

电化学储能材料计算与设计专题序

施思齐^{1,2}

(1.上海大学核电关键材料全国重点实验室,材料科学与工程学院,上海 200444;

2.上海大学材料基因组工程研究院,上海 200444)

关键词: 电化学储能材料; 计算与设计

中图分类号: TQ152

文献标志码: A

文章编号: 0454-5648(2025)07-1777-02

电化学储能是通过特定化学反应实现电能与化学能之间转换与存储的一项储能技术。电化学储能材料是实现大规模储能技术的核心,其中材料的电子/离子输运机制、表/界面结构及副反应、界面兼容性等诸多科学问题,很大程度上影响电化学储能器件(如:二次电池、超级电容器、燃料电池等)高性能的发挥。在国家“碳达峰”与“碳中和”计划逐步实施过程中,电化学储能材料的设计与研发已成为驱动高性能储能系统的关键因素之一。针对电化学储能材料,通过化学合成、实验表征及理论计算等方法已成为无机非金属材料学、能源存储与转换材料、能源材料与化学等交叉领域的研究热点。

本专题主要关注于电化学储能材料中的离子和电子传输机制、新型电化学储能材料设计与构效关系研究、电化学储能材料大数据与人工智能、面向电化学储能材料应用多尺度计算方法等方面。本专题由 1 篇综述性文章和 17 篇研究性论文组成,涉及机器学习、高通量计算、大语言(大原子)模型、多尺度多物理场仿真及第一性原理计算等先进算法探

究电解质与电极材料电化学性能及复杂的界面问题,旨在充分发挥人工智能、大数据、大模型等材料信息挖掘功能,并利用物理模型深入发掘材料结构与性能之间的构效关系,阐明电化学储能材料的作用机理。目前,在电化学储能材料开发过程中难以满足产业界对高性能材料的迫切需求,且单一尺度/精度的计算方法难以应对当前电化学储能材料设计中所面临的化合物种类庞杂、数据多源异构和多目标性能评估等挑战。因此,为了突破瓶颈,通过智能计算与优化设计衔接基础理论知识和科学问题,研究模式由“经验指导实验”向“数据驱动建模与性能预测的 AI 赋能材料设计”转变已成为新的研究范式。由数据驱动的 AI 赋能正成为电化学储能材料迭代更新的核心原动力。

本专题征集了国内主要从事电化学储能材料和理论计算研究团队的最新研究成果,对相关领域的研究者具有一定的指导和借鉴意义,有望促进相关领域研究的发展及算法与成果的应用。由于专题篇幅有限,专题内容难免存在疏漏与不足之处,还望各位读者批评指正。

Editorial for Special Issue on Computation and Design of Electrochemical Energy Storage Materials

SHI Siqi^{1,2}

(1. State Key Laboratory of Materials for Advanced Nuclear Energy, School of Materials Science and Engineering, Shanghai University, Shanghai 200444, China; 2. Materials Genome Institute, Shanghai University, Shanghai 200444, China)

Keywords: electrochemical energy storage materials; computation and design

※ ※ ※ ※ ※ ※ ※ ※ ※ ※ ※