

中国科学院大连化学物理研究所
优秀博士后支持计划申请表

申请人： 庞龙

研究组： DNL0307 组

学科专业： 物理化学

合作导师： 彭章泉

填表日期： 2025 年 7 月 21 日

中国科学院大连化学物理研究所制

| | | | |
|--------------|----------------|-------------------------|--|
| 姓名 | 庞龙 | 性别 | 男 |
| | | 民族 | 汉 |
| 学历/学位 | 研究生/博士 | 授予博士学位时间 | 2024. 12. 3 |
| 博士毕业院校 | 中国科学技术大学 | 专业 | 分析化学 |
| (拟)入站时间 | 2024. 11. 25 | 入站性质 | <input checked="" type="checkbox"/> 统招统分 <input type="checkbox"/> 在职人员 |
| | | | |
| 学习经历 从本科起 | 起止年月 | 所在单位/专业 | 所获学位 |
| | 2015.9-2019.6 | 中南大学/新能源材料与器件 | 学士 |
| | 2019.9-2024.11 | 中国科学技术大学/分析化学 | 博士 |
| | | | |
| 工作经历 | 起止年月 | 所在单位 | 职务 |
| | 2024. 11 至今 | 中国科学院大连化学物理研究所 | 博士后 |
| | | | |
| 博士 | 博士论文题目 | 原位红外光谱/质谱技术在锂基电池中的开发与应用 | |
| | | | |

| | | | | | | | |
|----------------|-----------------|---|---------------------------|------------|-----------------------------|---|--|
| 期及入站后科研情况简介 | 2 | Unlock CO ₂ Reduction Reaction Pathways in Aprotic Li-CO ₂ Batteries with In Situ Isotope-Labeled Spectroscopy and Theoretical Calculations. | <i>J. Am. Chem. Soc.</i> | 15.5 | 2024/146(26)/17917 – 17923. | 1 | |
| | 3 | Hyphenated DEMS and ATR-SEIRAS Techniques for in Situ Multidimensional Analysis of Lithium-Ion Batteries and Beyond. | <i>J. Chem. Phys.</i> | 3.8 | 2023/158(17)/ 174701 | 1 | |
| | 4 | In Situ Spectroscopic Probing of Oxygen Crossover Effects on Solid Electrolyte Interphase in Aprotic Lithium-Oxygen Batteries | <i>Adv. Energy Mater.</i> | 26.8 | 2023/13 (29)/2301127 | 2 | |
| | 5 | Deciphering CO ₂ Reduction Reaction Mechanism in Aprotic Li-CO ₂ Batteries Using In Situ Vibrational Spectroscopy Coupled with Theoretical Calculations | <i>ACS Energy Lett.</i> | 20.5 | 2022/7 (2)/624–631. | 2 | |
| | 其他论文发表情况 | | | | | | |
| | 1 | Electrochemical Synthesis of Ammonia from Nitric Oxide Using a Copper-Tin Alloy Catalyst | <i>Nat. Energy</i> | 68.9 | 2023/8(11)/1273–1283 | 5 | |
| | 2 | Revealing Redox-Mediated CO ₂ Reduction Reaction Mechanisms in Aprotic Li-CO ₂ Batteries | <i>Adv. Mater.</i> | 28.9 | 2025/2506880 | 4 | |
| | 3 | Molecular Unravelling of the Structural Effect of Quinone Redox Mediators on Oxygen Reduction Reaction in Aprotic Lithium-Oxygen Batteries | <i>Nano Lett.</i> | 9.9 | 2024/24/13520–13527 | 3 | |
| | | | | | | | |
| | 3、专利情况： | | | | | | |
| 序号 | 专利名称 | 授权/申请 | 授权/申请号 | 起始日期 | 排序 | | |
| 1 | 电池检测系统、电池产气检测方法 | 申请 | 202311534215.7 | 2023.11.16 | 3 | | |
| 2 | 电化学检测系统 | 申请 | 202310430106.4 | 2023.04.20 | 2 | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| 4、获奖情况： | | | | | | | |

| 序号 | 奖励名称 | 奖励等级 | 授奖单位 | 奖励年度 | 排序 |
|----|------------|------|------|------|----|
| 1 | 博士研究生国家奖学金 | | 教育部 | 2024 | 1 |
| | | | | | |
| | | | | | |

