

# 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书

申 请 人: 苏玉伟

研 究 组: DNL0307 组

学 科 专 业: 物理化学

合 作 导 师: 彭章泉

填 表 期 间: 2025 年 12 月 04 日

姓名	苏玉伟		性别	男			
出生日期			民族	汉			
学历/学位	理学博士		授予博士学位时间	2024.12.03			
博士毕业院校	中国科学技术大学		(拟)入站时间	2024.11.25			
E-Mail			联系电话				
研究领域	锂-空气电池和锂离子电池等储能器件界面反应机理研究						
学习经历 从本科起	起止年月	所在单位/专业			所获学位		
	2014.09– 2018.07	郑州大学/化学			理学学士		
	2018.09– 2024.12	中国科学技术大学/分析化学			理学博士		
工作经历	起止年月	所在单位			职务		
	2024.11– 至今	中科院大连化学物理研究所			博士后		
入站前期及入站后科研情况简介	1、主持或参与项目情况:						
	序号	项目名称	项目来源	项目金额	起止年度	角色	入站前/ 入站后
	1	现场谱学电化学研究 Li-CO <sub>2</sub> 电池放电反应原理	国家自然科学基金面上项目	66 万元	2020.01– 2023.12	参与	入站前
	2	原位电化学纳升电喷雾质谱研究 锂-空气电池可溶性媒介体催化与失效机理	国家自然科学基金委青年科学基金项目 C 类	30 万元	2026.01– 2028.12	主持	入站后
	2、代表性论文(10篇以内)						
	注: 第一作者或共同第一作第一, “作者排序”中, 如为通讯作者请填写“C”。						
	序号	论文题目	期刊名	影响因子	发表年度/ 卷期/页码	排序	入站前/ 入站后
1	Deciphering atomic electronic structure dynamics and site occupancy transitions in dictating sodium storage in hard carbon	Advanced Materials	IF=27.4	adma.2025 19384 , Accept	共 1	入站后	

	2	Probing the reactivity of protonated oxygen intermediate in aprotic media with in situ surface-enhanced infrared spectroscopy	Energy Storage Materials	IF=20.2	2024, 69, 103370	1	入站前
	3	Molecular unravelling of the Structural Effect of Quinone Redox Mediators on Oxygen Reduction Reaction in Aprotic Lithium-Oxygen Batteries	Nano Letters	IF=9.1	2024, 24, 43, 13520–135 27	1	入站前
	4	Mechanistic Study on Oxygen Reduction Reaction in High-Concentrated Electrolytes for Aprotic Lithium–Oxygen Batteries	The Journal of Physical Chemistry Letters	IF=4.6	2024, 15, 40, 10111–101 17	1	入站前
	5	Hunting the Culprits: Reactive Oxygen Species in Aprotic Lithium–Oxygen Batteries	The Journal of Physical Chemistry C	IF=3.2	2022, 126, 3, 1243–1255	1	入站前
	其他论文发表情况						
	6	Probing Lithium Carbonate Formation in Trace-O <sub>2</sub> -Assisted Aprotic Li-CO <sub>2</sub> Batteries Using in Situ Surface-Enhanced Raman Spectroscopy	The Journal of Physical Chemistry Letters	IF=4.6	2019, 10, 3, 322–328	2	入站前
	7	Deciphering CO <sub>2</sub> Reduction Reaction Mechanism in Aprotic Li–CO <sub>2</sub> Batteries Using in Situ Vibrational Spectroscopy Coupled with Theoretical Calculations	ACS Energy Letters	IF=18.2	2022, 7, 2, 624–631	3	入站前
	8	Critical Factors Affecting the Catalytic Activity of Redox Mediators on Li–O <sub>2</sub> Battery Discharge	The Journal of Physical Chemistry Letters	IF=4.6	2022, 13, 30, 7081–7086	3	入站前
入站 前期 及入	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	入站前/ 入站后

