



中国材料大会 2025

暨新材料科研仪器与设备展

7月5-8日, 2025
福建 厦门

A04-太阳能材料与器件
A04-Solar Energy Materials and
Devices

主办单位

中国材料研究学会

会议网址: <https://cmc2025.scimeeting.cn>



A04. 太阳能材料与器件

分会主席：张文华、邹德春、肖立新、谭占鳌、高鹏

A04-01

钙钛矿材料及器件的非溶液法制备

左壮, 郑皓峰, 马旭宇, 侯绍聪, 邹德春

北京大学化学与分子工程学院, 北京市海淀区成府路 202 号, 100871

怀柔国家实验室, 北京市怀柔区杨雁东一路 8 号, 101400

武汉大学电气与自动化学院, 武汉市武昌区八一路 299 号, 430072

有机无机杂化钙钛矿因其具有宽吸收、高载流子迁移率和缺陷耐受性等优点, 被广泛应用在光伏领域, 光电转换效率已超过 27%。目前主流的溶液法仍面临着钙钛矿薄膜结晶过程不易控制及批次重复性差等挑战性问题, 而气相沉积法对设备的要求较高, 并且不易调控多组分的前驱体比例, 这些因素极大地限制了钙钛矿太阳能电池在工业界的实际应用。本研究从全新的角度出发, 结合固相合成与靶材制备策略, 首次建立磁控溅射制备高性能钙钛矿薄膜的新方法, 实现对钙钛矿成分和含量广泛且稳定的调控, 阐释了磁控溅射制备钙钛矿薄膜的一般成膜规律与结晶机理。该方法旨在构建一套与现在主流溶液法形成互补的, 可与传统薄膜光电子器件的工业化制备技术无缝对接的钙钛矿光电材料及器件制备技术, 为深入的钙钛矿材料基础研究和太阳能电池的大规模工业生产奠定坚实的基础。

关键词: 钙钛矿; 固相合成; 磁控溅射; 无溶剂; 太阳能电池

参考文献:

1. Gao, B.; Zuo, Z.; Hu, J.; Jin, L.; Qi, Q.; Peng, Z.; Hou, S.; Fu, Y.; Zou, D. *Adv. Funct. Mater.* 2024, 2410428.
2. Gao, B.; Zuo, Z.; Hu, J.; Qi, Q.; Peng, Z.; Hou, S.; Fu, Y.; Zou, D. *ACS Materials Lett.* 2024, 5300-5306.
3. Peng, Z.; Zuo, Z.; Qi, Q.; Hou, S.; Fu, Y.; Zou, D. *ACS Appl. Energy Mater.* 2023, 7556-7562.
4. Gao, B.; Hu, J.; Zuo, Z.; Qi, Q.; Peng, Z.; Chen, H.; Yan, K.; Hou, S.; Zou, D. *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2022, 40062.
5. Gao, B.; Hu, J.; Tang, S.; Xiao, X.; Chen, H.; Zuo, Z.; Qi, Q.; Peng, Z.; Wen, J.; Zou, D. *Adv. Sci.* 2021, e2102081.

A04-02

通过富勒烯修饰提升钙钛矿太阳能电池性能

杨上峰*

中国科学技术大学

有机-无机杂化钙钛矿材料具有优异的光电性质, 以其作为光活性层的钙钛矿太阳能电池近年来得到了飞速的发展。富勒烯是封闭笼状分子, 具有独特的物理、化学性质, 在光、电、磁等领域展示了广阔的应用前景。基于富勒烯具有电子亲和力强, 电子迁移率高以及重组能小的特点, 富勒烯功能材料被广泛应用于有机-无机杂化钙钛矿太阳能电池中的电子传输层、阴极界面层或缺陷钝化剂。我们发展了一系列新型富勒烯衍生物并将其应用于钙钛矿太阳能电池中的电子传输层或钙钛矿光活性层的添加剂等。此外, 钙钛矿薄膜的结晶取向对于钙钛矿太阳能电池的性能起着至关重要的作用。我们发展了一系列策略对钙钛矿薄膜的结晶取向进行调控, 有效地提升了钙钛矿太阳能电池的效率和稳定性。我们在退火之前用丙胺盐酸盐 (PACl) 处理钙钛矿湿膜, 发现 PA⁺ 离子倾向于吸附在钙钛矿表面的 (001) 晶面上, 从而降低了剥离能量, 诱导 (001) 取向主导的钙钛矿膜生长, 并降低了相变温度。所制备的 (001) 取向主导的钙钛矿薄膜在垂直和水平方向的均匀性均得到了明显的改善, 从而降低晶格失配和缺陷密度。此外, 通过钙钛矿下界面结晶动力学调控, 获得的钙钛矿太阳能电池效率高达 26.1% (认证效率为 25.8%)。

A04-03

原子尺度视角下的钙钛矿太阳能电池钝化策略

王啸宇, 张立军*

吉林大学 材料科学与工程学院

自第一个以杂化钙钛矿为敏化剂的太阳能电池被制备出以来，钙钛矿太阳能电池经历了近二十年的迅速发展，已经从最开始的 3.8% 的功率转化效率提升至接近 27%。如今钙钛矿已成为兼具高效率与低成本特征的具备优秀光伏产业化潜力的第三代光伏半导体材料。钙钛矿太阳能电池中的点缺陷作为载流子捕获中心，诱导的非辐射复合过程是降低器件效率的重要因素。

通过引入合理的钝化剂在原子尺度与缺陷发生相互作用，如填充空位缺陷或与间隙缺陷成键，抑制局域态、抹除缺陷能级是最直接的点缺陷钝化手段。当点缺陷处于钙钛矿晶格内部时，通常采用阳离子/阴离子添加剂的方式实现钝化作用，如通过添加额外的碱金属离子钝化卤素间隙以及卤素替位等缺陷，或者通过阴离子添加剂钝化卤素空位以及铅间隙等缺陷。当点缺陷处于晶界或器件的不同功能层界面时，可以引入额外的分子钝化剂通过路易斯酸碱中和理论实现缺陷钝化。为成功实现此过程，可在原子尺度对钝化剂官能团类型进行调控或引入复合钝化基团，同步实现钝化能力的增强以及缺陷欠配位化学环境的补全。

除此之外，对钙钛矿太阳能电池中的不利物理/化学过程的抑制与调控也被划分在钝化工程的范畴内，如：1) 增加表面与界面的稳定性，抑制新缺陷的形成。通过引入含有氨基的钝化剂分子与钙钛矿表面卤素形成额外的氢键是常用的手段之一，通过设计多氨基分子实现多重氢键的形成会加强这一效应。2) 优化能级对齐，提升载流子提取能力，并阻挡少数载流子复合。通过调整钝化分子的官能团类型可以在原子尺度下调整分子极性，进一步影响表界面的功函数实现能级调控。通过形成额外的 2D 钙钛矿钝化层也可以屏蔽界面处缺陷导致的不利的能级对齐，实现界面电输运均匀性的提升，有利于优化大面积器件效率。3) 通过钝化剂本身性质阻挡外部氧气与水的侵蚀。如长链有机分子层或大体积阳离子形成的 2D 钙钛矿层由于自身的疏水性可以实现钙钛矿电池湿度稳定性的大幅提升。

A04-04

钙钛矿太阳能电池稳定性研究与产业化

杨旭东*

上海交通大学，材料科学与工程学院；光因科技有限公司

围绕钙钛矿太阳能电池稳定性差的问题，我们建立了大面积钙钛矿离子耦合技术、电荷传输层离子电荷协同输运技术，通过调控离子间或离子分子间相互作用来减少结晶过程中缺陷密度，通过降低缺陷扩散浓度梯度和强化界面离子键合来抑制离子型缺陷界面扩散过程，制备出低缺陷密度钙钛矿薄膜，并有效减少了缺陷杂质的扩散，大幅提高了电池组件的效率和稳定性[1-3]。

产业化方面，2023-2024 年度，光因科技创造 1200 平方厘米组件稳态效率世界纪录，成果被《太阳能电池效率纪录榜单-第 64/65/66 版》(Solar Cell Efficiency Tables) 收录。这是光因科技继登顶美国国家可再生能源实验室 (NREL) 发布的《太阳电池最高研究效率图》之后，再次被国际权威光伏电池最高效率榜单收录。

[1] H. Chen, F. Ye, W. Tang, J. He, M. Yin, Y. Wang, F. Xie, E. Bi, X. Yang*, M. Graetzel, L. Han*, Nature, 2017, 550, 92.

[2] Y. Wang, T. Wu, J. Barbaud, W. Kong, D. Cui, H. Chen, X. Yang* and L. Han*, Science, 2019, 365, 687.