| | |
|--|---|
| 博 士 后 工 作 的 研 究 计 划 | <p>博士后研究题目:原位谱学电化学研究锂离子电池负极界面传质特性对副反应的影响机制</p> |
| | <p>(简述研究计划的可行性、先进性和创新性,理论和现实意义)</p> <p>1. 研究内容</p> <p>1.1 研究背景</p> <p>锂离子电池 (LIBs) 因其能量密度高、循环寿命长等优势,已发展为新能源交通工具、便携式电子设备等的主流储能方式,是实现我国清洁能源高效利用、能源结构转型的关键储能技术。而在负极极低的电位下,LIBs 的负极 电解液界面热力学不稳定,许多可扩散至负极界面的物质不可避免地会诱发副反应: a. 电解液组分还原分解; b. 副反应产气 (H₂、CO₂、O₂等) 次生反应; c. 电池各部位 (正极、负极、隔膜中) 副反应可溶产物的串扰。通常这些副反应的不可溶产物会在负极表面形成固体电解质界面膜 (SEI), 允许 Li⁺通过而阻碍其它物种得电子还原,是 LIBs 正常运行的前提。作为 SEI 演化的源头,这些副反应过程控制着 SEI 的组成、结构,对 LIBs 的库伦效率、寿命、安全性等性能有着关键影响。</p> <p>自 LIBs 诞生至今,人们逐渐从负极表面化学、电解液溶剂结构等角度理解 SEI 演化相关的副反应机制,并借此调控 SEI 性质,极大改善了负极性能。但除此之外,副反应受传质过程的影响同样是不可忽视的。近年来国内外一些工作已逐渐认识到了这一点。孙世刚院士团队乔宇教授^[1,2]利用一系列原位光谱学方法,分别验证了 LIBs 正极和负极界面阴离子浓度演化对 CEI 和 SEI 带来的影响,通过设计合适的充放电方法来干涉阴离子的传质过程,即可获得优质的阴离子衍生 CEI 或 SEI。Wang 等人^[3]则通过 Hittorf 实验验证了 LIBs 二元溶剂电解液中由于溶剂迁移速率不同而导致的溶剂偏析现象,这将使 SEI 形成过程中负极界面溶剂比例发生明显变化,改变电解液分解副反应。</p> <p>这些开创性工作观察到了电解液各组分在扩散、电迁移过程中的不同表现,验证了副反应路径对于电极界面附近各物种浓度分布的敏感性。然而目前依然鲜有工作系统地阐明负极界面可溶物种传质特性对副反应的影响机制。随着目前商用电池追求更高能量密度,极片往往越来越厚且致密,其内部复杂的多孔结构会使各类可溶物种在副反应过程中受到不同的传质限制,改变副反应动力学和竞争关系,最终带来不同的 SEI 演化进程。因此,系统性地理解负极界面可溶物种传质特性及其对副反应的影响机制,将可以为调控 SEI 演化、提升 LIBs 性能提供新的理论基础和思路。</p> <p>参考文献:</p> <p>[1] Luo H, Ji X, Zhang B, et al. Angew Chem Int Ed, 2024, 63(51): e202412214.</p> <p>[2] Wang J, Luo J, Wu H, et al. Angew Chem Int Ed, 2024, 63(17): e202400254.</p> <p>[3] Wang A A, Greenbank S, Li G, et al. Cell Rep. Phys. Sci., 2022, 3(9): 101047.</p> |

1.2 研究对象和目标

本工作的研究对象是：锂离子电池负极界面附近各物种传质特性对副反应的影响机制。如图 1 所示，负极|电解质界面附近可溶性物种在发生副反应时，其传质特性将影响其浓度分布，进而影响副反应动力学，改变各副反应的比例(竞争关系)，最终影响 SEI 演化。为此，本工作拟构建传质环境可控的模型负极界面，联合多种灵敏的原位谱学电化学方法(微分电化学质谱、表面增强拉曼和红外光谱)，追踪副反应过程物质演化，获得不同传质环境下的副反应机制和传质规律。另外通过系统的模型实验定性/定量地获得关键可溶物种的传质特性(扩散系数、电迁移率等)，并结合理论模拟，最终揭示负极界面各物种传质特性对副反应的影响机制，为调控 SEI 演化、提升 LIBs 性能提供新的理论基础和思路。

