

# 张莹——未来三年研究计划

## 面向高比能锂二次电池的阻燃聚合物电解质研究

### 研究目标

本项目将通过分子结构设计构筑兼容高能量密度电池体系的阻燃聚合物电解质为总体研究目标，探究锂二次电池热安全失效因素，建立从材料尺度到软包尺度的热失控分析方法，提出电池热失控保障机制，为现有商业化液态锂离子电池面临的严重电池热失控难题提供解决方案。

### 研究背景

热安全是发展高能量密度锂二次电池的关键。美国消费者安全委员会 2018 年 2 月的报告显示，在 2012 年至 2017 年期间，400 余种消费品发生了 2.5 万起电池过热或起火事件。电池使用过程中的机械碰撞、针刺、过热等滥用情况可能会造成电池内部温度急剧上升，最终导致严重的热失控事件。商业化液态易燃有机电解液的热分解是诱发电池热失控的主要原因。电解液热分解产生大量高活性自由基（例如氧自由基、氢氧自由基等），自由基之间的链式反应促使电池内部产热速度呈指数级上升。剧烈的链式反应放热带来的电池内部高温环境也会触发其他电池材料状态的变化和后续更严重的热安全问题，例如：剧烈的隔膜收缩导致电池内短路，在电池内部产生大量焦耳热，以及正极材料剧烈分解产生大量的可燃性气体。这一系列连锁反应，会加速电池热失控发生。因此，控制电解质的自由基链式反应对提升锂二次电池热安全性至关重要。前期研究主要集中在电解液阻燃添加剂的研究，虽能有效捕捉自由基，中断链式反应，但无法形成稳定的电极-电解质界面层，导致电池循环快速衰减。本项目拟开展工作提出构筑面向高比能锂二次电池的阻燃聚合物电解质策略，构建稳定的电极-电解质界面和热响应阻燃机制，为开发安全长效的高比能锂二次电池提供解决方案和理论基础。

### 研究内容

#### **（1） 功能化阻燃型聚合物电解质设计与材料热安全行为研究**

拟通过分子结构设计，利用功能化单体共聚交联，开发简单有效的阻燃型聚合物电解质膜制备技术。从材料尺度，评测电解质阻燃性能，深入研究高温环境下单一电解质材料、单一电极材料、电解质与电极材料混合物的热分解行为。拟

获得在高温下可捕捉氧自由基、氢氧自由基，中断燃烧链式反应的阻燃型电解质。

### **(2) 阻燃电解质-电极界面的钝化机制与电池长循环性能的构效关系**

功能性阻燃剂与负极材料之间无休止的副反应问题使锂二次电池的循环性能受到严重影响。本项目创新性地提出阻燃单体与高分子骨架间共聚交联策略，用于提升电解质-电极界面稳定性。拟通过第一性原理方法，分析阻燃电解质热力学稳定窗口。研究阻燃电解质离子传导特性，及阻燃电解质与电极界面相成分、形貌、离子运输、电子运输特性，解耦分析电极-电解质界面相及其对锂二次电池长循环性能的影响。

### **(3) 软包电池热失控机制探究与热行为调控**

通过绝热加速量热仪技术，深入研究软包电池在高温环境下热失控行为，考察阻燃电解质对软包电池热失控特征温度、产热量、产气种类的影响，为锂二次电池热失控机制的理解和热行为调控提供理论依据和实验基础。

## **工作方式**

本项目将基于课题组前期在聚合物基、陶瓷基固态电解质制备的研究基础，整合自身在高比能二次电池领域积累的知识与经验，充分利用中国科学院化学研究所以及分子纳米结构与纳米技术重点实验室等平台的基础设施和实验条件开展研究。积极与国内外开展合作交流，深入理解电池热安全机制，为解决高比能锂二次电池热失控问题提供解决策略。

## **预期成果**

理解电池热安全机制，探索和设计阻燃聚合物电解质，推动其高比能电池体系中的应用，提升锂二次电池使用安全性。预期在国内外高水平期刊上发表 3-5 篇有影响力的研究论文，申请 1-2 项发明专利。