

Research Progress on the Chemical Structure Regulation of Electrode Materials for New Energy Batteries

Zhenyu Hui Jingyao Li Yixian Mei Mobei Zhang Yiwen Wang

Chengxian College, Southeast University, Nanjing, Jiangsu, 210088, China

Abstract

Against the backdrop of the global energy transition, new energy batteries have become the core technology in the energy storage field and are widely used in multiple areas. As a key factor determining the performance of batteries, the regulation of the chemical structure of electrode materials is of vital importance. This paper introduces the sources, classification and characteristics of new energy batteries and electrode materials, elaborates the research progress of electrode materials in the application of different new energy batteries, and makes a comparison with traditional batteries in terms of environmental protection safety, cycle stability, etc. It is pointed out that new energy batteries face technical bottlenecks and problems such as energy density, charging speed, temperature adaptability and safety in the development process. It is proposed that in the future, they should develop in five directions such as optimizing cathode materials, promoting solid-state electrolytes and interface engineering, and improve battery performance by leveraging multi-disciplinary technological progress to promote the development of related fields.

Keywords

new energy battery; Electrode material; Chemical structure regulation

新能源电池电极材料的化学结构调控的研究进展

惠祯瑜 李婧瑶 梅益仙 张莫北 王一雯

东南大学成贤学院, 中国·江苏 南京 210088

摘要

在全球能源转型的大背景下, 新能源电池成为储能领域的核心技术, 广泛应用于多个领域。电极材料作为决定电池性能的关键因素, 其化学结构调控至关重要。本文介绍了新能源电池及电极材料的来源、分类和特性, 阐述了电极材料在不同新能源电池中的应用研究进展, 并与传统电池在环保安全性、循环稳定性等方面进行对比。指出新能源电池在发展过程中面临能量密度、充电速度、温度适应性和安全性等技术瓶颈和问题, 提出未来应从优化正极材料、推进固态电解质与界面工程等五个方向发展, 借助多学科技术进一步提升电池性能, 推动相关领域发展。

关键词

新能源电池; 电极材料; 化学结构调控

1 引言

在全球能源转型背景下, 新能源电池已成为储能领域核心技术, 广泛应用于电动汽车、可再生能源存储等场景。电极材料作为决定电池性能的关键, 其化学结构调控是突破性能瓶颈的核心。但实际应用中, 电极材料在充放电时因结构相变、体积变化和界面副反应等, 导致循环稳定性下降, 制约电池寿命。原位 XRD、TEM 等原位表征技术可实时监测材料结构动态演变, 揭示构效关系; 机器学习则能挖掘材料结构与性能的潜在关联, 实现智能设计与性能预测。二者结合为电极材料研究开辟新路径, 有望加速高性能电池研发。

【作者简介】惠祯瑜 (2004-), 女, 中国江苏无锡人, 本科, 从事化工研究。

2 新能源电池以及电极材料的来源与分类

2.1 新能源电池的来源

新能源电池的材料来源多元化, 主要包括天然矿物开采、工业副产品、生物质资源以及人工合成材料。锂离子电池依赖盐湖锂和镍钴锰矿, 锂硫电池利用天然硫或工业脱硫副产品, 钠/锌电池则基于更丰富的钠盐和锌矿资源。为应对关键矿物短缺和环境影响, 发展趋势转向无钴低镍材料、生物基电极、电池回收以及资源更丰富的替代体系, 以实现资源可持续性和循环经济。

2.2 新能源电池的分类

新能源电池可根据不同维度进行系统分类: 首先按材料体系可分为锂基电池、钠基电池以及其他金属基电池; 按电解质形态则分为液态电池、半固态电池和全固态电池。从反应机理来看, 主要包括插层型、转化型和合金化型三大类。此外, 按应用场景可分为动力电池、储能电池和消费电子电

池等，而特殊类型电池则涵盖液流电池、超级电容器和柔性电池等新兴技术。这种多维度的分类体系不仅全面涵盖了当前主流和前沿的电池技术，更清晰地展现了新能源电池技术的多元化发展路径和应用前景，为不同领域的技术选择和研发方向提供了系统性的参考框架。

2.3 电极材料的来源

电极材料来源多元，主要有天然矿物资源、工业副产品、生物质原料、人工合成材料和循环再生材料五大类。天然矿物资源含锂、钴等金属矿；工业副产品有石油焦、冶金硅等；生物质原料受到重视，像热解椰子壳、秸秆得到的生物炭及木质素等；人工合成材料包括溶胶-凝胶法制备的纳米材料和新型复合材料；循环再生材料发展迅速。生物质原料和循环再生材料因环保可持续，正推动电极材料产业走向绿色化、可持续化。

2.4 电极材料的分类

电极材料可从多维度系统分类，形成完整体系。化学组成上，涵盖碳基材料、金属氧化物等；按电极功能分为正极、负极和双功能电极材料；结构特征方面，有零维到三维不同结构；依据储能机理，可分为插层型等；从来源分，包含天然矿物、人工合成和生物质衍生材料；还有柔性电极等特殊功能材料。这种分类法揭示了电极材料本质，为材料设计、性能优化和应用开发提供理论框架，且会随新型储能技术发展不断丰富完善。