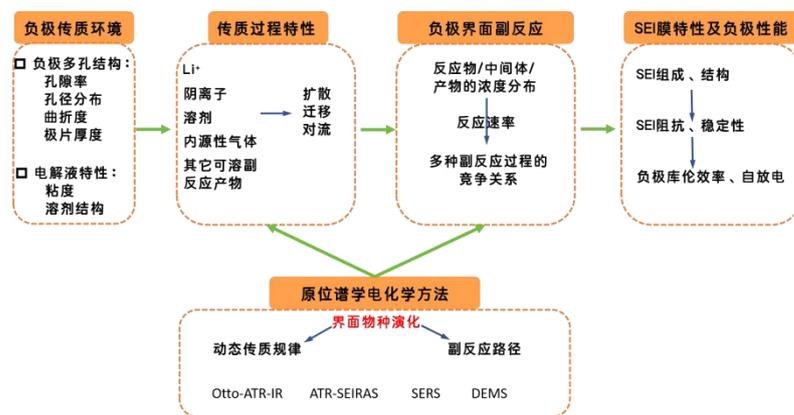


图 1 研究思路示意图

对此主要进行如下研究：

(1) 制备传质环境可控的模型电极

通过选用颗粒形貌规整的负极材料、引入惰性 PTFE 微球、模板法等方法，优化极片制备工艺，实现控制极片孔隙率、孔径分布、曲折度、厚度等特征，获得传质环境可控的模型电极，解耦实际极片的复杂传质环境。

(2) 表征关键可溶物种的传质特性

通过设计系统的模型实验，利用脉冲梯度场核磁共振法 (PFG-NMR)、扩散池法 (结合色谱、质谱)，定性或定量地表征特定传质环境 (确定的多孔电极结构、电解液组分) 下各类关键副反应相关物种 (溶剂、 Li^+ 、锂盐阴离子、副反应可溶产物) 的传质特性 (有效扩散系数、电迁移率等)。

(3) 原位谱学电化学解析负极界面副反应路径与动态传质规律

利用多种不同构造 (OTTO、Kretschmann) 的衰减全反射红外吸收光谱 (ATR-IR) 方法，通过调整入射光角度改变倏逝波穿透深度，追踪副反应过程中电极界面不同尺度范围内的各物种演化，获得反应过程动态传质规律。在此基础上结合原位表面增强红外 (SEIRAS) / 表面增强拉曼光谱 (SERS) 和微分电化学质谱 (DEMS)，互补地监测副反应过程负极界面挥发性、可溶或不可溶物种的演变，揭示不同传质环境下的负极界面副反应路径。

通过以上三个具体核心内容的研究，最终阐明负极传质环境-可溶物种传质特性-副反应机制之间的内在联系。

1.3 拟解决的关键科学问题

(1) 不同 LIBs 负极结构和电解液组成环境下，负极界面附近可溶物种的传质规律。在实际 LIBs 负极中，电极的多孔结构、厚度以及电解液的粘度、介电常数等都会影响各类物质的传质特性，带来不同的传质规律。对这些传质规律进行定性、定量的认识，对于构建负极界面副反应过程的物理图像至关重要。

(2) LIBs 负极界面附近可溶物种的传质特性对副反应的影响机制。LIBs 负极具有丰富的多孔结构，不同充放电过程也会影响多孔结构中的局部电解液组分，这些都为传质环境带来了复杂性，使得可溶物种表现出各异的传质特性。解析不同传质环境下的副反应机制，系统性地理解可溶物种传质特性与负极界面副反应的内在联系，将可为调控 SEI 演化、提升 LIBs 性能提供新的理论基础和思路。

2. 研究方案

2.1 技术路线

LIBs 负极界面附近可溶物质的传质特性受电极结构（孔隙率、孔径分布、曲折度、厚度方向距离等）、电解液环境（粘度、介电常数等）及其自身的物理化学性质控制，并进一步影响负极界面副反应机制。本工作将构建传质环境可控的模型电极，利用灵敏的原位光/质谱电化学技术，追踪不同传质环境下负极界面附近的各物种演化，获得副反应路径和传质规律。并设计模型实验测量副反应关键物种的传质参数，结合理论模拟，最终归纳负极界面附近可溶物种传质特性与副反应之间的内在联系，为调控 SEI 演化提供新的理论基础和思路。本工作的技术路线如图 2 所示。