[3] Wang, T.; Zhang, Y.; Kong, W.; Qiao, L.; Peng, B.; Shen, Z.; Han, Q.; Chen, H.; Yuan, Z.; Zheng, R.; Yang, X*. Science, 2022, 377, 1227.

A04-05

钙钛矿薄膜的维度调控和拓展应用

梁超*

西安交通大学

“新材料强国 2035 战略”明确指出：新材料产业应向绿色化、低碳化、精细化、节约化方向发展，近年有机无机杂化铅卤钙钛矿作为低碳前沿新材料之一被广泛关注，其太阳能电池光电转换效率已经达到了 27.0%。梁超老师针对实际应用中“三维 (3D) 钙钛矿薄膜和器件稳定性差”这一关键难题，提出增

强前驱体分子配位、原位封装和基底锚定新思路，在高稳定性 2D 钙钛矿可控生长、3D 钙钛矿表界面原位封装、高效高稳定性集成器件构筑等方面开展了系统的研究，并取得了一些创新成果和突破。

A04-06

钙钛矿半导体成材机制和调控

赵奎*

陕西师范大学

基于金属卤化物钙钛矿的柔性光伏展现了出色的光电性能和低成本溶液大面积制备潜力，有望成为新一代轻质光源。在溶液加工过程中，如何实现前驱体胶体可控组装是实现柔性薄膜和高效器件的关键。我们基于自主搭建原位分析系统，开展了“钙钛矿成材机制和调控”研究：（1）建立了结晶机制分析新方法和技术，阐明了胶体组装动力学过程[1]；（2）提出了基于“中间相”的胶体组装调控新思路，实现了半导体成核和生长动力学的可控[2]；（3）发展了小面积到工业化大面积印刷制备胶体溶液的方法，实现轻质柔性大面积柔性光伏和应用[3]。

[1] Tinghuan Yang, Kui Zhao,* “One-stone-for-two-birds strategy to attain beyond 25% perovskite solar cells”, Nat. Commun., 2023, 14, 839.

[2] Yajie Wang, Kui Zhao,* et al., “Perovskite Photovoltaics: Achieving Efficiency over 45% under Low-Light and Low-Temperature Dual Extreme Conditions”, Adv. Mater. 2024, 2312014.

[3] Pengchi Liu, Kui Zhao,* et al., “Ambient scalable fabrication of high-performance flexible perovskite solar cells”, Energy Environ. Sci. 2024, D4EE02925A.

A04-07

A surface science approach to research on metal halide perovskite materials

威亚冰

上海交通大学

In energy devices, surfaces and interfaces often play a pivotal role. My group has been utilizing surface science techniques to obtain in-depth understanding about surfaces and interfaces in these energy devices. In this talk, I will focus on surface science studies on metal halide perovskite materials and related solar cell devices.

A04-08

真空蒸镀高效率稳定钙钛矿太阳能电池

易陈谊

清华大学

钙钛矿太阳能电池作为新一代光伏发电技术的代表，具有光电转换效率高、成本低等显著优势，在可再生能源领域备受瞩目。然而，其大规模应用面临着诸多挑战，如高效率大面积器件制备困难以及稳定性不足等问题，严重制约了该技术的产业化进程。为此，我们运用可大规模生产的顺序真空蒸镀法成功制备出高效率大面积钙钛矿电池，解决了传统制备工艺难以实现大规模生产的难题，为钙钛矿电池的工业化生产奠定了坚实基础。通过精确控制蒸镀过程中的各项参数，能够确保钙钛矿薄膜的均匀性和高质量，从而提高电池的性能和稳定性。结合深入的理论分析，研究团队设计开发了一系列新材料和新工艺，用于构筑界面层。这些界面层在促进电荷输运方面发挥了关键作用，能够有效减少电荷在传输过程中的复合损失，提高电荷收集效率。同时，新界面层还能够显著抑制离子扩散，防止因离子迁移导致材料性能衰减，进而大幅提升了电池的稳定性。经过优化后的电池，在稳定性和效率方面均取得了显著的提升，为钙钛矿电池的长寿命运行提供了有力保障。在上述研究基础上，进一步研发并成功实现了高效率柔性电池和半透明电池。

A04-09

钙钛矿太阳能电池吸光层、传输层及界面协同优化的研究

臧志刚*

重庆大学光电技术及系统教育部重点实验室

钙钛矿太阳能电池的光电转化效率和稳定性在过去的十年得到了长足的发展。然而，钙钛矿吸光层界面处的能级匹配不理想、界面缺陷或功能层提取载流子的能力有限均会导致界面处载流子的堆积及严重的非辐射复合；此外，钙钛矿吸光层内部的杂质、晶界和离子迁移会造成空位缺陷，这导致载流子在吸光层内电荷损失严重。鉴于此，本报告围绕载流子在钙钛矿吸光层、界面和功能层之间的传输开展了深入的研究。这些策略揭示了分子结构、材料特性与器件性能之间的构效关系。制备的器件效率达到 26.10%，第三方认证效率为 25.56%。器件在最大功率点和 85℃和 85%相对湿度下分别测试 2500 和 1500 小时后，还保持着初始效率的 95%和 90%。同时，还制备了 300 mm×300 mm 的器件，效率达 20.58%。

A04-10

分子化学在钙钛矿太阳能电池中的应用研究

李雄

海南大学，海南省海口市人民大道 58 号，570228

高质量薄膜加工可控性差、高稳定性钙钛矿设计理念缺乏以及器件效率进一步提升空间有限等核心难题，构成了“制备-稳定-效率”的黄金三角困境，严重制约了杂化钙钛矿太阳能电池产业化进程。李雄教授团队聚焦于这一关键挑战，以“溶液化学-薄膜制备-界面调控-高性能器件”为研究主线，取得了系列创新成果：（1）建立了功能化富勒烯与自由基氧化还原电对的分子协同调控新体系，阐明了溶液湿法成膜过程中微纳形貌与光电性能的调控机制，成功实现了高质量钙钛矿吸光层及载流子传输薄膜的可控制备；（2）发展了双功能载流子穿梭分子和半导体纳米复合界面的新策略，有效构筑了器件内载流子纵向传输的快速通道，显著提升了钙钛矿光伏器件的光电转换效率；（3）提出了分子原位交联网络稳定湿法制备半导体薄膜的新思路，有效抑制了钙钛矿吸光层及载流子传输层中的离子迁移和缺陷动态演化，成功突破了高效率钙钛矿光伏器件的长期稳定性瓶颈。本报告将系统阐述这些创新策略如何协同作用，从溶液化学源头调控出发，贯穿薄膜制备与界面工程，最终实现钙钛矿太阳能电池在制备可控性、长期稳定性与光电转换效率三个核心要素上的协同优化，为推进其实用化提供关键科学支撑

关键词：钙钛矿；光电器件；分子设计；表界面调控；稳定性

A04-11

掠入射 X 射线散射技术在钙钛矿光伏中的应用

宋霖*

西北工业大学 陕西省西安市碑林区友谊西路 127 号

钙钛矿薄膜的内部微观结构与器件性能有着密不可分的联系，因此定量地表征活性层内部结构有着重要的科学意义。本工作运用掠入射小角 X 射线散射技术（GISAXS）表征分析不同溶剂与钙钛矿前驱体之间的相互作用，并研究了其对钙钛矿晶体生长的影响；利用添加剂改性钙钛矿薄膜，研究此过程中二维钙钛矿生长过程中的动力学行为，构建物理模型，分析添加剂对器件性能的提升作用；构筑 FAPbI₃ 量子点/ MAPbI₃ 平面异质结，研究钙钛矿的结晶行为，为探索钙钛矿本征光物理性质提供了实验基础。

A04-12

钙钛矿量子点光伏材料与器件

袁建宇*

苏州大学

“发现和合成量子点”被授予 2023 年诺贝尔化学奖。半导体量子点，作为一种新兴的光电转换功能材料，具有高载流子迁移率、量子限域效应以及与实际高通量生产高度兼容的加工工艺的独特优势，为发展低成本高性能光电应用提供了新的实验路径。量子点的本征结构、固相微观结构、材料有序度对其宏观光电性能有着巨大影响，但是这些关键科学问题还未被深入研究。2017 年以来，我们课题组在新型铅卤钙钛矿量子点材料的设计合成、表面化学环境调控以及光电器件应用开发方面开展了系统的研究，设计了化学组分和表面配体灵活可调的铅卤量子点材料，明确其本征化学和表面微观结构特性；通过发展可控液相

和固相的调控策略, 实现三维高度有序的量子点光电薄膜材料的可控制备, 取得~20%的世界领先的能量转换效率, 同时初步探索了基于高通量加工的大面积量子点光电器件制备工艺; 进一步我们期望研究从量子点到体相薄膜的转变, 制备高效高稳定电池提供新的实验路径, 为推动新型纳米光电材料及应用做出了有益的探索。

