

# Exploring Rapid Screening and Precise Synthesis Methods for High-Performance Battery New Materials Driven by Artificial Intelligence

Xiang Deng<sup>1,2</sup>

1. Sinosteel New Materials Co., Ltd., Maanshan, Anhui, 243000, China

2. Sinosteel Nanjing Advanced Materials Research Institute Co., Ltd., Nanjing, Jiangsu, 211100, China

## Abstract

This article analyzes the application of artificial intelligence (AI) technology in the rapid screening and precise synthesis of new materials for high-performance batteries. It explores the predictive analysis, control of selection and synthesis via AI technology, providing supports to improve the research efficiency and development iterations of battery new materials, thereby promoting the development of the high-performance battery industry.

## Keywords

Artificial Intelligence; High-Performance Battery; New Material Screening; Precise Synthesis

## 探索人工智能驱动下高性能电池新材料的快速筛选与精准合成方法

邓翔<sup>1,2</sup>

1. 中钢天源股份有限公司, 中国·安徽 马鞍山 243000

2. 中钢集团南京新材料研究院有限公司, 中国·江苏 南京 211100

## 摘要

当前新能源产业的快速发展对电池器件的性能提出了更高的要求。电池性能的提升, 关键在于电池新材料的研发。然而, 传统方法在电池新材料开发中多依赖试错, 这导致新材料开发周期长、成本高、研发效率低, 难以满足产业对材料快速更新迭代的需求。人工智能 (Artificial Intelligence, AI) 技术凭借强大的计算分析与预测能力, 为电池新材料的研发与探索提供了全新的解决方案。本文对AI智能技术用于高性能电池新材料快速筛选、精准合成进行分析, 探索调研AI智能技术对新材料性能的预测分析及筛选和合成控制, 为提升电池新材料研发周期, 提高研发效率提供参考, 从而助推高性能电池产业发展。

## 关键词

人工智能; 高性能电池; 新材料筛选; 精准合成

## 1 引言

当前全球的能源结构正在向绿色化、低碳化、新能源化发展, 高性能的电池是新能源的储能载体, 电池的能量密度、循环寿命、安全性等均离不开电极、电解质等关键材料支撑, 而常规的电池关键材料研发方式是试验式的研发方法, 样品制作和性能测试需要耗费大量的人力物力, 而且很难发现材料的优良性能。为了解决这个瓶颈问题, 迫切需要开发新的技术和手段进行电池新材料的高效筛选和制备, 人

工智能 (Artificial Intelligence, AI) 技术的发展正是解决这个问题工具和方法。

## 2 人工智能在电池新材料快速筛选中的应用

### 2.1 构建材料数据库支撑筛选基础

电池新材料的选择需以大量完整且高质量的数据为依据, 涵盖化学组分、晶型结构、理化性能及对应电池性能等。但传统数据库依赖人工采集实验数据, 数量有限, 格式与更新速度也无法满足大规模筛选需求。相比之下, 人工智能可通过爬取、自动标注等技术, 从文献、实验报告、专利中采集数据, 经过滤清洗剔除冗余重复信息, 建立材料结构数据库<sup>[1]</sup>。同时结合自然语言处理抽取关键信息, 机器学习归类归档, 形成含数千至数万个材料信息的数据库, 为筛选提供

【作者简介】邓翔 (1991-), 男, 中国江苏无锡人, 博士, 高级工程师, 从事人工智能技术用于新能源材料, 新型软磁材料技术开发等研究。

海量数据支撑。

## 2.2 基于机器学习预测材料性能

建设好材料库之后，AI可以通过机器学习（Machine Learning, ML）训练材料属性与性能关系的模型，对新物质材料直接进行预判，挑选出候选材料。传统的筛选方法需要对候选材料进行实验，机器学习模型通过分析模型库中已知材料的“结构→性能”相互关系，预测新材料性能，极大地减少了测试量。

比如在锂电池正极材料的选取过程中，以材料元素配比（磷铁比，铁锰比，镍钴锰比等）、晶型、颗粒尺寸等为输入参数，以比容量、循环寿命、电压平台等输出参数，采用随机森林、神经网络算法等建立训练模型。模型训练好后，输入备选材料的结构参数，可以输出预测电池的性能指标，比如筛选出一批比容量大、循环寿命周期长的材料作为备选材料再进行实际实验论证。又如在进行电解质材料选取过程中，同样采用机器学习模型可以对材料的离子电导率、电化学稳定性等参数进行预测，帮助材料研制人员迅速找到合适的电解质材料，避免无效的试验验证<sup>[2]</sup>。

## 2.3 优化筛选流程提升筛选效率

传统电池材料筛选流程多采用“逐一验证”的线性流程，筛选效率不高。人工智能可以优化选优流程，实现“多目标”并行筛选，提升筛选效率。例如，针对负极筛选，算

法可依据产业对成本的要求和能量密度的要求，调整指标的权重，将选优方案筛选为成本低与能量密度高的材料，避免出现单指标筛选造成材料资源浪费的现象，让选优流程更贴合于实际。