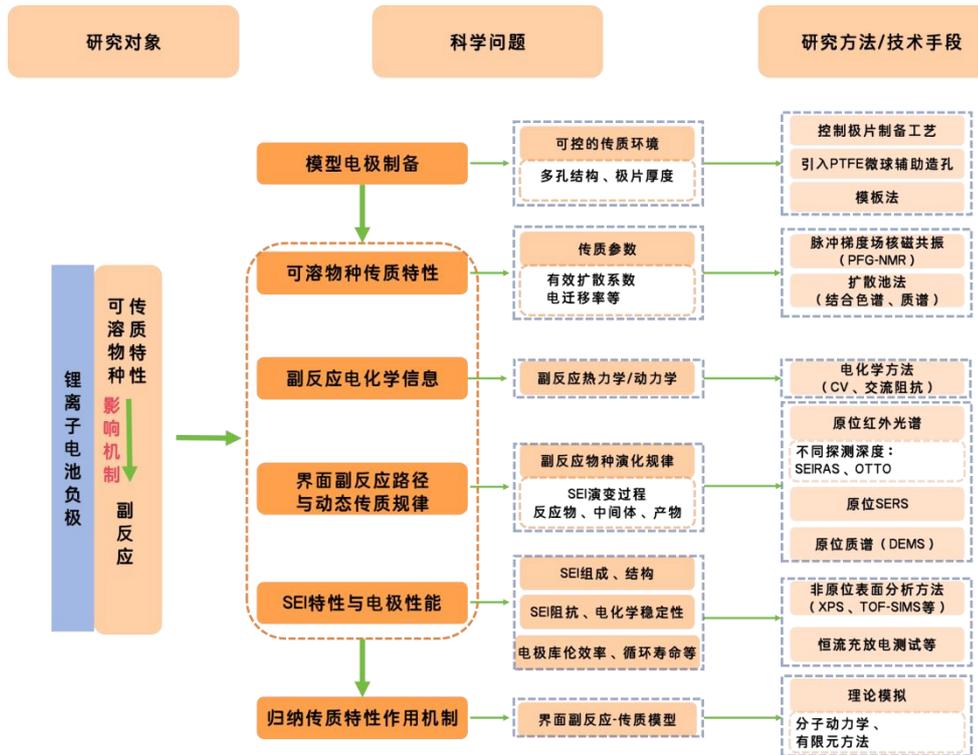


图 2 技术路线

具体技术路线如下：

2.1.1 制备传质环境可控的模型电极

为解析可溶物种传质特性对副反应的影响，需解耦实际负极的复杂传质环境，因此将通过形貌规整的负极材料（例如中间相炭微球）构建传质环境可控的模型电极：**a.** 通过控制粒径分布、压实密度等工艺，构建不同孔隙率、孔径分布、曲折度、厚度的极片，模拟实际厚电极不同部位的传质环境；**b.** 引入粒径均匀的情性聚四氟乙烯（PTFE）微球或铜微球，构建特殊传质环境（相似的传质路径，但排除传质路径周围电化学反应的影响），方便进一步解析具体传质特性的影响。**c.** 利用模板法构建多样化传质环境。同时利用扫描电子显微镜（SEM）、气体吸脱附分析、电化学阻抗法（EIS）等方法，系统地表征模型电极的传质环境（多孔结构、厚度、锂离子有效扩散系数等）。

此外，为通过表面增强拉曼/红外光谱技术获得负极界面副反应所涉及产物以及关键中间体信息，还需制备具有增强拉曼/红外能力的模型电极。通过在负极极片表面负载 SiO₂ 包覆金纳米颗粒（Au@SiO₂），实现界面拉曼信号增强。优化 Au@SiO₂ 负载量以实现最佳拉曼增强效果。在红外光学窗口（Si、ZnSe）上化学沉积或磁控溅射镀一层 Au 岛膜作为红外增强基底，再在其上电沉积/磁控溅射一层 Cu 金属薄膜，在此基础上进一步制备传质环境可控的模型电极，实现负极|电解液界面的红外信号表面增强效应。优化电沉积/磁控溅射条件以获得最强红外光谱增强效果，并使用 TEM、XPS 等技术对模型电极进行系统表征。