A04-13

异质结诱发内建电场提升太阳电池/析氢电催化性能策略

王银号, 党长伟, 高赞, 杨天翔, 孙梦龙, 乔丹, 许晓蓉, 杨光平, 云斯宁*

西安建筑科技大学, 功能材料研究所, 710055, 西安, 陕西

本报告围绕异质结界面工程在提升电催化性能中的应用, 系统介绍了通过设计多元异质结构催化剂优化 HER(析氢反应)和 IRR(碘还原反应)的策略。重点阐述了莫特-肖特基异质结(如 NiSe₂/MoSe₂@N-BCCs)、双莫特-肖特基异质结(如 Co₆Mo₆C₂/Co@NC)及肖特基耦合 p-n 结(如 Fe₃C-NG@NiFe)的构建方法, 通过内建电场(BIEF)调控电子结构、加速电荷转移, 显著提升催化活性。异质结构催化剂(如 Co-WS₂/P-WO_{2.9})通过界面修饰提升 IRR/HER 活性, 使太阳能电池效率达 7.83%; 莫特-肖特基结(如 NiSe₂/MoSe₂@N-BCCs)结合相分离策略, 增强电荷分离效率; 双莫特-肖特基结(Co₆Mo₆C₂/Co@NC)通过双内建电场加速电子转移。相关催化剂在太阳能电池(PCE=8.87%)和电解水制氢(HER 过电位低至 96 mV)中展现优异性能, 为新能源转换与存储提供了新思路。研究为低成本、高效非贵金属催化剂设计提供新思路, 推动太阳能电池与绿氢制备应用。

关键词: 太阳电池; 电解水; 异质结界面工程; 电催化析氢; 碘化物还原; 内建电场; 莫特-肖特基结
参考文献:

1. Wang, Y.; Yun, S.; Shi, J.; Zhang, Y.; Dang, J.; Dang, C.; Liu, Z.; Deng, Y.; Yang, T., *Journal of Colloid and Interface Science* 2022, 625, 800-816.
2. Dang, C.; Yun, S.; Zhang, Y.; Dang, J.; Wang, Y.; Liu, Z.; Deng, Y.; Yang, G.; Yang, J., *Materials Today Nano* 2022, 20, 100242.
3. Yun, S.; Gao, Z.; Yang, T.; Sun, M.; Yang, G.; Wang, K.; Wang, Z.; Yuan, S.; Zhang, M., *Advanced Functional Materials* 2024, 34, 2314226.
4. Sun, M.; Yun, S.; Dang, J.; Zhang, Y.; Liu, Z.; Qiao, D., *Chemical Engineering Journal* 2023, 458, 141301.
5. Qiao, D.; Yun, S.; Sun, M.; Dang, J.; Zhang, Y.; Yuan, S.; Yang, G.; Yang, T.; Gao, Z.; Wang, Z., *Applied Catalysis B: Environmental* 2023, 334, 122830.
6. Yang, G.; Yang, T.; Wang, Z.; Wang, K.; Zhang, M.; Lund, P. D.; Yun, S., *Advanced Powder Materials* 2024, 3 (5), 100224.
7. Yang, G.; Yun, S.; Yang, T.; Dang, J.; Zhang, Y.; Wang, Z., *Journal of Materials Chemistry A* 2024, 12 (3), 1804-1815.
8. Yang, G.; Yun, S.; Pang, Q.; Wang, R.; Yang, T.; Dang, J.; Xu, X.; Wang, Z.; Yang, H.; Feng, R.; Guo, W., *Advanced Functional Materials* 2025, 2510467.
9. Xu, X.; Yun, S.; Yang, G.; Yang, T.; Pang, Q.; Wang, Z.; Yang, H.; Feng, R.; Guo, W.; Luo, C.; Chen, H.; Zhang, T., *Advanced Functional Materials* 2025, , 2504278.

A04-14

基于维度调控的高效钙钛矿太阳能电池

于华*

大湾区大学(筹)

金属卤化物半导体纳米材料由于其优异的光电化学性能逐渐引起大家的青睐。在本研究中, 主要探索了基于维度工程的功能性金属卤化物纳米结构的化学合成策略, 以及对这些结构的表征和它们新特性的探索。同时结合界面工程, 组分工程, 晶面工程等改性技术对功能性纳米材料的性能进行优化, 并对制备的相对应的钙钛矿光伏器件的性能以及潜在的大规模应用的趋势进行了系统的分析与评估。总之, 基于维度工程的功能性金属卤化物钙钛矿纳米材料的优异的光电化学性能将使它们在绿色光电技术中发挥重要作用, 并

为该研究领域的应用拓展带来许多激动人心的研究机会。

A04-15

卤化钙钛矿的反应结晶

肖爽*

深圳技术大学

明晰卤化钙钛矿成核与生长的物理化学机制，发展有效策略控制结晶的动力学、热力学过程，实现晶体的有序、精准生长，用以制备高性能钙钛矿基光电器件，是卤化钙钛矿材料领域的重要共性需求。围绕卤化钙钛矿材料的精准制备，我们提出了优化钙钛矿晶面生长取向性的策略：利用丙胺在碘化铅甲脒(001)晶面较易吸附的特点，运用氯化丙胺诱导了钙钛矿的(001)晶面取向性生长，有效地降低材料的张应力，抑制缺陷的形成，并提升材料的相稳定性。在另一个工作中，我们针对宽带隙卤化钙钛矿材料中缺陷种类多，开发了利用乙二醇和4-三氟苯乙胺两种大尺寸胺协同钝化混合离子卤化钙钛矿材料缺陷的方法。这种方法可以同时钝化宽带隙钙钛矿材料中的多类离子缺陷，极大地降低了材料的非辐射复合速率。通过多种手段结合，我们实现了低缺陷的高品质钙钛矿材料生长，并应用于太阳能电池等光电转化器件中。

A04-16

气相喷射沉积(VID)技术研究及其产业化应用前景介绍

刘向鑫*

浙江天牧光能科技有限公司

气相输运沉积(Vapor Transport Deposition)技术是美国碲化镉薄膜太阳能电池龙头企业 First Solar 开发并发展成熟的一种快速、大面积、长时间连续生产的半导体薄膜沉积生产技术，是目前国际上唯一被验证可实现 20GW 级别产能的吸收层沉积技术。天牧光能技术团队经过 9 年的持续攻关，已突破美国企业的长期技术垄断，开出了基于同样物理原理的气相喷射沉积(Vapor Injection Deposition)技术，可实现真空腔外投料、可长时间连续生产但生产节拍更快、能耗更低。VID 技术不仅将薄膜沉积生产的功耗降低到了 VTD 设备的 1/10，且实现了动态镀膜生产方式，预计镀膜生产速度可达到 VTD 的 2 倍。

VID 设备适用于任何真空蒸发温度 $<1000^{\circ}\text{C}$ 的粉料镀膜，除了可用于 CdTe、Perovskite、CZTSSe、 Sb_2Se_3 等薄膜太阳能电池吸收层的制备和生产，也可用于全固态储能电池的硫化物电解质薄膜 LPSC 和 LPS 的大面积生产。

此外，本报告也将介绍一种磁控溅射改进技术，在不提高射频功率的情况下可将氧化物薄膜的溅射沉积速率提高 2-4 倍，对靶材的损耗速率实现精细调节、维持 PVD 镀膜生产速率的稳定性；此技术用于 AZO、 Cd_2SnO_4 等多种透明导电金属氧化物薄膜的制备，将电导率提高了一个数量级，最低电阻率达到了 $1.27 \times 10^{-4} \text{W}\cdot\text{cm}$ 。

A04-17

柔性钙钛矿太阳能电池印刷加工

陈义旺*

南昌大学高分子及能源化学研究院，南昌市学府大道 999 号，南昌 330031

江西师范大学氟硅能源材料与化学教育部重点实验室，南昌市紫阳大道 99 号，南昌 330022

活性层晶粒尺寸与晶界缺陷和离子迁移以及缓冲层界面致密性是提高钙钛矿电池的稳定性关键，旋涂到不同尺度下印刷的工艺转化是钙钛矿太阳能电池大面积化必由之路。系统解决柔性透明电极制备，界面层稳定性和缺陷修复以及阻隔作用，钙钛矿活性层离子迁移抑制和深能级缺陷修复，钙钛矿太阳能电池柔性制造和自修复等等，最终实现高效稳定大面积钙钛矿太阳能电池印刷制备。