2.5 电极材料的特性

2.5.1 电极材料的物理特性

电极材料的特性是一个多维度、多层次的综合体系，各特性参数相互关联、彼此制约，共同决定了材料的最终性能表现。从物理特性来看，材料的形貌特征（如纳米颗粒或多孔结构）直接影响其比表面积和机械强度，这不仅关系到界面反应活性，更是循环稳定性的重要保障。同时，材料密度作为体积能量密度的关键因素，与孔隙结构形成微妙平衡——高密度虽然能提升体积能量密度，但可能牺牲离子传输效率。

2.5.2 电极材料的化学特性

在化学特性方面，材料的元素组成和晶体结构共同决定了其理论容量和离子扩散路径，而表面化学性质则通过调控界面反应活性位点来影响实际电化学性能。特别值得注意的是，材料的热稳定性作为安全性能的关键指标，往往与晶体结构的稳定性密切相关。这些化学特性又与电化学性能形成深度耦合：工作电位和比容量共同决定电池的能量密度，而离子扩散系数和电子电导率则协同影响材料的倍率性能和极化损失。

2.5.3 电极材料的结构特性

结构特性作为连接物理化学特性和功能特性的桥梁，通过维度设计（0D-3D）、缺陷工程和界面调控等手段，可以精确优化材料的综合性能。例如，合理的多孔结构设计既

能提高比表面积，又能维持足够的机械强度；精准的掺杂改性可以同时改善电子电导率和结构稳定性。最终，这些特性参数共同转化为实际应用中的功能特性：循环稳定性反映材料的结构耐久性，倍率性能体现电荷传输效率，环境适应性考验材料体系的鲁棒性，而成本特性则决定其商业化前景。理解这些特性之间的复杂关联，对于开发新型高性能电极材料具有重要指导意义。

3 电极材料在不同新能源电池中的应用研究进展

3.1 正极材料

正极材料的研究主要集中在高容量、高稳定性和低成本方向。在锂离子电池中，超高镍正极虽能提升能量密度，但面临热稳定性挑战，无钴正极则凭借低成本和高安全性成为重要补充。南开大学开发的有机正极材料环己六酮展现出高达 1533 Wh/kg 的能量密度，远超传统钴酸锂。在固态电池中，当升科技开发的双相复合超高镍正极通过快离子导体修饰技术降低界面阻抗，显著提升循环寿命。钠离子电池（SIBs）则采用层状氧化物或普鲁士蓝类似物，利用其开放框架结构实现 Na^+ 的高效嵌入和脱出。锂硫电池（Li-S）中，多孔碳/Si/SiO₂ 复合材料通过物理吸附和静电作用抑制多硫化物穿梭效应，在 2C 倍率下循环 500 次容量保持率 >90%。此外，锌离子电池（ZIBs）的钒基氧化物凭借层状结构实现 Zn^{2+} 的高效存储，而钾离子电池（PIBs）中的 COF 材料则通过 C=O/C=N 多重活性位点来实现高比容量（423 mAh/g）。^[1]

3.2 负极材料

负极材料的优化重点在于提升容量、抑制体积膨胀和枝晶生长。锂离子电池中，硅基负极（理论容量 4200 mAh/g）通过纳米化或碳包覆缓解体积膨胀问题，而石墨烯/碳纳米管复合材料则显著提高导电性和结构稳定性。固态电池的锂金属负极需解决枝晶问题，3D 骨架或人工 SEI 膜修饰是当前研究热点。钠离子电池采用生物质衍生硬碳（如椰子壳热解材料）作为负极，兼具高储钠容量和低成本优势。锂硫电池中，锂金属负极的界面优化可有效抑制多硫化物穿梭和枝晶生长。锌离子电池的锌负极则通过热传递增强策略抑制局部热点，实现 >440 小时的循环寿命（DOD 85.5%）。此外，镁离子电池（MIBs）的双金属硒化物展现出优异的循环稳定性，在 1000 mA/g 下循环 600 次容量保持良好。

3.3 复合电极材料

复合电极材料通过多组分协同效应实现性能突破。例如，固态电池中的钛酸锂-二氧化钒复合电极在 400 次循环后无容量衰减，展现了优异的界面稳定性。液流电池采用铋单原子修饰石墨毡电极，能量效率达 81.2%，功率密度高达 990 mW/cm²。此外，MXenes、MOFs 等新型材料凭借独特的导电性和多孔结构，在锂/钠/锌离子电池中展现出巨大潜力。