2.1.2 表征关键可溶物种的传质特性

定性、定量地获得负极表面附近副反应所涉及各类可溶物种传质特性（扩散系数、电迁移率等），是解析可溶物种传质特性对副反应影响机制的关键。因此本工作将设计系统的模型实验，利用脉冲梯度场核磁共振法（PFG-NMR）、扩散池法（结合色谱、质谱），表征特定传质环境（确定的多孔电极结构、电解液组分）下各类关键副反应相关物种（溶剂、Li⁺、锂盐阴离子、副反应可溶产物）的传质特性。

2.1.3 副反应电化学信息考察

本工作将构建三电极模型电化学系统，以传质环境可控的模型电极为工作电极，对电极和参比电极选取部分脱锂的 Li_xFePO₄ 电极（稳定工作平台，副反应少，避免对工作电极造成干扰）。电解液则选择目前商用锂离子电池常用的 LiPF₆ 作为锂盐，碳酸乙烯酯（EC）、碳酸二乙酯（DEC）、碳酸二甲酯（DMC）、碳酸甲乙酯（EMC）等作为溶剂，氟代碳酸乙烯酯（FEC）、碳酸亚乙烯酯（VC）等作为添加剂。采用 CV、恒流充放电和 EIS 等电化学方法，系统分析可溶物种传质特性对副反应电化学行为的影响。通过上述技术可获知：（1）热力学信息：如电解液还原分解电位等；（2）反应机制：判断是否有电子转移步骤（E）和化学反应（C）的发生，识别如 EC、CE 和 ECE 等反应机理；（3）动力学信息：给出电极反应所涉及的各个步骤的反应速率、SEI 阻抗等；（4）SEI 稳定性：漏电流等；（5）负极性能：库伦效率、容量变化。基于系统的电化学信息，推测可能的副反应机制，初步理解负极传质环境-可溶物种传质特性-副反应机制之间的内在联系，为后续原位谱学实验的开展奠定基础。

2.1.4 原位谱学电化学解析负极界面副反应路径与动态传质规律

（1）解析动态传质规律。 负极界面副反应会消耗或产生可溶物种，改变局部电解液组成、粘度、介电常数等。且 SEI 生长、负极材料荷电状态（SOC）状态改变，也会使负极孔结构改变。因此**负极界面附近的传质环境会随副反应进程而发生演变，需原位观察副反应的动态传质规律。** 衰减全反射红外光谱（ATR-IR）技术，可以通过调整红外光入射角度，方便地控制倏逝波穿透深度，获得电极厚度方向不同范围内的物质演化信息，由此推理副反应传质规律。**本工作将通过不同构造的 ATR-IR 技术，分析负极界面附近不同尺度下的副反应过程传质规律：**

a. OTTO 构造的 ATR-IR，可以追踪倏逝波穿透范围（约 1 μm 左右）内的物质

演化，分析电极界面扩散层附近的传质规律；

b. Kretschmann 构造的 ATR 表面增强红外光谱 (ATR-SEIRAS)，对电极表面附近约 10 nm 尺度范围内的物种演化具有非常高的灵敏度，适合分析双电层附近的传质规律。

(2) 解析副反应路径。 负极|电解质界面副反应将涉及挥发性、可溶和不可溶产物。为解析反应路径，需多种互补且灵敏的原位谱学技术相配合，具体如下：

a. 原位 SERS 和 ATR-SEIRAS 可以高灵敏地监测负极界面物种的演变，获得反应物、关键中间体、产物的谱学信息。

b. 原位 DEMS。负极界面副反应往往也伴随着挥发性产物出现，DEMS 技术可对此进行实时定量监测，与 SERS 和 ATR-SEIRAS 技术形成互补。通过记录的产气速率和反应电流，可推断副反应可能存在的基元步骤和反应中间态。

c. 根据 SERS、SEIRAS 和 DEMS 所获知的锂离子电池负极界面副反应的反应物、关键中间体、产物，与电化学结果相联系，推测可能的副反应路径。结合密度泛函理论 (DFT) 等计算结果验证反应路径的热力学可行性。对比不同传质环境下的副反应路径差异，分析可溶物种传质特性对负极界面副反应路径的影响机制。

2.1.5 SEI 特性与电极性能表征

利用一系列非原位技术表征 (AFM、SEM、TOF-SIMS 等)，研究不同传质环境影响下的 SEI 性质 (组成、形貌、结构等) 变化，为原位谱学电化学的结果作补充。同时通过恒流充放电测试、EIS 等电化学方法表征负极库伦效率、容量、循环寿命、阻抗等性能，帮助阐明可溶物种传质特性、负极界面副反应、SEI 性质和负极电化学性能之间的内在关联。