提出柔性透明碳基材料纳米材料剪切剥离分散到 PEDOT 电极湿法加工印刷，通过一系列 PEDOT 构象调控和纳米复合，实现方块电阻降低至 $13 \Omega/\text{sq}$ 和透明性大于 85% 的柔性透明电极卷对卷制造。通过贻贝仿生交联氧化物纳米晶通过克服了无机界面层固有的脆性和界面反应，原子层层沉积方法制备高致密无机界面层，提高钙钛矿太阳能电池的稳定性。针对钙钛矿太阳能电池离子迁移和水氧侵蚀导致稳定性问题，提出“穿针引线”策略全面提高钙钛矿太阳能电池稳定性和耐弯折性。提出了碳纳米管和含氟半导体以及荧光上转化分子填补钙钛矿太阳能电池晶界缺陷，抑制了离子迁移和实现晶界链接，大幅提高器件稳定性和拓宽吸

收响应。有效采用 2D/3D 结构可以调控结晶动力学和载流子传输动力学, 受限结晶取向策略从而获得高质量钙钛矿薄膜。系统采用集成技术, 采用仿脊椎结构和钢筋支架释放应力以及解决钙钛矿活性层断裂自修复问题, 全面实现钙钛矿太阳能电池柔性制造。提出了自密性高分子和量子阱取向的表面二维化封装钙钛矿界面层, 阻止了水氧对钙钛矿层的侵蚀, 引入 EVA 胶合界面层, 有效地改善钛矿太阳能电池的长期稳定性、阻水性以及弯曲耐久性。提出两步法印刷制孔新策略, 有效调控结晶动力学, 控制碘化铅充分转化和稳定性, 构建了自主生长取向支架和弹性体修复钙钛矿晶界缺陷, 赋予活性层耐弯折性问题。通过改进印刷装备, 精准控制印刷模头, 增强库埃特流, 调控毛细流和马拉高尼流, 调节界面张力、墨水流变学和印刷过程中钙钛矿胶粒行为以及晶粒生长动力学, 从而实现印刷制备高效率刚性和柔性大面积太阳能电池模组, 进一步采用缺陷原位修复和超快均质退火工艺策略, 解决大面积印刷工艺中均一性和重现性问题。

关键词: 钙钛矿太阳能电池; 缺陷工程; 透明电极; 印刷加工

A04-18

柔性印刷电子材料与器件

赖文勇

柔性电子全国重点实验室, 南京邮电大学, 南京, 210023

关键词: 光电功能高分子, 有机光电子学, 柔性电子学, 印刷电子学

柔性电子已成为当前材料、化学、电子等多学科的关注焦点, 柔性显示、可穿戴设备、电子皮肤等柔性电子产品将会给人类的生产生活带来深刻影响。经过多年的发展, 目前基于有机小分子的发光技术日趋成熟并推向市场, 在手机、电视机等得到广泛应用; 基于光电功能高分子的柔性电子技术正处于发展的关键阶段。新材料的开发及新技术的发展使得这一领域具有广阔的发展前景。我们的工作重点聚焦新型高性能可印刷有机高分子光电材料、界面材料和电极材料等的设计制备与功能调控, 致力于突破高性能大面积柔性印刷电子器件可控构筑的关键瓶颈问题。

A04-19

高效稳定柔性全无机钙钛矿太阳能电池研究

姚建曦*

华北电力大学

柔性钙钛矿太阳能电池由于其自身的可弯曲特性, 使得其应用在可穿戴设备, 便携式电源, 建筑一体化等多种场合, 近年来备受瞩目。相比于高效的有机无机杂化体系钙钛矿, 全无机钙钛矿 CsPbI_3 不含有易挥发的有机阳离子, 因此, 表现出优异的热稳定性。但是, 因为全无机钙钛矿在低温条件下制备的结晶性较差, 这在一定程度上限制了其机械性能和光电转换效率, 导致全无机 f-PSCs 的性能远低于全无机刚性 PSCs 的性能。本团队围绕提高全无机钙钛矿材料的结晶性、光电性能和稳定性等方面开展研究, 通过构建柔性全无机 0D (零维) $\text{Cs}_4\text{Pb}(\text{IBr})_6/3\text{D}$ (三维) $\text{CsPbI}_{3-x}\text{Br}_x$ 混维结构以提高钙钛矿薄膜的机械性能, 0D $\text{Cs}_4\text{Pb}(\text{IBr})_6$ 的引入有效地增强了 $\text{CsPbI}_{3-x}\text{Br}_x$ 薄膜的结晶性, 钝化了晶界缺陷。在此基础上, 提出了选择性化学刻蚀以及预弯折钝化策略, 并利用 CaF_2 纳米晶诱导 $\text{CsPbI}_{2.81}\text{Br}_{0.19}$ 异质成核, 有效地增强钙钛矿薄膜表面的结晶性。高效钝化策略的使用, 显著抑制了表面缺陷的形成并降低了裂纹在弯曲过程中的扩展。最终全无机 f-PSC 最高实现了 15.03% 的光电转换效率, 在曲率半径为 5 mm, 经过 70000 次弯曲循环后, 预弯折钝化的 f-PSC 仍能保持其初始 PCE 的 93%, 且呈现了优良的环境稳定性。

A04-20

柔性钙钛矿晶体转换调控

谈利承、陈义旺*

南昌大学

基于半导体复合杂化材料的机械弯折和界面修复是柔性纳米器件领域的重要研究内容之一。针对钙钛矿太阳能电池中界面失配和缺陷修复以及机械稳定性的关键科学问题, 申请人开展了低温两步法制备钙钛矿过程中晶体靶向转化、缺陷原位修复和机械增韧的相关研究, 实现了柔性太阳能电池稳定性提升和机械应用。首次在碘化铅 (PbI_2) 中原位构筑自聚合支架形成交联网络, 填充晶界钝化缺陷和释放应力、抑制离子迁移和阻隔水氧, 有效解决两步法制备钙钛矿中组分残留、缺陷和应力自修复难题[1]。研究在埋底界面引

入多孔金属有机框架沸石咪唑酸盐骨架 (ZIF-8) 包覆少量碘化甲脒 (FAI) 的多功能胶囊, 促进固/液界面充分反应[2]。制备有序阵列结构的多孔碘化铅层, 促进有机胺盐在 PbI₂ 阵列中全方位扩散反应, 实现大面积钙钛矿充分转化[3, 4]。自主设计可自发扩散且有序分布的离子液体 1-乙基-3-甲基咪唑四氟硼酸盐 (EMIMBF₄) 与 PbI₂ 结合形成定向模板实现钙钛矿有序结晶[5]。开发了一种原位修复残留 PbI₂ 的策略, 通过引入胺可释放介质 (吡啶-2-羧甲铵, MAPyA) 在高温退火过程中分解为甲胺 (MA) 气体和吡啶-2-羧基 (PyA), 从而优化钙钛矿的晶体结构和薄膜质量[6]。首次提出甲酸作为两步法制备锡基钙钛矿中阳离子的溶剂, 并在碘化亚锡 (SnI₂) 中引入二硫苏糖醇 (DTT) 来精细调节反应扩散/结晶动力学, 实现 DTT 处理的锡基钙钛矿太阳能电池获得了两步法工艺中最高效率的器件效率 12.68% (0.04 cm²) 和 11.30% (1 cm²) [7]。另外, 通过改进印刷装备, 调节 PbI₂ 和阳离子墨水稳定性以及印刷过程中钙钛矿晶粒生长动力学[8], 从而实现两步法刮涂印刷制备高效率刚性和柔性大面积太阳能电池模组。

参考文献

- [1] Licheng Tan*, Yiwang Chen*, et al., *Adv. Mater.* 2020, 32(26), 20200061.
 - [2] Licheng Tan*, Yiwang Chen*, et al., *Adv. Mater.* 2023, 35(33), 2301852, Frontispiece.
 - [3] Licheng Tan*, Yiwang Chen*, et al., *Energy Environ. Sci.* 2023, 16(2), 629-640, ESI Highly Cited Paper.
 - [4] Licheng Tan*, Yiwang Chen*, et al., *Energy Environ. Sci.* 2024, 17(15), 5500-5512.
 - [5] Licheng Tan*, Yiwang Chen*, et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* 2024, 136(1), e202315233, VIP Paper.
 - [6] Licheng Tan#, Yiwang Chen*, et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* 2024, 63(14), e202319100.
 - [7] Licheng Tan*, Yiwang Chen*, et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* 2024, DOI: 10.1002/anie.202422217, Hot Paper.
- Licheng Tan*, Yiwang Chen*, et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* 2024, 63(51), e202411708, VIP Paper.