站后 科研 情况 简介	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
	博士后研究题目：锂离子电池石墨电极界面反应机理表征与失效模型建立 (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><b>1. 研究计划的提出：</b></p> <p>作为一种理想的锂离子可逆嵌入/脱出载体，石墨负极目前是高安全、高比能锂离子电池的核心部件<sup>[1,2]</sup>。商业化锂离子电池为追求高比能和高功率，往往对石墨电极进行高密度物质负载和多孔电极结构设计，获得电极材料与溶液的紧密接触提供大量的反应界面，实现较高的活性材料利用率和能量转换效率。然而，石墨厚电极多孔结构决定了其内部电极电势、电流的不均匀性，进而导致电极工作时固、液、气三相传质的不均一分布<sup>[3,4]</sup>。同时，锂离子电池工作时石墨的体积变化、SEI 的形成和副产物的累积会导致电极内部多孔结构动态变化<sup>[5,6]</sup>。在高倍率(大电流密度)或低温条件下引发电池工作电压的极化甚至发生石墨负极析锂失效等问题<sup>[7]</sup>。因此，迫切需要解析石墨多孔电极的界面反应机理和失效机制，建立失效模型助力锂离子电池在高倍率、低温等极端条件下的性能和安全性提升。</p>					
	<p><b>图 1. 商业软包锂离子电池结构、多孔电极特征与 P2D 模型简介</b></p>					

**博士  
后工  
作研  
究计  
划**

申请人结合前期实验结果和文献调研发现石墨多孔电极界面反应机理表征与失效分析存在以下三个难题：(1) 多孔结构带来的传质极化会造成石墨材料的电化学参数获取困难，如石墨嵌锂反应动力学参数交换电流密度 $j_0$ 报道存在数量级差异<sup>[8]</sup>；(2) 常用的原位光谱、质谱电化学技术难以对石墨厚电极进行有效分析；(3) 传统的宏观均质化“伪二维”模型(P2D)多孔电极模型缺少电极内部参数的动态演变信息<sup>[9,10]</sup>，无法准确预测石墨多孔电极内部产气、析锂等失效行为。

针对以上科学难题，申请人拟通过构造单颗粒厚度的石墨薄电极消除或减弱多孔电极内部传质极化的干扰，结合申请人前期建立的多技术互补的原位电化学谱学表征方法，开展石墨薄电极界面反应机理表征与失效分析，最后根据获取的研究结果拓展展现有多孔厚电极P2D电化学模型。

**参考文献**

- [1] Zhao L, Ding B, Qin X Y, et al. Revisiting the roles of natural graphite in ongoing lithium-ion batteries[J]. *Adv. Mater.*, **2022**, 34(18), 2106704.
- [2] Asenbauer J, Eisenmann T, Kuenzel M, et al. The success story of graphite as a lithium-ion anode material—fundamentals, remaining challenges, and recent developments including silicon (oxide) composites[J]. *Sustain. Energy Fuels*, **2020**, 4(11), 5387-5416.
- [3] Oghara N, Itou Y, Sasaki T, et al. Impedance spectroscopy characterization of porous electrodes under different electrode thickness using a symmetric cell for high-performance lithium-ion batteries[J]. *J. Phys. Chem. C*, **2015**, 119(9), 4612-4619.
- [4] Meyer L, Brow R, Weddle P J, et al. Operando FTIR investigation of salt dynamics in Li-ion batteries during fast charging[J]. *J. Power Sources*, **2025**, 656, 238058.
- [5] Dickmanns J L S, Reuter L, Morasch R, et al. Changes in Structure and Ionic Resistance of Lithium-Ion Battery Graphite Electrodes—Part I: Impact of Formation and SEI[J]. *J. Electrochem. Soc.*, **2025**, 172(7), 070513.
- [6] Hemmerling J, Guhathakurta J, Dettinger F, et al. Non-uniform circumferential expansion of cylindrical Li-ion cells—The potato effect[J]. *Batteries*, **2021**, 7(3), 61.
- [7] Waldmann T, Hogg B I, Wohlfahrt-Mehrens M. Li plating as unwanted side reaction in commercial Li-ion cells—A review[J]. *J. Power Sources*, **2018**, 384, 107-124.
- [8] Lee H, Yang S, Kim S, et al. Understanding the effects of diffusion coefficient and exchange current density on the electrochemical model of lithium-ion batteries[J]. *Curr. Opin. Electrochem.*, **2022**, 34, 100986.
- [9] Chen Z, Danilov D L, Eichel R A, et al. Porous electrode modeling and its applications to Li-ion batteries[J]. *Adv. Energy Mater.*, **2022**, 12(32), 2201506.
- [10] Jokar A, Rajabloo B, Désilets M, et al. Review of simplified Pseudo-two-Dimensional models of lithium-ion batteries[J]. *J. Power Sources*, **2016**, 327, 44-55.