2.1.6 理论计算模拟

归纳副反应路径和传质规律之间的联系，结合分子动力学、有限元方法建立副反应的传质模型，通过理论模拟，获得可溶物种传质特性对副反应作用机制方面更全面的认识。

2.2 研究方法和实验手段

原位光/质谱电化学技术是本项目的核心研究方法和实验手段，具体如下：

(1) 原位光谱电化学技术

原位电化学光谱技术是光谱法与电化学方法相结合产生的谱学研究方法。图 3 是课题组自行搭建的原位 SERS 和 ATR-SEIRAS、OTTO-ATR-IR 装置及其示意图。三者可以互补地对非极性、极性物种，在宽光谱范围内、不同空间尺度下获得更为完整的分子振动信息。基于这些原位光谱技术，可以有效追踪负极|电解液界面附近物质变化，为副反应所涉及的关键物种提供直接的原位谱学证据，深入揭示不同传质环境下的负极副反应机制和传质规律。

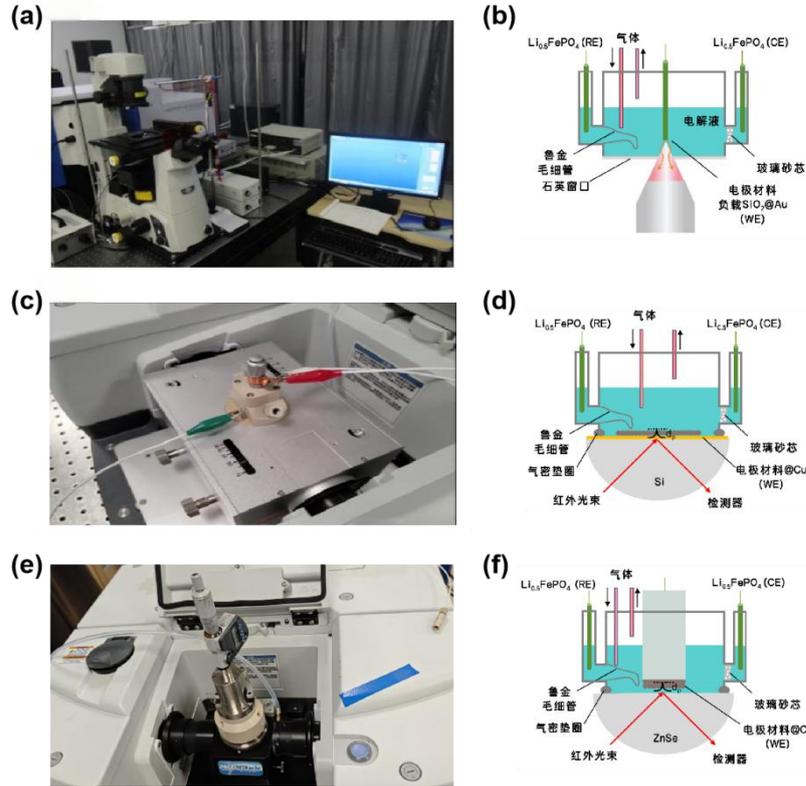


图3 原位 SERS 装置 (a) 设备照片及 (b) 示意图；SEIRAS 装置 (c) 设备照片及 (d) 示意图；OTTO-ATR-IR 装置 (e) 设备照片及 (f) 示意图。

(2) 微分电化学质谱技术

原位 DEMS 技术是传统电化学方法与现代质谱相结合的在线谱学分析技术，用于原位研究挥发性物种相关的所有电化学/化学反应。图 4 是课题组搭建的 DEMS，可以快速（时间分辨率：1 s 以内）和灵敏（低至 ppm 水平）地定性/定量锂离子电池负极副反应的产气情况。