A04-21

印刷制备柔性可穿戴光伏器件

胡笑添*

南昌大学化学化工学院/高分子及能源化学研究院, 江西省南昌市红谷滩新区学府大道 999 号, 330031

薄膜太阳能电池在柔性可穿戴电子设备和节能建筑一体化方面具有独特的优势和巨大的应用潜力, 然而, 其本身的相不稳定性、结晶性等问题以及柔性透明电极材料的选择限制了柔性有机太阳能电池的进一步发展和商业化应用拓展。我们通过以柔性印刷工艺为支撑, 以柔性仿生设计为创新点, 围绕柔性太阳能电池集成设计与大面积印刷工艺开展研究: 通过墨水协同分散和剪切冲量调控的方法, 实现了多种光电功能材料的形貌一致性印刷; 开发了基于新原理、新概念, 具有自主知识产权的高精度光电器件印刷系统, 并实现大面积柔性透明电极和光伏模组的印刷制备。

A04-22

钙钛矿太阳能电池效率提升及柔性化制备策略

冯江山

陕西师范大学

能源危机已成为我国面临的一项重要安全挑战。5G 技术的突破正在加速以万物互联为特征的物联网技术发展。物联网不仅需要大量能源支持, 还迫切需要新型轻便、柔性、便携且高效弱光响应的太阳能电池。金属卤化物基钙钛矿半导体材料因其卓越的光电性能和快速提升的太阳电池效率, 已被成功应用于太阳电池、LED、光电催化、激光器、光电探测器及存储器等新能源材料与器件领域。目前, 其实验室钙钛矿太阳电池最高认证效率已达到 27.3%。这一成就主要得益于该材料独特的光学与电学特性, 包括理想的光学带隙、较大的消光系数、高载流子迁移率、长载流子扩散距离以及极低的缺陷态密度等。凭借其较高的光电转换效率、简便的制备工艺和较低的生产成本, 钙钛矿太阳电池已成为太阳电池研究领域中最受关注的方向之一。本课题组在国内率先开展了钙钛矿材料的研究与制备工作, 涵盖钙钛矿单晶材料、探测器、

太阳电池及柔性太阳电池等多个方向。本报告从刚/柔性钙钛矿太阳电池各功能层的制备研究出发，重点探讨器件制备方法、稳定性提升策略及其产业化应用前景，并从多角度分析当前钙钛矿太阳电池研究中的热点问题。

A04-23

光伏组件 PID 效应的研究

杨学良*

河北大学

近年来，随着光伏装机量逐步扩大，大功率组件不断地在市场涌现。光伏组件的 PID 效应问题逐渐凸显。PID (Potential-induced degradation) 效应，即当太阳电池片与接地边框之间存在一个高的电势差时，会产生从电池片流向边框的漏电流。通常电势差越大，产生的漏电流也会越大，组件的功率损失越大。由于在光伏系统中，组件通常串联在一起，随着大功率组件的应用，系统电压会超过 1000V，甚至可以达到 1500V。因此，研究 PID 效应的根源，以及如何降低 PID 效应是非常有必要的。本文旨在综述当前各类电池的 PID 效应的研究情况，澄清 PID 效应的根本由来，为高校及企业研究人员对如何避免 PID 效应提供借鉴。

A04-24

高效稳定碳基可印刷介观钙钛矿太阳能电池

张坚*、张杨、王栋杰、陈怡文

桂林电子科技大学

基于丝网印刷介孔金属氧化物与多孔碳电极的碳基可印刷介观钙钛矿太阳能电池 (p-MPSCs) 具有成本低、稳定性高和易于大面积制造等优点^[1, 2]。然而，根据太阳能电池“黄金三角”原则，p-MPSCs 在能量转换效率 (PCE) 方面仍需要进一步提高^[3]。在此，本团队提出了一种基于 NEA 分子的室温后处理方法，通过在钙钛矿/碳电极界面原位制备脒基 2D/3D 异质结以提升 p-MPSCs 的 PCE。研究表明，脒基 2D/3D 异质结不仅优化了钙钛矿/碳电极界面的能级排列，有效抑制了界面非辐射复合，同时还会在钙钛矿/碳电极界面形成电子阻挡层，增强碳电极对空穴的选择性收集。此外，NEA 和 FA⁺ 在室温下自发反应生成的脒基阳离子还可以抑制钙钛矿薄膜中空隙的形成，从而钝化了钙钛矿薄膜表面的电荷缺陷。最终，经 NEA 室温后处理的 p-MPSCs 实现了 21.1% 的 PCE，是目前 p-MPSCs 中报道的最高 PCE 之一。此外，经 NEA 室温后处理的未封装 p-MPSCs 在空气中储存 1200 h 后 PCE 未衰减，在 60±10% RH 和 50±5°C 环境中连续进行最大功率点跟踪 350 h 后，依然保持初始 PCE 的 90% 以上。在此工作基础上，本团队通过进一步优化实现了 PCE>23 % 且具有高稳定性的 p-MPSCs。

参考文献：

- [1] J. Liu, X. Chen, K. Chen, W. Tian, Y. Sheng, B. She, Y. Jiang, D. Zhang, Y. Liu, J. Qi, K. Chen, Y. Ma, Z. Qiu, C. Wang, Y. Yin, S. Zhao, J. Leng, S. Jin, W. Zhao, Y. Qin, Y. Su, X. Li, X. Li, Y. Zhou, Y. Zhou, F. Ling, A. Mei, H. Han., *Science* 2024, 383, 1198.
- [2] D. Xu, D. Wang, J. Liu, J. Qi, K. Chen, W. Zhu, Y. Tao, Z. Zhang, A. Mei, J. Zhang, *Small* 2024, 20, 2311755.
- [3] Y. Zhang, Y. Chen, Y. Liu, Y. Cai, Y. Liu, C. Wu, J. Wang, Z. Zhang, D. Wang, J. Zhang, *Small* 2025, 21, 2410856.

A04-25

钙钛矿太阳能电池的加速老化研究

赵晓明

南京航空航天大学

钙钛矿太阳能电池的光电转换效率已经接近晶硅太阳能电池，但其相对较差的长期稳定性仍然制约着商业化进程。要实现钙钛矿太阳能电池的产业化应用，需要进一步提升其运行寿命。本报告将介绍我们在钙钛矿太阳能电池加速老化方面的研究工作。首先，我们研究了电池在不同温度下的运行稳定性，并将阿伦尼乌斯公式引入器件性能衰退速率与温度的关系中，建立了与实验结果相符的数学模型，从而实现了对

器件长期寿命的有效推算。此外，为了克服传统液相法在均匀后处理大面积钙钛矿电池器件方面的局限性，我们开发了气相辅助后处理技术。这一技术实现了大面积钙钛矿薄膜的均匀钝化，提升了大面积钙钛矿模组的效率和稳定性。

A04-26

高性能钙钛矿电池组件的研究

杨栋*

中国科学院大连化学物理研究所

大面积薄膜的均匀性是目前钙钛矿太阳能电池组件面临的关键挑战。针对这一问题，本工作设计合成了氯化四甲基铵 (TMACl)，不仅可以有效抑制前驱体溶液中胶体颗粒的凝聚，还可以调控前驱体溶液的粘度，使其能够实现均匀的沉积过程。这两方面的优势非常适合大面积钙钛矿电池的产业化应用。研究表明，TMACl 分子中心带正电的氮离子可以均匀吸附在前驱体溶液中的胶体颗粒表面，与氮离子相连的 4 个铵根离子由于较大的空间位阻效应，有效阻止了前驱体胶体颗粒的团聚，而且 TMACl 分子加入后将前驱体溶液的粘度从 0.82 mPa·s 提高到 0.93 mPa·s。采用全刮涂法制备出均匀的高取向性大面积钙钛矿薄膜，将钙钛矿组件 (57.20 cm²) 的效率提升到目前同类组件的最高值 (22.76%)，认证效率为 21.60%。高取向和低缺陷密度的钙钛矿薄膜有效提升了组件的稳定性，未封装的钙钛矿组件在大气环境下运行 1440 小时后仍可保持 93.25% 的原有效率。

