使用Opentrons Flex 移液工作站进行水系锌溴液流电池高熵抗冻电解液的开发

作 者

胡议阐，博士生，深圳理工大学
张珑瀚，博士生，香港科技大学（广州）
姜璟，助理教授/副研究员，深圳理工大学
梁国进，助理教授/副研究员，深圳理工大学

摘 要

在液流电池体系中，锌溴液流电池兼具能量密度高、成本低、系统安全性强和结构可拓展等优势，已被广泛认可为面向电网调节与可再生能源消纳的潜力技术路径。然而，低温下电解液易结冰或黏度升高，严重阻碍离子传输并限制应用。高熵溶剂化结构电解液通过多组分协同作用可显著改善抗冻性能，然而其复杂配比空间庞大，传统经验驱动的实验筛选效率低下且缺乏规律提取。

为此，本研究引入 Opentrons Flex 全自动移液工作站，实现高通量、均一化的电解液配制，结合机器学习建立组分—性能关系并通过闭环优化高效筛选抗冻配方。自动化与AI算法的结合不仅提升了实验数据的可靠性，也显著加快了候选体系的优化速度。本研究旨在构建可扩展的“自动化实验—机器学习—性能反馈”平台，加速水系锌溴液流电池抗冻高熵电解液的定向设计，为其宽温域稳定应用提供支撑。

材料与方法

工作站配置：

Opentrons FLEX 自动化移液工作站
Opentrons Flex 1-Channel Pipette (1-50 uL)
Opentrons Flex 1-Channel Pipette (5-1000 uL)
Heater Shaker 热振荡模块

STEP 1： 通过大语言模型读取水系电池的抗冻电解液相关文献，获得抗冻相关的溶剂候选库。

STEP 2： 使用贝叶斯优化随机采点生成初步的候选配方，并使用 Opentrons FLEX 移液工作站进行高通量配液。预先打开Opentrons移液工作站。将准备好的溶液与96孔板放置到指定位置，使用Opentrons Flex 单通道移液器进配液操作。待配液完毕，使用Heater Shaker将孔板中配置好的电解液进行摇匀处理。

STEP 3： 在96孔板中配置好的电解液密封处理好之后，将其放置于-50°C低温箱中18小时，观察并记录电解液的抗冻情况。

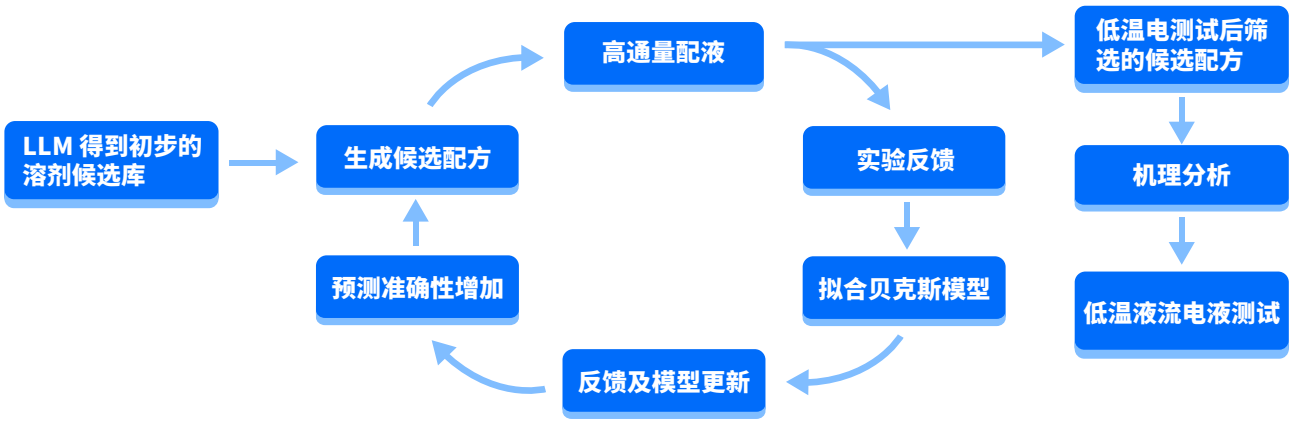
STEP 4： 将记录的数据去拟合贝叶斯模型，进行下一轮预测。然后重复2-3步，往复几次，更新贝叶斯模型以提高其预测电解液抗冻的准确性。