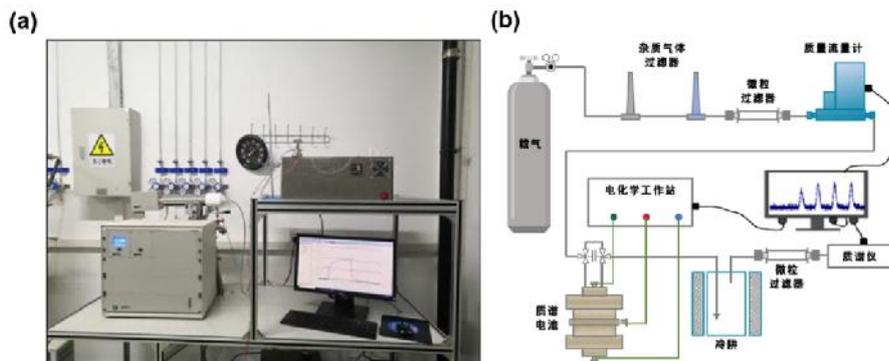


图4 微分电化学质谱装置 (a) 照片及 (b) 示意图。

2.3 年度研究计划

(1) 2025.03~2025.06: 制备模型电极，获得不同传质环境下的副反应电化学

表现。

(2) 2025.06~2025.09: 基于 PFG-NMR 和扩散池法, 设计模型实验定性、定量获得关键可溶物种传质特性。

(3) 2025.09~2026.09: 利用多种原位光/质谱电化学技术, 解析副反应路径与传质规律。

(5) 2026.09~2027.03: 结合理论计算和非原位表征, 归纳可溶物种传质特性、负极界面副反应、SEI 性质和负极电化学性能之间的内在联系。

以上研究计划将会根据实际情况交叉进行或适当调整。

2.4 预期研究成果

利用灵敏的原位光谱/质谱电化学技术, 原位表征不同传质环境下 LIBs 负极|电解液界面副反应路径和传质规律, 提供直接的中间体/产物谱学信息。结合可溶物种的具体传质特性以及电化学、理论计算和非原位表征结果, 归纳可溶物种传质特性、负极界面副反应、SEI 性质和负极电化学性能之间的内在联系。本项目申请期间, 发表高水平论文 2-3 篇, 申请国家发明专利 1-2 项, 参与国内外会议以及相关领域研讨 2-3 次。

3. 研究计划的可行性、先进性和创新性, 理论和现实意义

3.1 研究计划可行性

(1) **选题和研究思路可行。**锂离子电池负极界面附近的传质特性与副反应, 一直是影响负极性能的关键点, 但以往受限于传统单一的研究方法而对此缺乏系统性的理解, 亟需创新性的研究方法来获得新的认识。对此, 本工作将结合本人博士期间对于红外光谱/质谱技术在锂离子电池中的开发与应用经验, 从以下三个方面进行研究: 1、制备传质环境可控的模型电极; 2、表征关键可溶物种的传质特性; 3、原位谱学电化学解析负极界面副反应路径与动态传质规律。由此, **依靠合理的模型电极设计, 解构商用极片复杂的传质结构, 并借助原位谱学电化学方法获得描述各类可溶物种在负极界面附近传质规律的直接谱学证据, 最终理解负极传质环境-可溶物种传质特性-副反应机制之间的内在联系。**

(2) **前期积累和申请人知识技能可行。**申请人自 2019 年研究生开始, 一直从事锂离子电池的原位光/质谱电化学基础研究, 包括界面反应机理的研究和原位谱学方法的开发, 具备了全面的原位谱学电化学分析技能和研究经验, 截至目前, 申请人以第一作者身份在 *J. Am. Chem. Soc.*、*ACS Energy Lett.*、*J. Chem. Phys.* 杂志发表 SCI 论文 3 篇; 申请发明专利 2 件; 在一本锂离子电池表征技术相关的出版书籍 (CRC Press) 其中 1 章节上, 作为主要撰写人系统总结了微分电化学质谱研究方法。作为电极界面附近传质规律研究方法的验证, 申请人基于 LiFePO_4 模型电极, 利用 ATR-SEIRAS 研究了温度对正极界面不同状态溶剂分子的传质过程影响 (图 5)。可明显观察到碳酸乙烯酯 (EC) 和碳酸二乙酯 (DEC) 的不同传质规律, 以及随温度的变化。负极和正极的传质规律具有一定的相似性, 这一前期实验结果验证了原位谱学电化学方法研究电极界面动态传质规律的可行性, 将为分析负极界面可溶物种传质规律和副反应的内在联系提供参考。

