

不同电极体系下锂脱嵌行为的跨尺度原位观测与构效关系研究

2026年6月

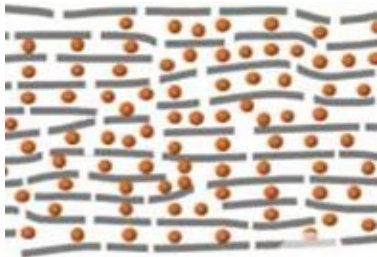


一、需求背景

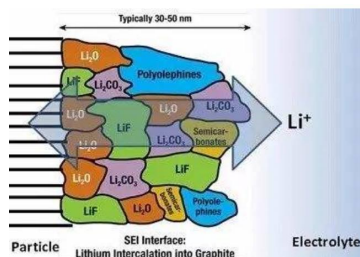
脱嵌锂行为研究的核心价值

锂离子电池的脱嵌锂过程伴随复杂的 **结构演化**、**界面变化** 和 **力学响应** 等一系列微观物理化学变化，是决定电池能量密度、充放电倍率、循环寿命及安全性能的核心本质。

极片膨胀



SEI膜生长

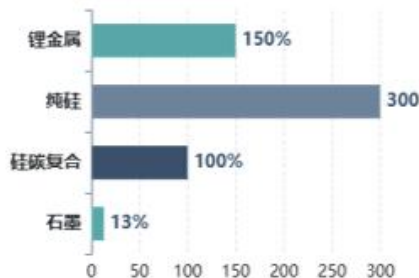


锂枝晶生长

Li dendrites growth



典型负极材料嵌锂体积膨胀率



深入理解脱嵌锂行为机制是优化电极材料设计、提升电池安全性和循环寿命的**核心科学基础**，对发展高能量密度电池技术具有重要战略意义。





一、需求背景

传统研究方法的局限性与挑战

📷 非原位表征 (Ex-situ)

问题：只能在循环前后获取静态快照，丢失关键中间态信息，**无法捕捉动态演化过程**，难以揭示反应机理和失效机制

✖ 时间分辨率：缺失

🔬 电子显微技术 (TEM/SEM)

问题：测试需**高真空环境**，与实际电池工作状态差异大，难以反映真实工况，结果代表性有限

✖ 工况真实性：受限

📡 电化学阻抗谱 (EIS)

问题：只能获得整体平均信息，无法定位局部失效区域，**缺乏空间分辨能力**，难以诊断电池内部不均匀性

✖ 空间分辨率：缺失

传统方法局限性

1 样品氧化与结构改变 传统拆解取样易引发电极氧化与 SEI 膜结构变化，导致观测结果与真实工况偏差显著。

2 信息滞后与瞬态丢失 传统表征只能获得某一时刻的静态快照，无法捕捉瞬态过程，导致关键动力学信息丢失。

3 构效关系缺乏直接证据 传统表征难以建立结构演变与电化学性能的实时关联，构效关系研究缺乏直接实验验证，多依赖间接推断与理论模拟。





二、需求必要性

原位观测技术的优越性与必要性

1 实时动态监测

在电池工作状态下实现**连续观测**，完整捕捉脱嵌锂过程的动态演化，揭示反应机理和失效机制

- ✓ 时间分辨：秒级~分钟级

3 跨尺度关联

从**原子**→**纳米**→**介观**→**宏观**，建立多尺度构效关系模型

- ✓ 空间分辨：Å级~mm级

2 真实工况表征

避免样品制备和测试环境干扰，获得**贴近实际应用**的数据

- ✓ 工况真实性：高

4 多维度信息融合

同时获取**结构、化学、力学**等多维度信息，全面理解电池内部复杂过程

- ✓ 信息维度：多

跨尺度研究框架

原子尺度 1 Å

⚙️ 晶体结构、离子扩散路径



纳米尺度 1-100 nm

● 颗粒形貌、SEI膜生长



介观尺度 1-100 μm

⚡ 电极结构、孔隙分布



宏观尺度 >1 mm

🔋 电池性能、循环寿命

亟需发展**原位光学观察**、**原位宏观力学检测**和**同步辐射表征**相结合的观测技术，**建立跨尺度原位观测体系**，从而揭示不同电极体系锂脱嵌的微观机制，构建微观行为与电池宏观性能的关联机制，为高性能电池设计提供理论支撑。