## 2. 研究目标与关键科学问题:

(1) 研究目标: 本研究计划的研究目标包括以下四个部分

- 1) 建立稳定的单颗粒石墨薄电极工艺方法, 深入探索粘结剂和导电碳的作用;
- 2) 非原位测试获取准确的石墨电极结构参数 (材料粒径  $d$ , 厚度  $L$ , 孔隙率  $\varepsilon$  等) 和石墨材料的本征参数 (交换电流密度  $j_0$ , 扩散系数  $D$  等);
- 3) 开发薄电极原位电化学池, 建立薄电极原位谱学表征方法, 通过多技术互补的原位谱学电化学分析方法解析石墨表面反应机理和失效过程;
- 4) 根据获取电化学参数和反应机理信息拓展 P2D 模型, 建立动态的多孔电极 P2D 电化学模型并预测电池失效“跳水”现象。

(2) 关键科学问题: 本研究计划中的关键科学问题有以下三个

- 1) 准确提取石墨材料的本征电化学参数是研究开展的基础, 申请人拟通过单颗粒、薄电极、厚电极三个不同尺度的测试进行对比, 建立薄电极电化学测量准确获取石墨材料本征电化学参数的方法;
- 2) 解耦多种原位谱学技术获取的固、液、气三相中的反应信息是研究石墨表面反应机理和失效过程的关键, 申请人拟通过有限元仿真模拟同步解耦不同原位池中的电化学结合原位谱学的分子信息, 获得石墨电极界面反应机理和失效机制;
- 3) 根据反应机理和失效机制拓展 P2D 模型是本研究计划的核心科学问题, 申请人拟通过多孔电极有限元仿真加入电极孔隙率变化、副产物气泡累积等原位表征信息, 开发动态多孔石墨电极电化学模型。

## 3. 研究内容与方案:

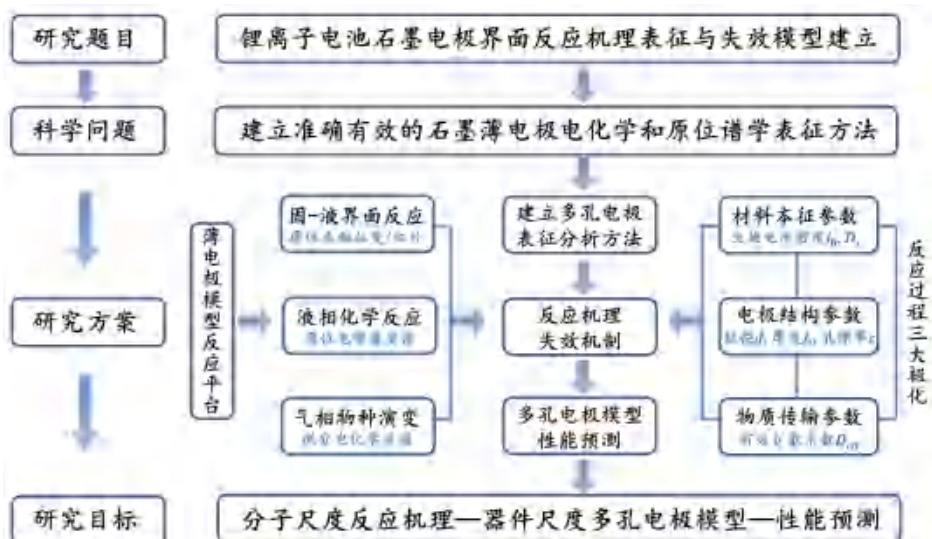


图 2. 研究计划技术路线图

本研究计划的技术路线图如图 2 所示, 首先开发模型薄电极, 消除多孔厚电极的不均匀性, 为基础电化学研究和原位谱学表征提供有效的测试平台, 具体研究方案包括以下内容:

