

自然科学奖公示内容

一、 项目名称：锂硫电池界面反应动力学强化与锂离子输运协同调控机制

二、 提名者及提名意见（包含提名等级）：

教育厅 提名该项目为陕西省自然科学奖二等奖。

西安理工大学游才印教授团队长期以来以国家重大需求为依托，针对锂硫二次电池在产业化进程中存在界面电化学反应和 Li^+ 传输势垒较高，导致其电动力学缓慢引起穿梭效应及锂枝晶不可控生长等瓶颈问题，系统开展了电极-电解质界面设计与电催化调控机制研究。取得以下原创性成果：创新性提出基于高孔容多孔结构的高密度活性位点构筑策略，通过增强底物吸附协同优化硫物质转化与离子传输动力学，实现硫正极面容量显著提升；突破传统锂负极物理调控范式，率先提出原子级催化调控锂质传输动力学新策略，创新了锂离子输运维度重构机制，阐明催化调控抑制枝晶生长的理论；首次揭示 4f 离域电子型催化剂的多维度协同催化机制，为解决锂硫电池领域长期存在的“离子传输迟滞-硫转化动力学缓慢”耦合难题提供全新理论范式。相关研究在锂硫电池领域形成具有国际影响力的系统性成果，系列成果发表于 *Advanced Functional Materials*、*Advanced Science*、*Nano Letters* 等储能材料科学领域顶级期刊，1 篇论文入选 ESI 全球 Top 1% 高被引论文。形成自主知识产权体系，获授权国家发明专利 2 项。成果受到国内国际同行的认可和正面引用评价，推动我国在下一代储能技术领域占据战略制高点，为实现“双碳”战略目标作出重大贡献。

三、 项目简介：

基于国家“双碳战略”对新型储能技术的重大需求，锂金属二次电池作为一种高效且环境友好的储能技术备受关注。针对锂金属电池中典型锂硫二次电池在产业化进程中存在较高的界面电化学反应和 Li^+ 传输势垒，导致其电动力学缓慢引起穿梭效应及形成锂枝晶这一瓶颈问题。系统开展了电极-电解质界面设计与电催化调控机制研究。项目组以省科技计划项目为依托，历经近 10 年的科研攻关，深入解析锂硫电池体系中 Li^+ 去溶剂化动力学受限导致离子传输受阻及多硫化锂转化反应能垒过高等关键科学问题，创新性地

提出了界面催化活性位点密度调控技术，采用离域电子催化剂并优化其表界面结构提供高密度反应活性位点，降低界面 Li^+ 去溶剂化和传输势垒，加速界面 Li^+ 传输及多硫化锂转化反应动力学。发展了电极的反应界面及电催化剂表界面结构多元调控（包括：活性位点密度调控、电子结构调控等）提升催化活性的基本原理和普适性方法。相关研究成果已成功应用于高面载量锂硫二次电池系统开发，并受到国内国际同行的认可和正面引用评价，推动我国在下一代储能技术领域占据战略制高点。在调控原理和性能优化机制等方面取得了以下创新性成果：

1 创新性提出基于高孔容多孔结构的高密度活性位点构筑策略，通过增强底物吸附协同优化硫物质转化与离子传输动力学，实现硫正极面容量显著提升。

构建高孔容多活性位点协同反应界面，提出物理限域与化学吸附协同策略提升硫物质利用率，阐明高孔容多孔碳基体的双重吸附-诱导传输协同机制：形成三维贯通孔道提供 Li^+ 快速传输路径；表面掺杂的极性位点（C-N 和 C-S 构型）实现多硫化锂强化学锚定；梯度孔结构诱导硫氧化还原反应动力学提升。该协同效应使高面载硫正极（ 7.5 mg cm^{-2} ）在 1C 下实现 6.7 mAh cm^{-2} 面容量，较传统电极提升 67.5%，并在贫电解液（ $7 \text{ } \mu\text{L/mg}$ ）软包电池中验证了实用化潜力。

2 突破传统锂负极物理调控范式，率先提出原子级催化调控锂质传输动力学新策略，创新了锂离子输运维度重构机制，阐明催化调控抑制枝晶生长的理论。

针对锂金属负极锂离子水平传输势垒过高引发的枝晶生长难题，本团队突破传统界面工程局限性，首创“电子结构调控-原子与基体作用力增强-催化重构界面离子传输维度”调控新范式，成功研制具有强电子耦合特性的缺陷锚定金属单原子催化剂（SACo/ADFS）。实现催化诱导加速锂离子水平传输动力学，成功抑制枝晶形成，电池达成无枝晶化稳定循环 1600 h，比传统物理调控体系延长了约 2 倍。提出界面催化调控锂金属界面离子水平传输，重构锂离子输运维度的创新机制，并阐明了原子级催化调控锂离子传输维度的科学本质。