A04-27

高效、稳定大面积钙钛矿光伏组件研究

丁勇

新能源学院，河海大学，213200，江苏省常州市金坛区

有机无机杂化钙钛矿太阳能电池在光电转换效率方面取得了巨大的进步，但其实验室尺寸电池与大面积钙钛矿光伏组件在效率上仍存在一定差别。此外，现有的钙钛矿组件在稳定性上仍存在诸多问题，如钙钛矿材料自身稳定性，在使役条件下，极易发生离子迁移与相分离，造成钙钛矿组件不稳定，严重制约钙钛矿组件的产业化应用。本次报告以高效、高稳定大面积钙钛矿光伏组件为目标牵引，开发基于单晶菱形 TiO₂ 纳米颗粒的电子传输材料(1)以及增强 π 共轭的 spiro 结构的空穴传输材料(2, 3)，减少大面积器件的电阻损失，提高光伏组件的效率和稳定性；设计与合成不同弱氢键材料，利用其与有机阳离子发生质子交换反应，抑制有机阳离子间缩聚反应，减少有机阳离子的去质子化，提高钙钛矿晶体的结构稳定性和相稳定性(4)；通过弱氢键材料与钙钛矿前驱体中甲胺与甲脒原位反应，生成一维钙钛矿材料，抑制钙钛矿在使役条件下的离子迁移与相分离，提高钙钛矿薄膜自身稳定性(5)；利用其与钙钛矿存在氢键和或非共价键等形式作用力，调控钙钛矿晶体的成核与生长过程，拓宽大面积钙钛矿薄膜的制备窗口，并改善钙钛矿薄膜的热稳定性和光稳定性(6)，最终获得高效、高稳定的大面积钙钛矿组件，对进一步推进钙钛矿太阳能电池产业化进程具有重要的意义。

关键词：钙钛矿；太阳能电池；光伏组件；稳定性；离子迁移

参考文献

1. Y. Ding et al., Single-crystalline TiO₂ nanoparticles for stable and efficient perovskite modules. *Nature Nanotechnol.* 17, 598-604 (2022).
2. X. Liu et al., Extending the π - Conjugated System in Spiro - Type Hole Transport Material Enhances the Efficiency and Stability of Perovskite Solar Modules. *Angew. Chem. Int. Ed.* 62, (2023).
3. X. Zhang et al., 3D Conjugated Hole Transporting Materials for Efficient and Stable Perovskite Solar Cells and Modules. *Adv. Mater.* 36, 2310619 (2024).
4. B. Ding et al., Dopant-additive synergism enhances perovskite solar modules. *Nature* 628, 299-305 (2024).
5. Y. Ding et al., Cation reactivity inhibits perovskite degradation in efficient, and stable solar modules. *Science*, 386, 531-538 (2024).
6. P. J. Shi et al., Oriented nucleation in formamidinium perovskite for photovoltaics. *Nature* 620, 323-327 (2023).

A04-28**马克笔书写制备钙钛矿太阳能组件**董琛¹, Makhsud I. Saidaminov², 谭付瑞^{1*}

1. Henan Key Laboratory of Quantum Materials and Quantum Energy, School of Quantum Information Future Technology, Henan University, Zhengzhou, PR China.8

2. Department of Chemistry, Department of Electrical & Computer Engineering, University of Victoria, Victoria, British Columbia, Canada

溶液法加工的钙钛矿光伏器件为低成本、轻量化、可穿戴电源提供了广阔前景,其中加工技术起着至关重要的作用。本文介绍了一种利用马克笔作为制备工具的大面积、可图案化、可循环的薄膜书写技术。利用马克笔的纤维-毛细管结构,通过调控墨水浓度、书写压力、书写速度、笔尖宽度、溶剂工程化,我们实现了对钙钛矿墨水胶体、薄膜厚度(200 纳米至>1,000 纳米)和面积(1 至 100+平方厘米)在刚性和柔性基底上图案化的控制,并实现了钙钛矿晶态薄膜的空气环境氛围书写。在无需掩模和激光刻蚀的条件下,利用马克笔书写的刚性及柔性碳电极钙钛矿太阳能组件分别实现了 16.3%和 14.5%的功率转换效率。该方法能制备可定制的非规则形状太阳能光伏组件,为在各种基底(包括充气的弹性气球和可折叠的玻璃纸)上原位快速制备轻质、可形变电源提供了新途径。

A04-29**高效稳定钙钛矿模组研究**

汪洋*

中国科学院化学研究所

钙钛矿薄膜制备过程中残余应力以及不可避免的缺陷导致紫外线极易降解钙钛矿材料,降低了钙钛矿太阳能电池的效率及稳定性,限制了钙钛矿光伏的产业应用。

最近,我们提出了一种分子诱导应变调节和界面钝化策略用于提高钙钛矿太阳能电池的效率和光稳定性。他们利用 6-溴香豆素-3-羧酸乙酯(BAEE)的环加成反应消耗紫外光,从而抑制薄膜的残余拉伸应力。同时,BAEE 可以与氧化镍形成键合促进钙钛矿的生长和界面缺陷的钝化,最终获得了 26.08%的认证效率,开路电压(Voc)达 1.201 V,同时有效降低了开路电压损失(0.342 V),显著提升了器件的长期稳定性(连续 365 nm 紫外照明: N2 中 T90 > 110 h,环境空气中 T90 > 6 h;在 100 mWcm⁻²条件下的连续 LED 白光照射: T90 > 1000 h),为提高钙钛矿光电转换器件的效率与稳定性提供了新策略。

A04-30**缺陷调控策略提升钙钛矿光伏模组效率**

袁世豪、王磊、钱峰、徐其恩、李世彬*

电子科技大学

在钙钛矿光伏电池规模化制备中,器件界面缺陷及钙钛矿薄膜缺陷的加剧,严重制约了钙钛矿光伏模组(Perovskite Solar Modules, PSMs)效率的提升。针对钙钛矿/NiO_x空穴传输层的界面缺陷问题,我们提出了在该界面引入添加 FCNO₂的 PTAA 修饰层策略,利用 FCNO₂分子的高亲电性改善 PTAA 分子在 NiO_x表面堆叠的有序性,降低该界面缺陷及能量无序,从而增强该界面处的电荷运输效率。最终在 10 cm×10 cm 的模组上实现了 20.6%的光电转化效率和优异的稳定性。针对大面积钙钛矿薄膜缺陷的问题,我们提出了具有锚定效应的 PZ 添加剂策略,通过同时作用于钙钛矿前驱体溶液中的碘化铅及甲脒碘,延长了狭缝涂布工艺过程中薄膜的窗口期并延缓了结晶速率,实现了对结晶过程的精准调控,从而在空气中得到了均相结构的大面积钙钛矿薄膜。基于此策略,在 10 cm×10 cm 的模组上实现了 21.5%的转化效率,认证效率达 20.3%。综上,本团队针对 PSMs 的效率优化,提出了一系列切实可行的策略。

A04-31**高效稳定钙钛矿太阳能电池与模组**

刘宗豪*

华中科技大学

钙钛矿太阳能电池的大面积制备与器件稳定性是这一新兴光伏技术商业化应用所面临的重要挑战。我

们基于有机-无机杂化钙钛矿、有机/无机多元界面材料体系，围绕钙钛矿太阳能电池材料生长、晶体缺陷抑制与修复、材料衰退延缓与抑制关键问题，以高效且稳定钙钛矿太阳能模组为目标导向，发展了大面积钙钛矿薄膜空气环境规模化狭缝涂布制备方法，钙钛矿薄膜缺陷化学抑制方法，大尺寸三氟甲基苯乙胺盐“离子键合”缺陷钝化策略，埋底界面自组装分子杂化策略，结合全界面修饰与关键阻隔薄膜器件构筑策略，实现了电池、模组第三方认证高效率 and 模组第三方认证稳定性。

A04-32

气固反应工艺制备和钝化钙钛矿太阳能电池模组

曹焕奇*

天津理工大学

我们采用气固反应工艺制备钙钛矿电池和组件。两步法制备的钙钛矿薄膜表面通常残留未反应的 MAI 和 FAI，使钙钛矿薄膜表面呈强 p 型，在倒置器件中，不利于电子转移。对此，我们利用苯甲胺蒸汽熏蒸 3D 钙钛矿，形成超薄 2D 钙钛矿层，表面比体相更趋于 n 型，有利于电子从钙钛矿转移到相邻的电子传输层。

进一步，我们利用气相沉积过程中掩膜板可以形成图案的特点，利用可移动的线掩膜板形成沟道，从而避免了后续工艺中采用激光对钙钛矿进行烧蚀产生的破坏。其优势在于在 P2 中形成了天然的界面阻挡层，从而有效抑制了离子迁移，提高了模组的稳定性，可制备具有 98% 几何填充因子的模组，为采用气相法快速制备稳定高效的钙钛矿模组提供了更多可能。

最后，我们采用一种全新的工艺制备了钙钛矿前驱体—碘化铅，更有利于气固反应法制备工艺。在气相工艺中，上述工艺制备的碘化铅更加疏松多孔，因此其制备的电池效率也超过了常规的碘化铅得到的效率。将其应用于溶液法，制备的钙钛矿电池的效率与常规的商业化碘化铅相当。证明了其具有良好的商业化潜力。

相关文献：

1. Jiang, D., Liu, Z., Li, J., et al. Non-laser and all-vapor-phase processed perovskite solar modules stabilized by naturally formed barrier layers. *Joule*, 2024, 8: 1161.
2. Qian, Y., Li, J., Cao, H., et al. Passivating Perovskites in Air Via an Alternating Cation Interlayer Phase Formed by Benzylamine Vapor Fumigation. *Adv. Funct. Mater.*, 2023, 33: 2214731.

