



## 研究生课程教学大纲

课 程 名 称：	能源材料前沿进展		
	Recent development of energy materials engineering		
课 程 编 号：	ZB14301D		
开 课 单 位：	材料科学与工程学院	开 课 学 期：	2
课 内 学 时：	32	学 分：	2
适 用 学 科 专 业 及 层 次：	能源动力/能源材料工程，博士研究生		
授 课 语 言：	中文		
先 修 课 程：	材料化学、材料科学基础、材料结构表征与应用		
负 责 人：	邢伟	团 队 成 员：	孙建波、张腾、于濂清、赵文、赵联明、李学进

### 一、课程简介

本课程为校管选修课。课程着重介绍能源材料的孔结构工程及研究进展、油气管材的腐蚀与防护研究进展、太阳能电池的基本理论与行业发展、光电与光化学能转化研究进展、能源材料模拟研究进展以及新能源材料的分子设计研究进展等。本课程着重引导学生深刻理解能源材料工程领域的发展动态，及时掌握能源材料工程领域的学科前沿，加深同学们能源材料工程专业知识的掌握和灵活应用，培养学生在能源材料工程领域领域的创新意识和思维能力。

### 二、课程大纲

#### (一) 课程目标

课程目标	培养目标、基本要求指标点
目标 1: 深刻掌握能源材料工程领域相关的基本原理及其关键材料。	2 (知识要求): 了解能源材料领域最新动态, 并能结合专业文献分析获得能源材料领域的发展趋势。
目标 2: 深刻领会能源材料工程领域的学科前沿及发展趋势。	2 (知识要求): 掌握能源材料工程领域的专业知识, 为应用相关知识解决能源材料领域复杂工程问题奠定基础。
目标 3: 学会归纳和借鉴能源材料工程领域的最新研究方法和成果。	3(能力要求): 能够根据研究方案, 选用或搭建实验装置, 采用科学的实验方法, 安全开展实验, 采集实验数据, 并对实验结果进行分析和解释, 最终通过信息综合得到合理有效的结论。
目标 4: 在掌握能源材料工程基础知识和研究方法的基础上, 能够对本学科前沿的关键问题进行科学探索。	3(能力要求): 掌握能源材料领域工程科技研究的先进方法, 具备解决能源材料领域复杂工程技术问题的能力。

## (二) 课程内容

<p><b>第 1 章 能源材料的孔结构工程及研究进展</b></p> <p>本章重点难点: 孔结构的构筑方法, 多孔能源材料在超级电容领域研究进展</p> <p><b>1.1 能源材料的孔结构工程概述</b></p> <p>孔结构的构筑方法, 微孔结构构筑, 介孔结构构筑, 复合孔结构构筑</p> <p><b>1.2 多孔能源材料的研究进展</b></p> <p>多孔能源材料在超级电容领域研究进展, 多孔能源材料在储能电池领域研究进展</p> <p><b>第 2 章 油气管材的腐蚀与防护研究进展</b></p> <p>本章重点难点: CO<sub>2</sub> 腐蚀机理, 钝化机理</p> <p><b>2.1 油气田腐蚀与防护简介</b></p> <p>腐蚀危害, 油气田腐蚀特点, 常见腐蚀类型</p> <p><b>2.2 油气田腐蚀机理研究进展</b></p> <p>CO<sub>2</sub> 腐蚀机理, H<sub>2</sub>S 腐蚀机理</p> <p><b>2.3 钝化: 基于金属的文明推动者</b></p> <p>钝化现象, 钝化机理, 点蚀机理</p> <p><b>第 3 章 太阳能电池的基本理论与行业发展</b></p> <p>本章重点难点: 缺陷态, 能带位置, 太阳能电池的优化设计</p>
----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

### 3.1 太阳能电池基本原理与测试方法

光生伏特效应，P-I-N 异质结，光生电荷的传输复合动力学过程，缺陷态，能带位置，带隙宽度；太阳能电池测试三要素：开路电压（ $V_{oc}$ ），短路电流（ $J_{sc}$ ）和填充因子（FF）