3 首次揭示 4f 离域电子型催化剂的多维度协同催化机制，为解决锂硫电池领域长期存在的“离子传输迟滞-硫转化动力学缓慢”耦合难题提供全新理论范式。

针对锂硫电池中锂负极存在锂传输势垒高引发枝晶以及硫正极硫物质转化动力学滞后引起穿梭效应等问题，构建“电子态离域（4f 离域）-溶剂

化鞘层重构（去溶剂化）-传输路径优化（锂水平沉积）”多维协同催化模型，突破了传统锂电池体系离子转移路径的认知边界，实现缺陷离域 4f 电子型催化剂（SDMECO@HINC）同时调控锂沉积动力学以及硫质转化动力学。借助离域缺陷氧化铈（ CeO_{2-x} ）的 4f 电子轨道与金属锂/多硫化物间产生显著轨道杂化效应，引发催化中心电子态重构，引起结构畸变形成更多的活性位点，提升催化剂本征活性，重构界面 Li^+ 溶剂化结构，脱出自由 Li^+ 促进负极 Li 的水平沉积及正极多硫化物快速转化。催化的锂硫电池获得高倍率容量（ 653 mA h g^{-1} , 5 C ）并实现了高能量密度（ 2264 W h kg^{-1} ）软包电池的模拟应用。采用界面敏感的原位和频振动光谱（SFG）技术跟踪了界面催化去溶剂化行为，揭示了界面催化去溶剂化对减小 Li^+ 空间溶剂位阻、降低去溶剂化能垒，促进锂离子跨电极/电解液界面传输促进锂沉积和硫转化的创新机制，为高动力学锂硫电池体系设计提供了新的理论框架。

四、 客观评价：

本项目在锂硫二次电池领域形成具有国际影响力的系统性成果，系列成果发表于 *Advanced Functional Materials*、*Advanced Science*、*Nano Letters* 等储能材料科学领域顶级期刊，1 篇论文入选 ESI 全球 Top 1% 高被引论文。形成自主知识产权体系，获授权国家发明专利 2 项。成功研制出高性能锂硫电池体系，实现载硫面密度 7.5 mg cm^{-2} 条件下（较当时国内外常规水平提升 50%）仍保持 5 mA h cm^{-2} 的高面容量，且在 1C 高倍率充放电时容量保持率达 75%，突破传统锂硫电池高载量与高倍率难以兼容的技术瓶颈。在贫电解液条件（ $7 \text{ } \mu\text{L mg}^{-1}$ ）下，还实现了软包电池高循环稳定性。实现了“理论创新-技术突破-应用验证”的全链条创新。系列工作受到国内国际电化学储能研究领域专家的广泛关注，多次被国内外知名学者如中国科学技术大学余彦教授、韩国嘉泉大学 Joonho Bae 教授等在 *Advanced Materials* 和 *Energy Storage Materials* 等顶级期刊上图文并茂的引用和正面评价。研究成果先后获 2024 年度陕西石化科技奖（三等），及 2025 年度陕西省高等学校科学技术研究优秀成果奖（二等），体现在行业内较高影响力且彰显基础研究成果服务国家“双碳”战略的示范效应。

五、 代表性论文专著目录：（注意：2023 年 8 月 1 日前公开发表，不超过 8 条。其中代表性论文不超过 5 篇，代表性专著不超过 3 部；填写时请注意基于论文专著全部作者填写，且按原文中英文填写，“国内作者”填写中文姓名）

序号	论文专著名称	刊名	作者	年卷页码 (xx 年 xx 卷 xx 页)	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	知识产权是否归国内所有
1	Tuning 4f-Center Electron Structure by Schottky Defects for Catalyzing Li Diffusion to Achieve Long-Term Dendrite-Free Lithium Metal Battery	Advanced Science	Jing Zhang, Rong He, Quan Zhuang, Xinjun Ma, Caiyin You, Qianqian Hao, Linge Li, Shuang Cheng, Li Lei, Bo Deng, Yifan Li	2022 年 9 卷第 220224 4 页	2022 年 6 月 8 日	Caiyin You Hongzhen Lin Jian Wang	Jing Zhang	张静, 贺蓉, 庄全, 马兴军, 游才印, 郝倩倩, 李麟阁, 程双, 雷黎, 邓博, 李喜飞, 蒯洪振	是
2	Electrochemical Kinetic Modulators in Lithium-Sulfur Batteries: From Defect-Rich Catalysts to Single Atomic Catalysts	Energy & Environmental Materials	Jing Zhang, Caiyin You, Hongzhen Lin, Jian Wang	2022 年 5 卷第 731-750 页	2021 年 7 月 15 日	Jian Wang	Jing Zhang	张静, 游才印, 蒯洪振, 王健	是