A04-33

钙钛矿的化学气相沉积制备及其太阳能电池应用

鲁建峰*

武汉理工大学

气相沉积技术具有低成本、无溶剂、工业制造兼容性高等优点，被广泛应用于太阳能电池、有机发光二极管等光电器件的制备中。针对钙钛矿薄膜低成本、高质量气相沉积的需求，设计研发了用于钙钛矿薄膜气相反应的低压低温化学气相反应装置。提出铵盐的扩散速率与固-气反应速率协同调控策略，将固相源的形貌重构为纤维结构，加速离子扩散同时降低反应速度，成功实现了高质量 (FA, Cs)Pb(I, Br)₃ 钙钛矿薄膜气相沉积，1.0 cm² 电池效率 21.9% (获第三方认证)，25 cm² 串联模组效率 21.1%，100 cm² 串联模组效率 20.1%，效率随面积放大损失仅为 0.8%/数量级。基于以上结果，进一步开发全真空沉积路线，实现钙钛矿电池和钙钛矿-TOPCon 硅叠层电池的全真空制备，叠层电池效率 27.0%。

参考文献

1. J. Lu* et al., *Adv. Mater.*, 2023, 35, 2304625.
2. J. Lu* et al., *Adv. Mater.*, 2024, 36, 2412021.
3. J. Lu* et al., *Adv. Mater.*, 2024, 36, 2401416.
4. J. Lu* et al., *Adv. Energy Mater.*, 2025, DOI: 10.1002/aenm.202405377.
5. J. Lu* et al., *Adv. Energy Mater.*, 2025, DOI: 10.1002/aenm.202404797.

A04-34

Visible Light-Triggered Self-Welding Perovskite Solar Cells and Modules

Xiongjie Li*

South-Central Minzu University

Flexible perovskite solar cells (F-PSCs) are highly promising for both stationary and mobile applications because of their advantageous features, including mechanical flexibility, their lightweight and thin nature, and cost-effectiveness. However, a number of drawbacks, such as mechanical instability, make their practical application difficult. Here, self-welding dynamic diselenide that is triggered by visible light into the structure of F-PSCs to improve their long-term stability by repairing cracks and defects in the absorber layer is incorporated. The diselenide confers the flexibility and self-welding properties to the $\text{Cs}_{0.05}\text{MA}_{0.05}\text{FA}_{0.9}\text{PbI}_3$ perovskite layer, enabling optimized F-PSC devices to achieve a power conversion efficiency of 24.85% while retaining ca. 92% of their initial efficiency after undergoing 15 000 bending cycles at a curvature radius of 3 mm. The corresponding flexible large-scale module with an active area of 15.82 cm^2 achieved a record PCE of 21.65%.

A04-35**结晶相变调控制备大面积钙钛矿光伏模组**

郭豪丹、汪洋、宋延林*

中国科学院化学研究所

金属卤化物钙钛矿因其优异的电子特性和光学特性被广泛应用于各种领域，其中钙钛矿太阳能电池 (PSCs) 已达到 27% 以上的光电转换效率。但钙钛矿薄膜在退火过程中不可控的相变动力学和挥发性组分损失将导致钙钛矿太阳能电池出现多种类型缺陷；同时，器件面积放大时薄膜均匀性下降将引起电流失配及电压负载失衡等问题，这些问题成为模组光电转换效率和可重复性的障碍。利用羧基阴离子工程，即草酸胍 (GAOA)、丙二酸胍 (GAMA) 和丁二酸胍 (GASA) 分子研究不同羧基与钙钛矿材料之间的配位效应。其中 GAOA 分子通过氢键和双齿螯合静电相互作用与 Pb-I 骨架键合，有效调节了结晶过程中 δ -相到 α -相 FAPbI_3 的相变速率，促进高沸点溶剂挥发，并通过抑制结晶过程中组分损失稳定 α 相钙钛矿。在小面积 PSCs 上获得了 25.33% (n-i-p) 和 25.37% (p-i-n) 的光电转换效率；同时，大面积钙钛矿光伏模组的有效面积光电转换效率分别达到 21.97% (37.9 cm^2 , n-i-p) 和 19.25% (641.4 cm^2 , p-i-n)。此外，根据 ISOS-D-1 协议，器件在 1000 小时内保持 93% 的初始效率；而 ISOS-L-1 协议测试显示，500 小时后效率仍保留 95%。

A04-36**窄带隙有机受体光伏材料**

李永舫

中国科学院化学研究所，北京 100190

苏州大学材料与化学化工学部，苏州

太阳能是取之不尽、用之不竭的可再生能源，将太阳能转变成电能的太阳电池是一种零碳能源技术，在实现双碳目标中将发挥重要作用。有机太阳电池的活性层由 p-型共轭聚合物给体和 n-型有机半导体受体的共混薄膜所组成，活性层厚度一般只有 100~200 nm，具有轻、薄、柔等突出优点。柔性有机太阳电池将来在可穿戴能源、便携式能源、建筑和交通光伏一体化等方面具有重要的应用前景。本报告将介绍我们在用于有机太阳电池的窄带隙有机小分子受体光伏材料、与窄带隙受体匹配的低成本高效聚合物给体光伏材料、小分子受体高分子化的聚合物受体光伏材料、基于小分子受体的巨分子受体光伏材料、以及基于宽带隙钙钛矿前结、窄带隙有机后结的钙钛矿/有机叠层太阳电池等方面的最新研究进展。

A04-37**有机太阳能电池关键材料与高效器件**

彭强 1,2*

四川大学化学工程学院，成都，610065

成都理工大学材料与化学化工学院，成都，610059

有机太阳能电池是第三代太阳能电池的典型代表，其活性层主要由有机给体材料与富勒烯衍生物或者有机受体材料通过物理共混而制备。所以给体材料、受体材料和界面修饰材料是有机太阳能电池的关键材料，一直是本领域的前沿热点课题。本报告中，我们将重点汇报近年来我们面向高效率有机太阳能电池器件开展的有机给体材料、非富勒烯受体材料和界面材料方面的设计合成工作，同时探讨这些材料在单层器件、三元共混器件及叠层器件中的应用。我们的研究结果将为有机给、受体材料、界面材料的分子设计和进一步发展提供参考。

参考文献：

- [1] Dong, J. W., Li, Y. F., Liao, C. T., Xu, X. P.,* Yu, L. Y., Li, R. P., Peng, Q*. Energy Environ. Sci., 2025, 18, 4982.
- [2] Dai, X. J., Fan, B., Xu, X. P.,* Peng, Q*. Adv. Mater., 2025, DOI: 10.1002/adma.202503072.
- [3] Liao, C. T., Xu, X. P.,* Yang, T. Y., Qiu, W. K., Duan, Y. W., Li, R. P., Yu, L. Y., Peng, Q*. Adv. Mater., 2024, 36, 2411071.
- [4] Pang, B., Liao, C. T., Xu, X. P., Peng, S. Q., Xia, J. L., Guo, Y. Y., Xie, Y., Chen, Y. T., Duan, C. H., Wu, H. B., Li, R. P., Peng, Q. Adv. Mater. 2023, 35, 2211871.
- [5] Pang, B., Liao, C. T., Xu, X. P., Yu, L. Y., Li, R. P., Peng, Q. Adv. Mater. 2023, 35, 2300631.