- 1) 电化学测试结合有限元仿真模拟准确测量多孔电极模型所需的电极结构参数和电化学体系的物质传输参数;
- 2) 原位红外/拉曼光谱、电喷雾质谱和微分电化学质谱等, 定性定量解析石墨界面(副)反应机理, 获得锂离子电池石墨负极反应过程的物理化学图像;
- 3) 根据多孔电极孔隙率  $\varepsilon$ 、交换电流密度  $j_0$  等特性参数的变化, 利用有限元

仿真模拟建立随电池状态变化的动态多孔电极电化学模型；

4) 预测锂离子电池负极石墨析锂“跳水”现象并进行反馈优化。

#### 4. 可行性分析：

本研究计划的可行性主要从以下三个方面体现：

(1) 申请人具备扎实的谱学电化学研究积累和多孔电极理论建模，申请人前期研究中成功运用有限元仿真模拟对锂-空气电池正极界面过程进行了解析，具备坚实的电化学功底和仿真基础。本研究计划前期成功对锂离子电池石墨负极材料在不同倍率、不同粒径下的充放电曲线进行了仿真模拟，如图 3.a 和 b 所示。为后续根据反应机理开发拓展 P2D 模型奠定了基础。

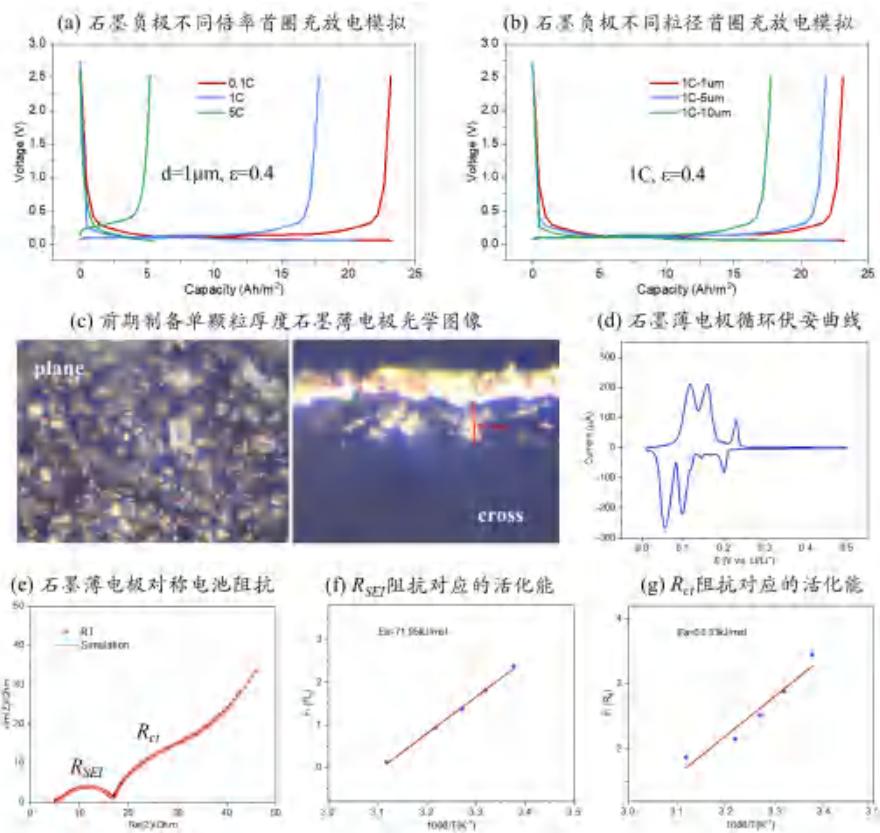


图 3. 前期仿真模拟进展与薄石墨电极制备表征结果

(2) 目前已成功制备出单颗粒厚度的石墨薄电极（图 3.c），实现基础电化学循环伏安表征（图 3.d）并成功分离出石墨电极对称电池阻抗信息中的固态相间层（SEI） $R_{SEI}$ 信息和锂离子嵌入石墨反应  $R_{ct}$  信息(图 3.e-g)，这是传统厚电极测试无法区分的关键参数，充分体现了石墨薄电极的可行性和优越性，为石墨薄电极谱学表征和电化学表征建立了通用的研究平台。

(3) 合作课题组长期致力于基础电化学研究，并搭建有先进原位谱学电化学表征平台，包括原位拉曼/红外、核磁共振、电喷雾质谱和微分电化学质谱等先进原位谱学技术，相关研究论文发表于 *Science*、*Nat. Mater.*、*Nat. Chem.*、*Nat. Commun.*、*Angew. Chem. Int. Ed.*、*J. Am. Chem. Soc.*、*Nano Lett.* 等国际一流期刊。