STEP 5： 在抗冻性能筛选的基础上筛选出的抗冻配方，进行低温环境下的纽扣电池库伦效率的筛选，最终得到4个库伦效率达到99%的抗冻配方。

STEP 6： 将上述配方进行低温条件下的液流电池测试验证。

STEP 7： 将上述4个抗冻配方进行材料表征和理论计算解析其抗冻且性能优异的潜在机理。

实验流程



实验结果

1. Opentrons 自动化移液工作站可以成功进行高通量配制电解液的操作，以节约大量的配液时间。图1为某轮冰冻18h之后的电解液的冰冻情况。

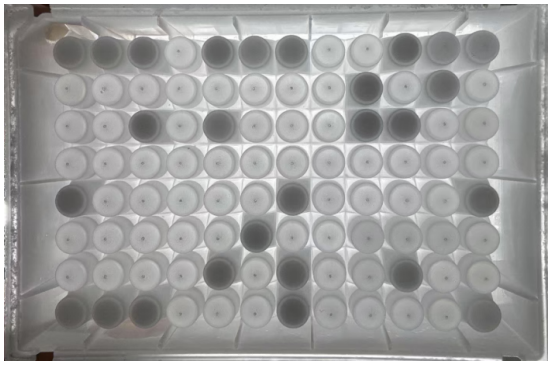
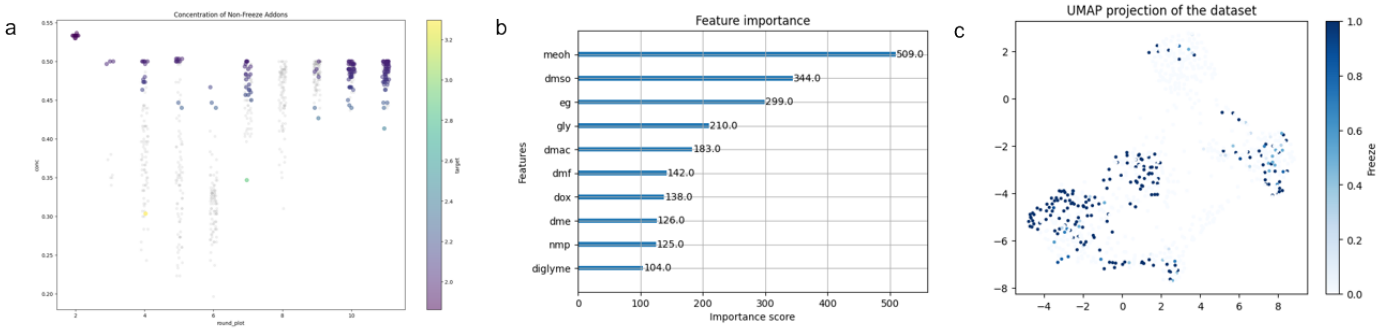


图1. 冰冻18h之后的电解液冰冻情况

2. 通过贝叶斯优化，分析候选溶剂库中配置的高熵电解液中成分的抗冻贡献以及库伦效率的提升。



结论

本研究将 Opentrons 自动化移液工作站与抗冻电解液开发的实验相结合，探索了其在低温水系锌溴液流电池的可行性。通过 Opentrons 系统的高通量配液，大幅减少了人工操作时间，未来，有望为电解液的高通量研究和标准化样品制备提供有力支持。

www.opentrons.com.cn

18098952246 Marketing.china@opentrons.com