

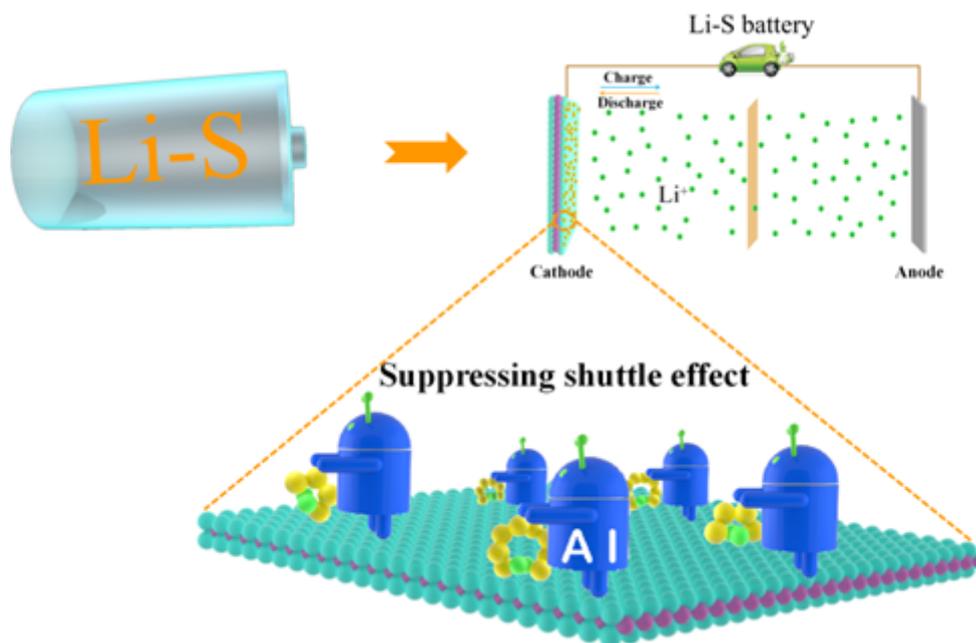
## 探索发现 · 交大智慧

### 上海交大电院李金金团队在锂硫电池正极材料的筛选和发现领域取得新突破

2020年11月16日 责任编辑：李劲湘

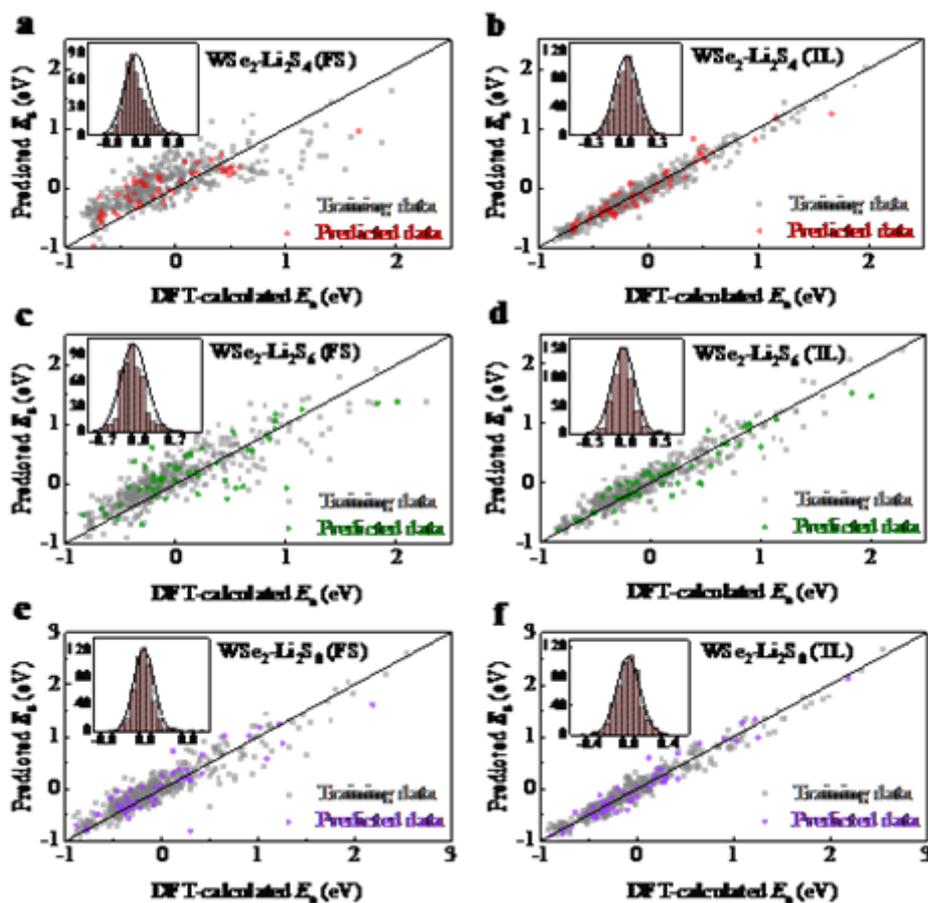


近日，上海交通大学电子信息与电气工程学院李金金团队在国际顶级能源期刊 Energy Storage Materials 上 (IF=16.28) 发表最新研究成果，该研究利用机器学习方法快速准确预测锂多硫化物的吸附效应，助力锂硫电池正极载体材料的筛选和发现。



