2012, 14, 86-89	2012-01-01	胡勇胜, 陈文	简泽浪	简泽浪, 赵亮, 潘慧霖, 胡勇胜, 李泓, 陈文, 陈立泉	438	SCIE、JCR	否
2	Superior Electrochemical Performance and Storage Mechanism of $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ Cathode for Room-Temperature Sodium-Ion Batteries <i>/Advanced Energy Materials/</i> Zelang Jian, Wenze Han, Xia Lu, Huaixin Yang, Yong-Sheng Hu, Jing Zhou, Zhibin Zhou, Jianqi Li, Wen Chen, Dongfeng Chen, and Liquan Chen	2013, 3, 156-160	2013-02-01	胡勇胜, 陈文, 陈东风	简泽浪, 韩文泽, 卢侠	简泽浪, 韩文泽, 卢侠, 槐馨, 胡勇胜, 周静, 周志斌, 李建奇, 陈文, 陈东风, 陈立泉	464	SCIE、JCR	否
3	New layered metal oxides as positive electrode materials for room-temperature sodium-ion batteries <i>/Chinese Physics B/</i> Mu Lin-Qin, Hu Yong-Sheng, and Chen Li-Quan	2015, 24, 038202	2015-03-01	胡勇胜	穆林沁	穆林沁, 胡勇胜, 陈立泉	15	SCIE、JCR	否
4	Spinel lithium titanate ($\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$) as novel anode material for room-temperature sodium-ion battery <i>/Chinese Physics B/</i> Zhao Liang, Pan Hui-lin, Hu Yong-Sheng, and Chen Li-Quan	2012, 21, 028201	2012-02-01	胡勇胜	赵亮	赵亮, 潘慧霖, 胡勇胜, 李泓, 陈立泉	70	SCIE、JCR	否

5	Atomic Structure and Kinetics of NASICON $\text{Na}_x\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ Cathode for Sodium-Ion Batteries/ <i>Advanced Functional Materials</i> /Zelang Jian, Chenchen Yuan, Wenze Han, Xia Lu, Lin Gu, Xuekui Xi, Yong-Sheng Hu, Hong Li, Wen Chen, Dongfeng Chen, Yuichi Ikuhara, and Liquan Chen	2013, 3, 1186–1194	2014-07-16	谷林, 郝学奎, 胡勇胜	简泽浪, 袁晨晨	简泽浪, 袁晨晨, 韩文泽, 卢侠, 谷林, 郝学奎, 胡勇胜, 李泓, 陈文, 陈东风, 陈立泉	156	SCIE、JCR	是
合 计							1143		

五、主要完成人（完成单位）

序号	完成人	完成单位	对本项目的贡献
1	简泽浪	武汉理工大学	发现点 1 和 3 的主要贡献者和完成人。开发了 $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$ 快离子导体主体材料通过碳包覆构筑电子传输层，实现复合材料的离子/电子快速传输，首次采用了 NaFSI 基电解液，改善其循环稳定和库伦效率；采用原位/非原位 XRD 技术，揭示电极材料在充放电过程中的结构演变、采用球差校正电子显微技术，直接观察材料结构在离子脱嵌过程中的变化和离子占位信息，揭示离子的存储机理和传输机制。代表性论文 1, 2, 5 第一作者（或共同第一作者）。
2	胡勇胜	中国科学院物理研究所	发现点 1-3 的主要指导者。提出电子/离子混合导体的思路，引入新型电解液体系，开发新型钠离子电极材料，指导完成了所有发现的具体构思和实验过程中遇到的难题，还在原子尺度观察材料结构变化和离子占位信息，揭示离子的存储机理和传输机制的研究中，参加了理论指导工作。5 篇代表论文的通讯作者（或共同通讯作者）。
3	陈文	武汉理工大学	发现点 1, 3 的重要贡献者，提出对快离子导体材料进行改性，可以保持快离子导体的离子导电率，同时改善其电子电导，参加主要指导工作，指导 NaFSI 基电解液的设计；指导原位 XRD 揭示材料的钠离子存储机理，参与在原子尺度揭示离子存储机理和传输机制的研究。代表论文 1, 2 的共同通讯作者，代表论文 5 的共同作者。
4	谷林	中国科学院物理研究所	发现点 3 重要贡献者，提出球差透射电镜用于观察电极材料结构变化和钠离子占位信息，指导电镜结果分析，为揭示离子在电极材料中的存储机理和传输机制做出重要贡献。代表论文 5 的共同通讯作者。
5	陈立泉	中国科学院物理研究所	发现点 1-3 的重要贡献者，支持钠离子电池的发展，为钠离子电池电极材料的设计提供方向，对钠离子的存储机理提供指导。5 篇代表论文的共同作者。