3	Long-Life Dendrite-Free Lithium Metal Electrode Achieved by Constructing a Single Metal Atom Anchored in a Diffusion Modulator Layer	Nano Letters	Jian Wang, Jing Zhang, Shuang Cheng, Jin Yang, Yonglan Xi, Xingang Hou, Qingbo Xiao, Hongzhen Lin	2021 年 21 卷第 3245-3253 页	2021 年 3 月 16 日	Jian Wang, Qingbo Xiao, Hongzhen Lin	Jian Wang, Jing Zhang	王健, 张静, 程双, 杨晋, 奚永兰, 候兴刚, 肖清波, 蔺洪振	是
4	Thermally conductive MWCNTs/Fe ₃ O ₄ /Ti ₃ C ₂ T _x MXene multi-layer films for broadband electromagnetic interference shielding	Journal of Materials Science & Technology	Heguang Liu, Zhe Wang, Yujia Yang, Shaoqing Wu, Chukai Wang, Caiyin You, Na Tian	2022 年 130 卷第 75-85 页	2022 年 6 月 2 号	Heguang Liu, Na Tian	Heguang Liu	刘和光, 王哲, 杨玉佳, 武少卿, 王楚凯, 游才印, 田娜	是
5	Confinement of sulfur species into heteroatom-doped, porous carbon container for high areal capacity cathode	Chemical Engineering Journal	Jing Zhang, Caiyin You, Jian Wang, Hong Xu, Chuanzhi Zhu, Shaohua Guo, Weihua Zhang, Rong Yang, Yunhua Xu	2019 年 368 卷第 340-349 页	2019 年 2 月 15 日	Caiyin You	Jing Zhang	张静, 游才印, 王健, 徐红, 朱传志, 郭少华, 张卫华, 杨蓉, 许云华	是

6									
7									
8									
<p>承诺：该表所列论文专著的知识产权归国内所有且无争议，未曾在往年国家科学技术奖励项目、往年省部级（政府）科学技术奖励项目和本年度其他陕西省科学技术奖提名项目中作为支撑材料出现。用于提名陕西省科学技术奖的情况，已征得未列入项目主要完成人和主要完成单位的作者的同意，其中，未列入项目主要完成人的第一作者、通讯作者（含共同第一作者、共同通讯作者）已出具知情同意书面签字意见，与其他作者的有关知情证明材料均存档备查。因未如实告知上述情况而引起争议，且不能提供相应</p>									

六、 主要完成人情况：

主要完成人：（依次列写完成人姓名）

排名	姓名	技术职称	行政职务	工作单位	完成单位	对本项目的贡献
1	张静	副教授	/	西安理工大学	西安理工大学	负责项目实验体系开发及性能分析和总结，对创新点 1、2、3 的提出做出了突出贡献。
2	游才印	教授	校新质生产力创新中心 主任	西安理工大学	西安理工大学	负责项目总体规划、把控项目整体研究方向和创新、理论突破与成果凝练，对创新点 1，2，3 提出有重要贡献。
3	田娜	教授	/	西安理工大学	西安理工大学	负责项目技术路线设计、项目进度监督、性能验证，对创新点 1 有重要贡献。

4	杨蓉	教授	/	西安理工大学	西安理工大学	对创新点 1 有重要贡献，提出了孔体积调控的方法规律。
6						

七、 主要完成单位情况：

主要完成单位：（依次列写完成单位名称）

排 名	完成单位	贡 献
1	西安理工大学	作为本项目的总负责和承担单位，在项目实施过程中负责项目的支持管理和监督工作
2		
3		

八、 完成人合作关系说明（合作方式包括专著合著、论文合著、共同立项、共同知识产权、共同获奖、共同参与制定标准规范、产业合作等。下表中的“项目排名”指在本次报奖中的完成人排序。）

完成人合作关系情况汇总表

序号	合作方式	合作者/项目排名	合作时间	合作成果名称
1	论文合著	张静/1、游才印/2、杨蓉/4	2015-2023 年	Chemical Engineering Journal, 2019, 368, 340-349.
2	论文合著	游才印/2、田娜/3、	2015-2023 年	Journal of Materials Science & Technology 2022, 130, 75-85
3				

4				
5				
不限 条目				

注意：专家提名项目还应公示提名专家的姓名、工作单位、职称和学科专业。