### 3.2 高性能太阳能电池的设计

太阳能电池的优化设计，影响电池  $V_{oc}$ ， $J_{sc}$  以及 FF 的关键因素

## 第 4 章 光电与光化学能转化研究进展

本章重点难点：染料敏化太阳能电池原理，提高光催化特性的手段，光电化学电池结构形式

### 4.1 新型光电池材料研究进展

染料敏化太阳能电池原理，有机太阳能电池材料特点、形貌、结构

### 4.2 光催化材料

光催化的基本原理，金属氧化物光催化材料特性，提高光催化特性的手段

### 4.3 光化学能转化材料

光学能转化，可见光催化分解水的研究进展，光电化学电池结构形式，光催化有机物质转化

## 第 5 章 能源材料模拟研究进展

本章重点难点：第一性原理计算，差分电荷密度，迁移势垒

### 5.1 理论模拟能源材料的基本原理

第一性原理计算，分子动力学，相场模型

### 5.2 锂/钠/钾离子电池的计算模拟

开路电压，比容量，差分电荷密度，态密度

### 5.3 锂硫电池性能的计算模拟

锂硫团簇，吸附能，表面能，迁移势垒

## 第 6 章 新能源材料的分子设计研究进展

本章重点难点：催化剂模型构建的原则，催化剂电子结构的分析，电子激发和吸收光谱的计算和分析，高通量筛选的流程

### 6.1 第一性原理在电催化材料中的应用和研究进展

催化剂模型构建的原则，表面合金、体相合金、取代掺杂、空位掺杂、表面模型的构建，显性和隐性水溶液模型的构建，酸溶液和碱溶液的构建，反应自由能的计算、电极电势影响的计算、pH 值影响的计算，催化剂电子结构的分析，催化剂反应势能面的构建、反应速率的计算、交换电流密度的计算、过电势的计算、Tafel 极化曲线的模拟

### 6.2 第一性原理在太阳能电池及光催化中的应用和研究进展

材料的电子结构分析（能带、态密度、LUMO、HOMO 等），电子激发和吸收光谱的计算和分析，电子传输性质的计算和分析

### 6.3 新能源材料的高通量筛选

高通量筛选的流程，催化剂在真空和反应条件下稳定性的计算和分析方法，表征催化剂催化活性的描述符的确定和计算方法

### 三、教学安排及要求

内容	课内学时	教学方式	课外学时	课外环节	课程目标
1.1	2	理论讲授	0		目标 1
1.2	2	理论讲授/案例研讨	0		目标 2
2.1	2	理论讲授	0		目标 2
2.2	2	理论讲授	0		目标 3
2.3	2	理论讲授	0	文献阅读	目标 1
3.1	2	理论讲授/案例研讨	0		目标 2
3.2	2	理论讲授/案例研讨	0	专题调研	目标 4
4.1	2	理论讲授	0		目标 4

4.2	2	理论讲授	0		目标 1
4.3	2	理论讲授	0		目标 2
5.1	2	理论讲授	0	专题调研	目标 2
5.2	2	理论讲授	0		目标 4
5.3	2	理论讲授	0		目标 1
6.1	2	理论讲授/案例研讨	0	专题调研	目标 2
6.2	2	理论讲授	0		目标 2
6.3	2	理论讲授	0		目标 3

#### 四、考核内容、方式及评分标准

##### （一）考核环节

考核环节		总成绩占比	支撑课程目标
课堂表现	1. 本课程要求学生以团队形式呈现课堂报告（专题报告）。 2. 成绩采用百分制，主要根据 PPT 准备、讲述表现、综合应用知识分析问题解决问题的能力、创新性等评分。	20%	目标 1-2
期末考核	1. 以课程论文的形成进行考核，成绩采用百分制，成绩总分 100 分。 2. 主要考核学生综合运用所学知识对其所研究材料的前沿进行归纳和分析的能力，将根据课程报告的前沿性、系统性、严谨性等综合评价。	80%	目标 1-4

##### （二）评分标准

考核环节	<60	60-75	75-90	90-100
------	-----	-------	-------	--------

课堂表现	上课出勤较低，上课不认真，很少与老师互动，课堂汇报准备不充分，讲述不清晰，缺乏应用知识回答课堂问题的能力。	上课出勤较高，基本能够认真听讲，与老师互动积极性一般，课堂汇报准备一般，讲述基本清晰，基本能够应用知识回答课堂提问。	能够高出勤上课，上课比较认真，与老师互动比较积极，课堂汇报准备比较充分、讲述清晰，能够较好的应用知识回答课堂提问。	能够满勤到课，上课认真，积极与老师互动，课堂汇报准备充分、讲述清晰，能够熟练应用知识回答课堂提问。
期末考核	课程报告没有反映能源材料工程的最新研究进展，报告内容的丰富度和全面性较差，分析问题不深入、不严谨。	课程报告能够基本反映能源材料工程的最新研究进展，报告内容的丰富度和全面性一般，分析问题的深入和严谨性一般。	课程报告能够较好的反映能源材料工程的最新研究进展，报告内容比较详实、全面，分析问题严谨，具有一定的深度。	课程报告能够很好的反映能源材料工程的最新研究进展，报告内容详实、全面，分析问题深入、严谨。

### （三）考核环节

考核环节	目标 1	目标 2	目标 3	目标 4
课堂表现	50%	50%	20%	20%
期末考核	50%	50%	80%	80%
总权重	20%	20%	30%	30%

## 五、教材与参考资料

### （一）教材

1. 为自编教材（未成册）。

### （二）主要参考资料：

1. 袁国辉. 电化学电容器. 化学工业出版社, 2006.
2. 寇杰, 梁法春, 陈婧. 中国石化出版社有限公司, 2010.
3. 杨勇. 固态电化学. 化学工业出版社, 2017

4. 熊绍珍, 朱美芳. 太阳能电池基础与应用. 科学出版社, 2009.
5. 苑世领, 张恒, 张冬菊. 分子模拟——理论与实验. 化学工业出版社, 2016.

## 六、其它说明

无。

大纲执笔人：邢伟

审核人（学位点负责人）：

分管院长签字：