4 新能源电池与传统电池的性能对比

4.1 环保与安全性对比分析

新能源电池与传统电池在环保与安全性方面呈现显著差异。新能源电池中，锂离子电池虽不含铅、镉等有毒重金属，但其电解液仍存在易燃风险，需依赖电池管理系统（BMS）防控热失控；而固态电池通过消除液态电解质，从根本上解决了漏液与燃烧问题，安全性显著提升。水系锌电池则因水基电解液的不可燃性，成为绝对安全的代表。相比之下，传统铅酸电池的硫酸电解液具有强腐蚀性，且铅污染对环境和人体危害极大，尽管其回收率超过90%，但处理不当仍会导致土壤和水源污染；镍镉电池中的镉更是被列为剧毒物质，已受欧美严格限制。未来新能源电池需进一步优化材料回收体系，而传统电池的环保短板将加速其被替代进程。^[2]

4.2 循环稳定性与寿命表现

循环稳定性是衡量电池耐久性的核心指标。新能源电池中，磷酸铁锂电池（LFP）的循环寿命可达4000次以上，三元锂电池为1000~3000次，而实验中的固态电池已突破1000次循环且容量无衰减。钠离子电池凭借稳定的晶体结构，寿命可达2000~5000次，显著优于传统电池。传统铅酸电池通常仅支持300~500次循环，且深度放电会大幅缩短寿命；镍镉电池虽能实现500~1000次循环，但存在记忆效应。新能源电池的循环优势源于材料创新：例如硅基负极通过纳米化抑制体积膨胀，超高镍正极采用梯度掺杂降低结构应力。未来，通过原位表征技术（如原位XRD监测相变）优化材料结构，将进一步延长电池寿命。^[1]

4.3 原位表征技术的应用进展

原位表征技术为揭示电极材料动态演变机制提供了关键工具。在新能源电池研究中，原位X射线衍射（XRD）可实时观测充放电过程中的晶体结构变化，例如发现富锂正极的阴离子氧化还原不可逆性；原位透射电镜（TEM）直接捕捉了硅负极的体积膨胀破裂过程，指导了纳米空腔结构设计。相比之下，传统电池的材料研究多依赖破坏性拆解分析，难以动态追踪失效机制。当前，原位拉曼光谱已用于监测锂硫电池的多硫化物穿梭行为，而原位原子力显微镜（AFM）揭示了固态电解质界面（SEI）的机械性能演变。这些技术不仅加速了高稳定性材料的开发（如耐高压正极），也为传统电池的改进提供了新思路。未来，结合人工智能的原位大数据分析将推动电池材料设计进入精准调控时代。

5 挑战与展望

5.1 问题

5.1.1 电池技术瓶颈

当前电池技术面临诸多瓶颈。能量密度上，主流锂离子

电池难以满足长续航需求，固态电池等新技术因材料、工艺和成本问题尚未大规模商用；充电速度远不及燃油车加油，快充仍需数十分钟，影响长途出行；极端温度下适应性差，低温时新能源汽车续航常缩水30%~50%，高温易引发性能问题；循环寿命有限，频繁充放电导致电池3~5年后性能下降需更换，增加使用成本并限制设备长期运行。

5.1.2 安全性问题

电池安全性隐患突出。液态锂离子电池在过充、短路或碰撞时易热失控，引发起火爆炸，致使部分停车场限制新能源车停放，近年汽车自燃事故频发，威胁人身安全。同时，电池鼓包、压差故障常见，存在异常衰减与行驶中断电风险。此外，售后保障体系不完善，车企破产后，车主失去质保，自费维修成本高、维权难，加剧消费者担忧，阻碍新能源产品推广。

5.2 展望

新能源电池电极材料化学结构调控是提升电池性能的关键。未来发展聚焦五大核心方向：优化创新高容量正极材料；推进固态电解质与界面工程；实现高能负极材料突破；探索锂空气、锂硫等新型电池体系；借助计算模拟与智能化设计加速材料研发。目前面临规模化生产、环境友好及极端环境适应性等挑战，未来随着多学科技术进步，有望实现电池性能提升，推动相关领域发展。

6 结论

新能源电池在全球能源转型中地位关键，电极材料化学结构调控对提升电池性能意义重大。当前，新能源电池在材料来源、分类、性能等方面有成果，在环保安全和循环稳定性上优于传统电池，原位表征技术助力材料研究。然而，其发展面临能量密度不足、充电慢、温度适应性差、安全隐患等挑战。未来，聚焦正极材料创新、固态电解质与界面工程、负极材料突破、新型电池体系探索及借助计算模拟与智能设计加速研发，有望解决规模化生产等问题，提升电池性能，推动其在电动汽车、可再生能源存储等领域的广泛应用与持续发展。

参考文献

- [1] Liu, S., et al. (2021). "Stabilizing high-nickel layered oxide cathodes for lithium-ion batteries." *Energy & Environmental Science*, 14, 1385-1401.
- [2] 周岳溪等. (2020). 铅酸电池回收过程中的重金属污染控制. *环境科学研究*, 33(5), 1121-1128.
- [3] 中国化学与物理电源行业协会《铅酸蓄电池循环寿命影响因素分析》(2021)