

# 量化任意分子构成溶剂化壳层的优先级的方法

## 能源和环境

节能/发电/管理/储存 (电池)

计算机/人工智能/数据处理和信息技术

## 机会

电池的性能，特别是在容量、稳定性和充电速率方面，与电解液中离子的溶剂化壳层结构密切相关。这种由离子周围紧密结合的分子构成的壳层决定了离子的行为。因此，设计具有最佳溶剂化壳层的电解质成分对于推进电池技术至关重要。然而，这项设计任务异常具有挑战性，因为现代电解质是多种溶剂和添加剂的复杂混合物。要预测离子溶剂化壳层的最终组成，必须了解每种组分进入壳层的相对优先级或亲核性。传统上，这依赖于路易斯碱度或供体数等经验参数。这些参数的测量涉及复杂且费力的实验程序，导致一个严重的限制：仅有有限数量的物质拥有可靠数据。因此，新型高性能电解液的开发严重受限于这种全面、易于获取的数据的缺乏，迫使研发依赖于直觉和零碎的实验，这减缓了能源存储和电化学等领域的创新和优化进程。

## 技术

本专利提出了一种计算方法来量化任意分子构成溶剂化壳层的优先级，从而解决了数据稀缺的问题。其核心创新在于在水溶液环境中使用分子动力学模拟，并以水分子作为通用参考标准。该方法涉及模拟一个包含目标离子（例如锂离子）、水和待测分子的体系。关键指标是在引入测试分子后，离子第一溶剂化壳层中剩余的水分子数量。具体而言，该方法计算测试分子从壳层中置换出的水分子数量。优先级随后通过剩余水分子数量反向定义；数量越少，表明测试分子进入并占据溶剂化壳层的优先级越高。该过程基于精确的计算技术：它利用标准的MD软件包（如GROMACS、AMBER），并明确定义了系统初始化、能量最小化和模拟动力学参数（包括通过V-rescale和C-rescale方法进行温度/压力控制，以及通过粒子网格Ewald方法处理长程静电作用）。溶剂化壳层中的水分子数量通过积分离子-氧径向分布函数直至其第一个最小值来严格确定。这提供了一种客观的、基于模拟的溶剂化壳层占据度量，替代了难以获得的实验参数的需求。

## 优势

- 提供了一种通用的、基于计算机模拟的方法来量化几乎任何分子的溶剂化壳层优先级，克服了实验供体数数据稀缺的限制。
- 提供了一种基于基础物理模拟的标准化、可重复且客观的度量标准（剩余水分子数），减少了对经验直觉的依赖。
- 能够通过计算预测电解质添加剂和溶剂分子的相对亲核性和成壳倾向，实现高通量筛选。
- 提供了分子水平的溶剂化结构和竞争性离子-分子相互作用的见解，这些见解难以仅从实验中获得。
- 高度灵活，可通过调整模拟参数来研究不同的离子、溶剂环境和分子种类。

备注

IDF:1699

IP状态

已申请专利



技术成熟度等级 (TRL) ?

4

发明人

支春义教授

范俊教授

王泰然博士

查询: [kto@cityu.edu.hk](mailto:kto@cityu.edu.hk)



## 应用

- 先进电池电解质设计: 用于理性筛选和优化锂离子及下一代（如锂金属、钠离子）电池中的溶剂、共溶剂和添加剂，以改善离子电导率、SEI稳定性和循环寿命等性能指标。
- 电化学研究: 用于研究各种电化学系统（包括超级电容器和燃料电池）中离子传输、溶剂化动力学和界面现象的基础研究。
- 药物研发: 通过了解候选分子如何与生物离子或溶剂环境相互作用，来研究药物的溶剂化、结合亲和力和溶解度。
- 材料科学: 用于设计功能性液体体系、离子液体和低共熔溶剂，这些领域需要特定的溶剂化结构以实现催化或分离过程。
- 计算化学工具: 作为分子模拟工作流程中用于表征分子相互作用和溶剂化特性的有价值的方案。