三、拟开展研究内容

研究内容一：原位光学观察技术

主要研究内容

形貌演变规律

研究电极脱嵌锂形貌演变规律，实时捕捉**体积膨胀/收缩、相界迁移、锂沉积形貌**

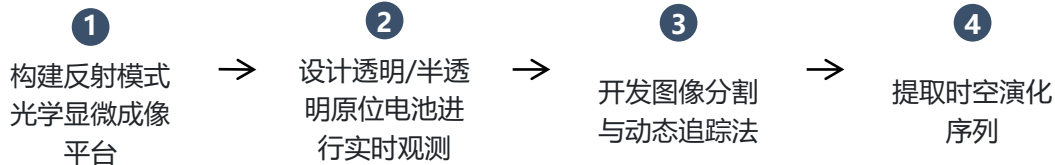
0° 工况影响研究

探究电流密度、温度等工况对锂沉积/溶解行为的影响机制

SEI膜形成机制

揭示SEI膜的动态形成机制及其对电池性能的影响规律

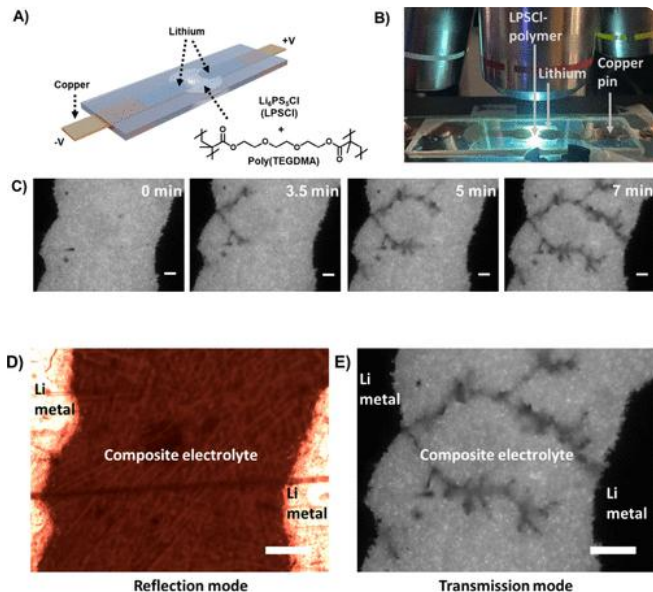
技术路线



可行性分析

光学显微镜技术成熟、成本可控，团队已有成功案例，实验室具备部分相关设备和经验。

原位光学观测示意图



三、拟开展研究内容

研究内容二：原位力学检测技术

研究目标

- ✓ 定量表征电极应力/应变演化
- ✓ 揭示力-电化学耦合机制
- ✓ 建立力学-电学定量关系

技术路线

- 1 数字图像相关法 (DIC) 全场应变分析
- 2 一体式离电传感 (UIS) 技术实现膨胀力长期稳定监测

主要研究内容

应力-嵌锂关系

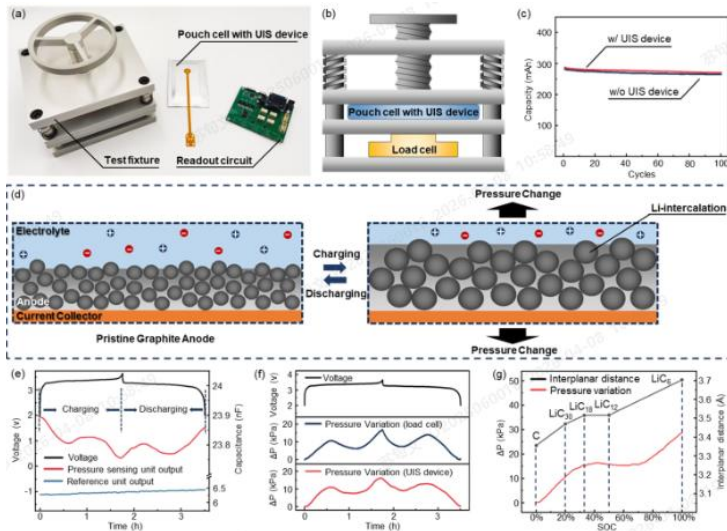
建立电极尺度应力/应变与锂离子嵌入程度的定量关系模型

应力诱导机制

揭示脱嵌锂诱导的应力集中、颗粒破裂与界面剥离机制

极端工况响应

研究快充、低温等非平衡条件下的力学响应规律，识别析锂等异常状态下的应力响应



可行性分析

DIC技术已在实验室验证，UIS技术已有Nature子刊发表案例，可实现Pa级灵敏度监测，团队具备力学测试和电化学研究基础。

三、拟开展研究内容

研究内容三：同步辐射X射线表征技术

研究目标

- ✓ 实现高时空分辨的结构信息获取