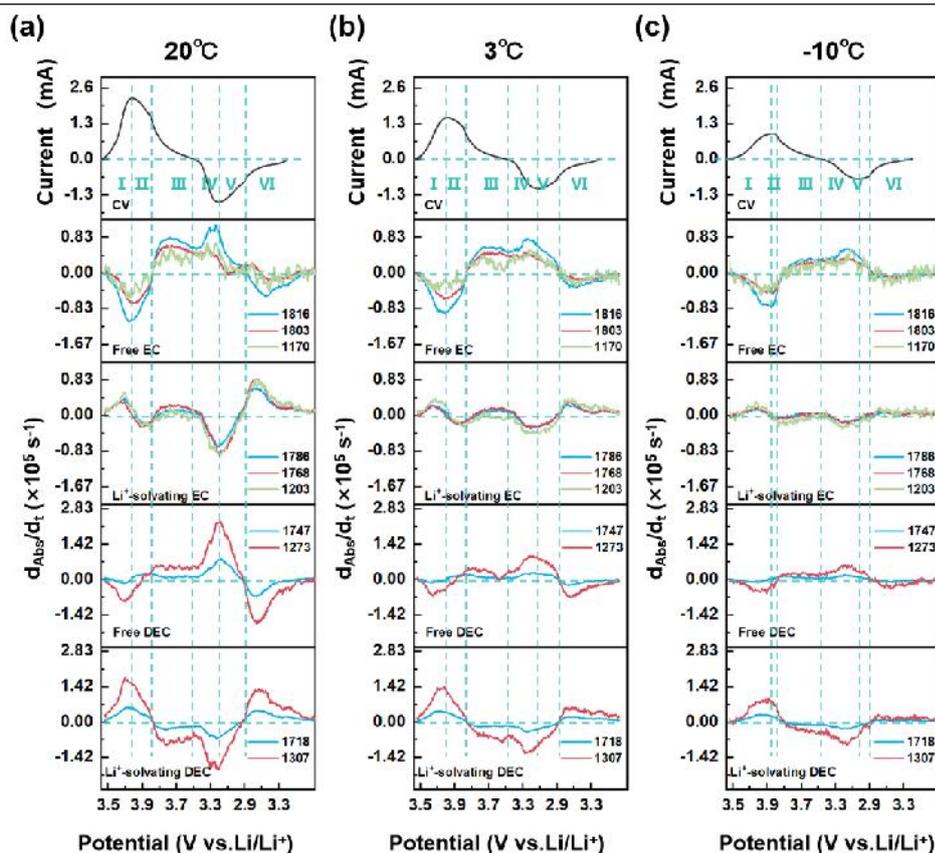


图 5 不同温度下 CV 扫描过程中, LiFePO₄ 电极|1M LiClO₄ EC-DEC 界面不同状态溶剂的红外吸光度变化速率。最上部为对应的 CV 曲线, 其它部分为红外吸光度变化速率随电位变化的曲线。

(3) 技术条件和硬件设施可行。申请人博士后合作导师长期从事锂电池的谱学电化学基础研究, 所在课题组具备原位拉曼、红外光谱及微分电化学质谱等在内的先进原位谱学研究平台, 测试表征条件完善, 完全满足本工作的实验表征需求。

3.2 先进性和创新性

(1) 在目标科学问题上具有先进性。以往对于锂离子电池负极界面副反应的研究, 往往只关注表面化学、结构以及电解液体相组成, 而忽略了各物种传质特性的影响。而商用极片为了追求能量密度往往较厚且致密, 具有复杂的多孔结构, 使各类可溶物种传质受限, 进而影响副反应动力学, 最终影响 SEI 的演化。本工作从负极界面各类可溶物种传质特性的角度探究负极副反应机制和 SEI 演化, 紧扣当前商用 LIBs 发展所暴露出的新问题、新难点。这将可以帮助更系统地理解 SEI 演化过程, 为调控 SEI 演化、提升锂离子电池性能提供新的理论基础和思路。

(2) 在研究方法上具有创新性。研究负极界面附近可溶物种传质特性和副反应之间的内在联系面临两大难点: 1) 可溶物种传质特性的控制和表征; 2) 负极界面副反应机制的解析。对此, 本工作通过设计传质环境可控的模型电极来控制可溶物种传质特性, 利用 PFG-NMR 和传统的扩散池法表征传质特性, 并利用两种不同构造的 ATR-IR 方法原位表征实际副反应过程中的动态传质规律。在此基础上, 利用原位表面增强红外/拉曼光谱、微分电化学质谱方法, 追踪副反应的反应物、关键中间体、产物, 结合理论计算和其它非原位表征结果, 系统地解析副反应机制, 归纳可