## 3 人工智能在电池新材料精准合成中的应用

### 3.1 预测合成工艺参数

由于电池新材料是由温度、时间、原材料配比、反应压力等工艺参数合成的结果，因此对于传统的合成方法，研究人员往往需要通过“试错法”来调整温度、时间、原材料配比、反应压力等合适的工艺参数，既难获得最佳工艺参数组合，还容易因工艺参数不当影响材料的性能。人工智能可根据以往的合成数据，建立工艺参数—性能之间的预测模型，预测出最佳合成条件，确保材料品质。

以电池正极材料磷酸铁锂的合作为例，材料的烧结温度、保温时间、锂铁比等均会对材料结晶和性能产生影响。依据不同工艺参数下合成磷酸铁锂材料的性能，运用梯度提升树、支持向量机等算法训练模型，模型可以学习到“烧结温度高了，材料易团聚，比容量下降”、“保温时间不足，材料结晶不充分，循环不平稳”等知识，在后续的合成过程中，仅需给定需要合成性能的目标，模型便可反演得出最佳的烧结温度、保温时间等参数，研发人员依据预测参数在研发过程中可极大地提高材料性能的稳定性和一致性。

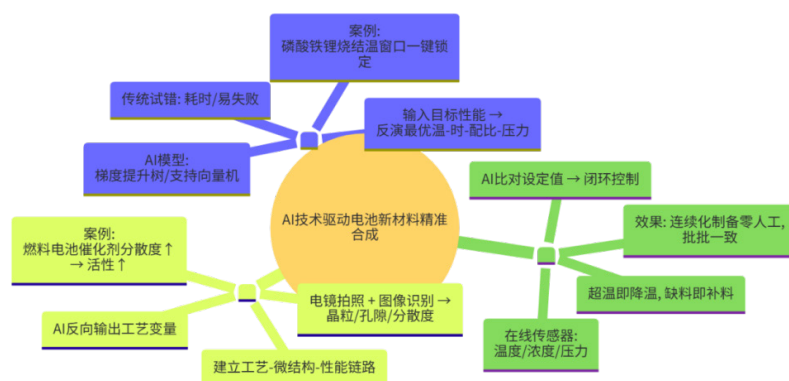


图1 AI技术在电池新材料精准合成上的应用策略分析图

### 3.2 实时调控合成过程

在制备电解质锂离子电池中，将温度、浓度等相关传感器加入反应装置中，针对反应中的温度、反应物浓度等相关数据进行实时采集，并将实时数据传输到相关人工智能程序中，根据提前设定好的算法模型，确定数据与目标数据是否一致，如果反应温度超过设定温度，则进行降低温度控制，通过温度控制系统将反应温度进行降低，如果反应物浓度低于预定浓度，则控制加料设备进行加料，在反应过程中，避免由于反应温度和反应物的波动，造成反应后材料的不合格，避免人工进行干预，降低人为操作误差<sup>[3]</sup>。

### 3.3 实现材料微观结构精准控制

电池新材料微结构（晶粒尺寸、孔隙率、界面结构）

决定电池新材料性能（宏观性能）如电极材料孔隙率过大影响体积比能，孔隙率过小离子传输率，传统制备方法无法控制材料微结构，而人工智能能够通过工艺参数、微结构和宏观性能对材料微结构进行调控。

以燃料电池催化剂材料的制备为例，通过电子显微镜等设备拍摄不同工艺参数制备的催化剂材料微观结构图像，并通过图像识别算法提取晶粒尺寸、分散度等微观结构参数，结合催化剂催化活性数据建立“工艺参数-微观结构-催化活性”对应关系，由人工智能预测生成满足微观结构调整要求的工艺参数，例如增加催化剂的分散度，可以调优化剂反应温度、原料浓度，如晶粒尺寸，可以调优化剂反应时间，制备满足微观结构调整要求的催化剂材料，提升燃料电

池电性能。

## 4 人工智能应用于电池新材料研发的挑战与应对策略

### 4.1 面临的主要挑战

#### 4.1.1 数据质量与数量不足

人工智能模型是使用大量高质量数据进行训练得到的,而部分电池新材料研发,部分新材料实验数据少,特别是一些前沿材料,其“结构-性能”缺乏足够的支撑数据用于模型训练,模型预测精度不够,不同实验室测试的实验设备、测试标准不一致,其数据格式不一致、数据误差比较大、数据质量不高,不利于人工智能充分利用。

#### 4.1.2 模型泛化能力较弱

现在大部分的人工智能模型都是针对某一类型的电池材料(例如:锂离子电池正极材料)开发,或者针对某一种性能(例如:比容量)而开发的,只能应用在特定的场景之中,无法应用在其他类型的电池材料上,或者应用在其他类型的性能上(例如:安全性),需要重新训练模型,并且预测的准确性也会降低,无法应用在电池材料的其他种类上,例如:钠离子电池材料。