- ✓ 揭示原子到电极尺度的构效关系
- ✓ 追踪相变过程和化学态演变

技术路线

- 1 原位XRD追踪晶体结构演变
- 2 TXM观测颗粒形貌和裂纹
- 3 XAS分析元素价态分布

主要研究内容

相变过程监测

原位监测不同电极材料的相变过程和晶格参数变化规律

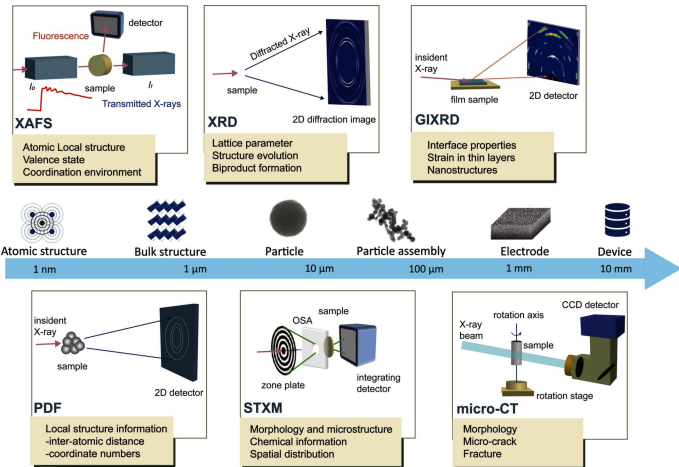
三维结构成像

高倍率循环下电极颗粒开裂、界面退化的三维成像分析

工况影响研究

温度、倍率等工况对锂沉积形貌和分布的影响机制

同步辐射多技术联用



可行性分析

依托校内同步辐射光源，具备成熟的原位电池设计经验和光束线合作基础，可实现秒级时间分辨和微米/纳米级空间分辨。

三、拟开展研究内容

研究内容四：跨尺度构效关系研究

跨尺度关联策略



原子尺度
晶体结构
1 Å



纳米尺度
颗粒形貌
1-100 nm



介观尺度
电极结构
1-100 μm



宏观尺度
电池性能
> 1 mm

多技术联用方案



光学观测
表面形貌
~1 μm分辨率



力学检测
应力应变
~1 Pa灵敏度

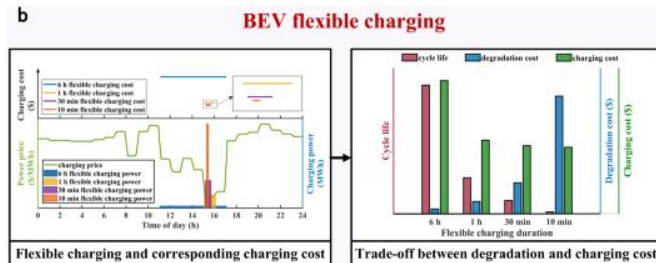
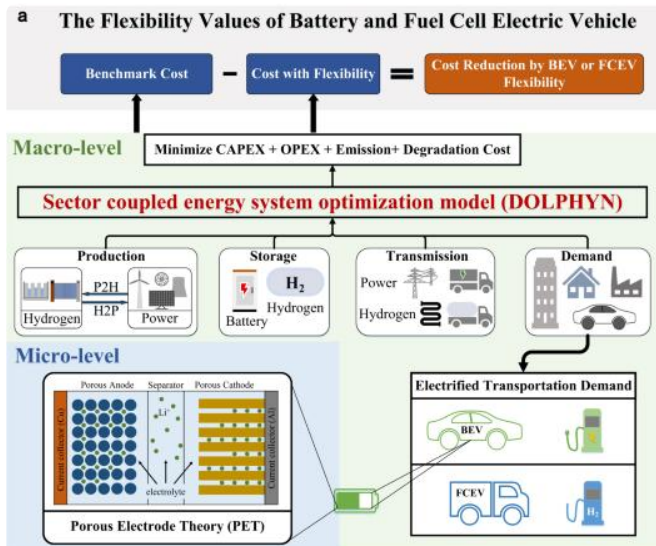


同步辐射
内部结构
μm~nm分辨率

构效输出

- 建立力-电化学耦合模型，绘制电极“脱嵌路径-应力响应-结构退化”三维图谱
- 阐明锂枝晶生长和电极失效的跨尺度演化机制
- 反哺电极孔隙设计、预锂化策略与电解液配方优化

跨尺度研究框架图





让绿色能源服务人类
To Make Green Energy
Accessible and Sustainable