博士  
后工  
作研  
究计  
划

同时，合作导师和课题组团队在上述领域的深厚研究积累与突出学术成就，将为本研究计划的顺利开展提供全方位的技术指导与学术支持。同时，课题组长期与厦门大学、武汉大学、宁德时代等知名高校、企业合作，为本研究的推进提供了很好的交流平台和研究成果应用推广平台。

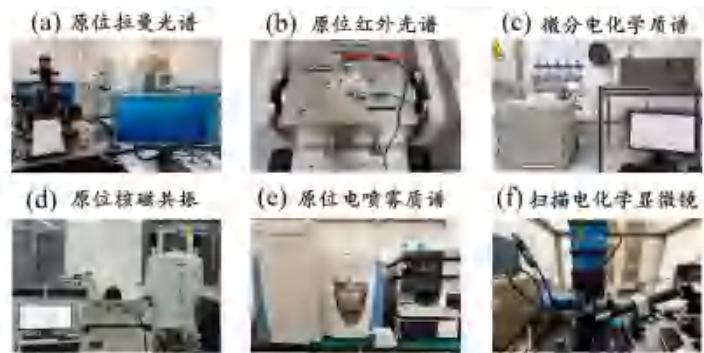


图 4. 合作课题组搭建的先进谱学电化学原位表征平台

#### 5. 先进性与创新性：

本研究计划的先进性与创新性主要体现在以下两个方面：

(1) 目前研究领域内单颗粒表征和厚电极表征所获得的石墨材料电化学参数往往存在很大差异。本研究计划创新地开发石墨薄电极，即保留了真实厚电极中环境因素又大大削弱了多孔电极传质极化对电化学测量的干扰，具有很好的创新性和先进性；

(2) 锂离子电池领域内对于石墨负极分子层级机理认识与电池模型之间存在科学认识壁垒，利用本研究计划开发的石墨薄电极结合原位谱学表征和多孔电极电化学建模解耦谱学信息和电化学信息，建立拓展的 P2D 多孔电极模型，可以很好地克服该科学认识壁垒，预测锂离子电池石墨负极析锂等失效现象。

#### 6. 理论与现实意义

(1) 理论意义：本研究计划开发的锂离子电池石墨薄电极研究方法，可获得石墨电极界面反应机理和失效认识，并且具备很好的普适性，可应用于多种高比能二次化学电源多孔电极研究，推动锂离子电池基础科学认识和谱学电化学分析方法在化学电源领域的应用。

(2) 现实意义：本研究计划获得的成果可用于指导锂离子电池多孔电极的合理设计，预测石墨电极产气析锂等失效行为的出现，为提升商业锂离子电池在高倍率、低温等极端条件下的性能和安全性提供科学方法和调控策略。

本人承诺：申请表所填内容均真实可靠。对因虚报、伪造等行为引起的后果及法律责任均由本人承担。

本人  
承诺

本人签字：

苏文伟

2025 年 12 月 04 日