#### 4.1.3 与实验验证的衔接不足

人工智能预测和模拟得到的候选材料、合成参数均需要实验验证,但是现有的人工智能与实验的衔接是间断的:一部分人工智能模型所预测的结果与实验结果不一致,并未剖析其预测结果的原因,未能对预测模型进行优化;另外,实验过程中所产生的数据不能及时更新到人工智能中,模型不能及时更新、持续进步。

## 4.2 对应的应对策略

### 4.2.1 加强数据共享与标准化建设

数据不足和不佳是目前制约人工智能在电池新材料领域应用的瓶颈,数据共享和标准化是重要的突破口。一方面是要建立多方参与的数据共享机制,以政府牵头,科研机构、电池企业、测试机构建立数据公共平台,统一数据上传、存储、访问标准,允许科研人员上传试验过程中的原始数据、测试数据、允许企业上传生产过程中产生的材料性能数据、工艺参数数据,打通数据壁垒,开放共享,成为人工智能模型的数据来源。

另一方面,制定统一的数据采集和测试标准。实验室、公司等企业实验设备精度、测试条件、操作流程等不一致,相同材料得到的实验数据结果存在偏差,需要制定统一的数据标准,对材料化学组成、晶体结构、电化学性质等数据记录标准,确定统一测试方法、误差范围,对电极材料导电性测试,应确定测试的温度、湿度、仪器型号校准标准等,确保数据来源的一致性和可靠性,为 AI 模型提供准确数据,提升预测精度。

### 4.2.2 开发多任务、跨领域模型

针对现有 AI 模型泛化性不足,仅能预测某一特定材料

或者某一特定性能的问题,构建多任务、多场景 AI 模型是关键之一。多任务 AI 模型可包含多个电池材料研发,基于同一模型框架训练多个不同电池材料性能预报任务,并同时学习锂离子、钠离子、钾离子电池等不同种类电极材料的比容量、循环寿命预报,通过训练,使模型自主挖掘不同电池材料“形-性”关系内在规律,如离子嵌/脱嵌规律、材料晶格稳定性对材料性能的影响规律等,使得模型在面对新的电池材料研发时,能够做到快速适应并给出准确的新材料性能预报结果,提升 AI 模型的场景泛化能力。

跨领域迁移学习模型可以解决新型材料数据量较少的问题,如固态电池、无钴电池等由于是新诞生的材料,研发时间短,积累的数据有限,难以直接训练模型,而可以迁移学习已成熟的模型(如锂离子电池材料预测模型等)学习到的知识,利用成熟的模型参数,配以少量的新型数据,降低对新型材料的数据量要求,迅速构建具有较高预测精度的新型材料模型,加速前沿电池材料的研发。

### 4.2.3 构建“AI 预测-实验验证-模型优化”闭环

预测的人工智能结果需要实验验证才能付诸实施,而实验产生的新数据会进一步反哺人工智能模型和优化算法,闭环的“AI 预测-实验验证-模型优化”是人工智能与实验结合的基础。在闭环系统中,首先是人工智能基于数据库和训练好的模型筛选出有前景的候选材料并预测合成工艺的优化参数,指导实验开展;二是实验验证,按照人工智能所预测的参数合成材料并测试材料性能,记录实验环境、实验细节、实验性能与预测的误差;三是模型优化,将实验产生的新数据、误差及原因(误差产生的原因是模型算法忽略了制作材料中可能存在的界面反应、杂质等)反馈到人工智能系统中,人工智能系统基于新数据更新训练库,对模型算法和参数进行修正并更新前序的预测逻辑。

## 5 结语

通过在材料筛选中构建数据库、预测性能、优化流程,在材料合成中预测参数、实时调控、控制微观结构,人工智能有效缩短了研发周期、降低了研发成本、提升了材料性能稳定性。尽管当前人工智能在数据质量、模型泛化能力、实验衔接等方面仍面临挑战,但通过数据共享、模型创新与闭环体系构建,这些问题将逐步得到解决。未来,随着人工智能技术与电池材料研发的深度融合,必将推动更多高性能、低成本的电池新材料问世,为新能源存储与利用提供更有力的保障,助力全球能源转型与“双碳”目标的实现。

## 参考文献

- [1] 高凌云.通过人工智能破解化学密码制造更耐用的高性能太阳能电池板[J].现代物理知识,2024,36(05):59.
- [2] 王琦瑶.人工智能技术在电池研发领域的专利情报分析[J].信息通信技术与政策,2025,51(06):60-65.
- [3] 郑如意,杨博,周率,等.基于人工智能的质子交换膜燃料电池状态估计及故障诊断[J].发电技术,2025,46(03):541-555.