基于人工智能方法抑制锂硫电池穿梭效应示意图

锂硫电池在充放电过程中产生的锂多硫化物，极易通过电解液穿梭到锂金属负极，与其进行反应，造成快速的容量衰减和低的库伦效应，严重制约着锂硫电池的进一步发展和应用。如何通过正极载体材料有效的锚固住锂多硫化物，进而改善锂硫电池的循环性能，是当前亟待解决的问题。

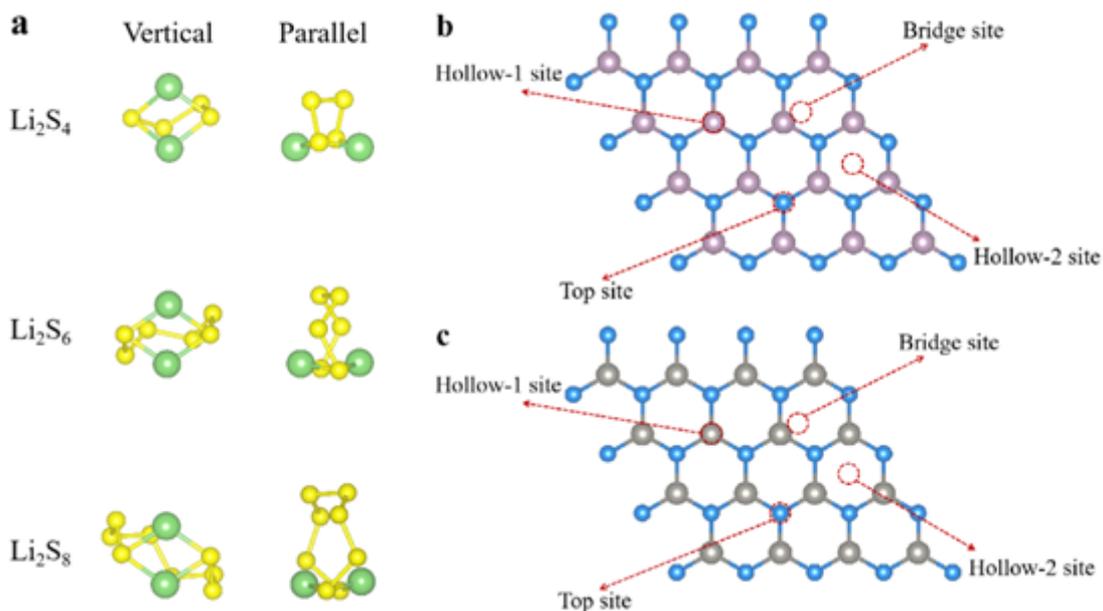


DFT计算和ML预测的吸附能，插图为误差分布直方图

(a, c, e, 从头训练方法，误差约为0.24 eV; b, d, f, 迁移学习方法，误差约为0.1 eV )

李金金团队通过密度泛函理论 (DFT) 计算，构建了数千个MoSe2与锂多硫化物的吸附能数据库，通过机器学习对锂多硫化物不同空间构型和不同吸附位点的吸附能做出快速、准确的预测。与DFT相比，吸附能的平均绝对误差仅约为0.1 eV，但预测速度快近百万倍，这样使得考察锂多硫化物在电池循环过程中的迁移和转化成为可能。为了进一步降低DFT带来的计算成本，该团队首次在吸附效应中引入迁移学习算法，仅仅利用较小的WSe2与多硫化物的数据库，即可达到相同的预测精度。该研究成果开拓了迁移

学习在复杂材料体系中的应用，证明了迁移学习可以跨越材料性质数据稀缺的障碍。这对于研究不同的二维正极材料与锂多硫化物的吸附作用，提供了一个通用的预测模型，具有直接的指导意义。



a 两种锂多硫化物空间构型 b, c 四种吸附位点

上海交通大学电子信息与电气工程学院为第一通讯单位。微纳电子学系2018级硕士生张海阔和2019级博士生汪志龙为本论文的共同第一作者，微纳电子学系李金金特别研究员和安徽师范大学刘金云教授为共同通讯作者。该研究工作得到了国家自然科学基金、上海交通大学等的支持。

## 论 文 链 接 :

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2405829720304219>  
(<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2405829720304219>)

作者： 电子信息与电气工程学院  
供稿单位： 电子信息与电气工程学院