A04-38

基于非富勒烯受体分子工程构筑高效有机光伏器件

刘峰*

上海交通大学

有机太阳能电池因其质轻、柔性、半透明及可大面积卷对卷印刷制备等自身优势，有望在高附加值的建筑一体化方面广泛应用。近年来，新型非富勒烯受体材料（NFAs）的快速发展推动有机太阳能电池实现了优异的光伏性能。非富勒烯受体在固体状态下的结晶聚集是通过分子间骨架 $\pi-\pi$ 堆积和侧链相互作用引起的，它的聚集行为对共混薄膜的纳米形貌起着重要作用，从而决定器件性能。A-DA'D-A 型非富勒烯受体材料独特的堆积模式形成了高效电荷传输通道，降低了激子解离驱动力和非辐射能量损失。侧链不仅影响与给体材料的混溶性，同时还可以通过调控 NFA 的侧链精调其固态堆积和电子结构以获得更好的光伏功能。我们通过主核/侧基工程精细调控非富勒烯受体材料电子结构和聚集行为，单节有机太阳能电池器件效率超过 20%。

A04-39

本体异质结有机光伏缺陷及改进策略

左立见*

浙江大学

有机光伏具有柔性、半透明等功能优势，应用前景广阔。然而，光电转换效率低长期以来制约了其发展。1995 年 Alan Heeger 等人提出的本体异质结解决了电荷产生问题，却存在非辐射电荷复合严重、可控制备困难和效率-功能难以协调的缺陷。本报告将围绕如何克服本体异质结缺陷问题，讲述课题组近年来从基础原理到器件应用取得的成果，主要包括：1) 首次提出“稀释效应”机制，弥补本体异质结电荷复合缺陷，多次刷新单结有机光伏器件效率纪录；2) 阐明“溶胀-渗透-相分离”成膜动力学原理，发展本体异质结形貌精确调控策略，实现大面积器件效率突破；3) 提出选择性光吸收等多功能耦合优化范式和新型器件结构，实现了器件高效率和多功能的协同统一。

A04-40

n-型高分子材料半导体

孙会靓*

广州大学化学化工学院，广州市番禺区大学城外环西路 230 号

有机半导体是当今材料化学领域的前沿课题，具有重要的商业应用价值。由于有机电子器件中普遍存在的 p-n 结和互补电路，n-型有机/高分子半导体对有机电子器件不可或缺。相比 p 型材料，n-型高分子在材料设计与合成、分子能级和聚集态结构调控等方面的巨大挑战，使得 n-型高分子材料种类少且性能明显

滞后,限制了高性能器件和电路的发展,亟需加快 n-型高分子半导体材料创制方面的突破。本次报告将介绍 n-型高分子半导体材料的发展以及报告人在新型双噻吩酰亚胺衍生物化学创制及其 n-型高分子半导体材料的设计与合成方面的研究工作。重点介绍新型 n-型高分子半导体材料在有机薄膜晶体管和光伏电池中的应用。

关键词: 高迁移率; 有机太阳能电池; 有机晶体管

参考文献

[1] Meng, X.; Xing, Z.; Hu, X.; Chen, Y. *Chin. J. Polym. Sci.*, 2022, 40, 1522.

[2] 胡笑添, 刘思奇, 宋延林, 陈义旺. [J]. *高分子学报*, 2023, 54, 910.

A04-41

多激子效应有机半导体材料探索

夏建龙*、王康伟

武汉理工大学

有机半导体材料受光照激发至 S1 态后,除了辐射跃迁外,主要有如下非辐射衰减途径: 1) 与相邻的基态分子发生电子耦合作用生成一种陷阱态—激基缔合物 (excimer); 2) 当电荷转移作用过强时,将发生电荷分离; 3) 适度的电荷转移作用有助于发生单线态裂分。

单线态激子裂分 (Singlet Fission, SF), 是指当有机半导体材料吸收一个光子产生单线态激子后,通过一个自旋允许的裂分过程形成两个三线态激子的多激子产生现象。研究表明,将能产生 SF 的半导体材料用于异质结太阳能电池,可以突破光电转换的 Shockley-Queisser (SQ) 定律限制,理论上光电转换效率最高可达 44%。目前对于产生 SF 的内在机制理解还不够深入,限制了单线态裂分在太阳能电池中应用的进一步研究。我们实验室主要利用飞秒激光 pump-probe 技术研究有机半导体材料的激子动力学过程,深入探索单线态裂分的内在机理及新材料。本次汇报将主要介绍我们在 SF 机理及单线态裂材料探索方面所取得的最新进展。

参考文献

1. Wang, K.; You, X.; Miao, X.; Yi, Y.; *Peng, S.; Wu, D.; *Chen, X.; Xu, J.; Sfeir, M. Y.; Xia J. * Activated singlet fission dictated by anti-Kasha property in a rylene imide dye. *J. Am. Chem. Soc.* 2024, 146, 13326.

2. X. You, H. Liu, H. Zhou, X. Chen, J. Xu, D. Wang, D. Wu, * J. Xia* Synthesis, Stable Radical Anion and Energy Storage Performance of Pentacene Tetraimides. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2025, 64, e202417362

3. J. Zhao, † J. Xu, † H. Huang, K. Wang, D. Wu, * R. Jasti, J. Xia*, Appending Coronene Diimide with Carbon Nanohoops Allows for Rapid Intersystem Crossing in Neat Film. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2024, 63, e202400941.

A04-42

有机光伏电子渗透探测及调控

殷航*

山东大学

本报告将概述有机光伏电运输的相关理论与方法。有机光伏材料由于独特的光、电、磁特性及其柔性易加工的特点,已成为新一代半导体的重要组成部分[1-3]。揭示光活性层中载流子调控的新规律,实现高迁移率、低渗透阈值的多场景高性能有机光伏器件已成为前沿有机电子学的重要研究内容[4, 5]。然而,随着材料种类与器件结构的日益复杂,传统单一的电运输调控手段逐渐趋向瓶颈。

针对目前 Mott-Gurney 模型无法辨识有机薄膜缺陷态性质这一领域难题[6],原创性地提出了一系列电运输分析方法。我们结合函数判据等方法[7],通过漂移扩散分析评估了空间电荷限制电流法的缺陷,从载流子运输角度为光伏材料设计和器件制备提供了的重要参考。在此基础上,阐明了不同物理场下缺陷态对载流子渗透过程的影响机制[8],为高性能多场景有机光伏器件的构筑提供了新的策略。

参考文献

- [1] M. Sherwin et al., *Nature* 599, 57 (2021).
- [2] F. Liu et al., *Nat. Mater.* 21, 656 (2022).
- [3] X. Zhan et al., *Nat. Rev. Mater.* 3, 18803 (2018).
- [4] H. Yin et al., *Adv. Mater.* 36, 2405718 (2024).
- [5] Y. Yang et al., *Nat. Commun.* 14, 1760 (2023).
- [6] K. Lee et al., *Appl. Phys. Lett.* 123, 143502 (2023).
- [7] H. Yin et al., *Mater. Sci. Eng. R* 157, 100772 (2024).
- [8] H. Yin et al., *Sci. Adv.* 10, ado5460 (2024).

A04-43

大面积有机光伏组件的全溶液法制备

柳佃义 1*

1 浙江省杭州市西湖区墩余路 600 号

摘要: 有机光伏具有轻质、柔性和半透明等优点, 同时可以溶液法印刷, 是一种重要的绿色能源技术。有机光伏器件的效率获得了快速提升, 小面积有机光伏器件的最高效率已经达到 20% 以上。然而, 大面积有机光伏器件的研究较少, 尤其是面积超过 100 cm² 的大面积有机光伏组件的报道更为欠缺。我们采用全溶液法工艺, 在全空气开放环境下, 制备了面积为 100 cm² 以上的有机光伏组件。在 AM 1.5G 标准测试条件下, 组件的效率达到 6% 以上。

关键词: 有机光伏, 大面积, 溶液法, 组件

参考文献:

1. Yibin Zhou, Zibo Zhou, Yifan Wang, Qianqing Jiang*, Dianyi Liu*. *Small*, **2025**, 2500536.
2. Zibo Zhou, Yibin Zhou, Ruiqian Meng, Zida Zheng, Qianqing Jiang,* and Dianyi Liu*. *Solar RRL*, **2025**, 2500536.
3. Huitong Deng, Qianqing Jiang*, Dianyi Liu*. *Small*, **2025**, 2501475.
4. Jingyu Chang, Zida Zheng, Qianqing Jiang,* and Dianyi Liu*. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2025**, 17, 21552–21559.
5. Qinan Wang, Qianqing Jiang,* and Dianyi Liu*. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2025**, 17, 21295–21303.

A04-44

有机光伏受体分子间非共价作用的调控

罗正辉*

深圳大学

A-D-A 型受体具有在可见-近红外区域较强的吸收、能级易调节、结构易修饰等优点, 其一般由端基, 中心和侧链组成。调控分子间的非共价键相互作用是获得高电子迁移率的 A-D-A 型受体 (图 1) 和实现高性能光伏器件的重要手段。本报告将系统介绍分子间的非共价键相互作用对 A-D-A 型受体 $\pi-\pi$ 堆积距离、电子迁移率和器件性能的影响, 具体包括以下三点: (1) 发展了系列新型端基受体, 增强了分子间 S \cdots S、S \cdots N 和 S \cdots F 相互作用, 导致分子堆积距离显著缩短; (2) 利用新型含氮砌块构筑多重非共价键辅助堆积受体, 明显增加了空间轨道重叠程度和电子迁移率; (3) 阐明了分子间氢键对分子堆积模式的影响规律, 提升了电子迁移率和器件填充因子。

A04-45

固体添加剂的分子设计与光伏活性层形貌调控

于润楠 1,*

1 北京化工大学, 北京市海淀区北三环 15 号, 100029

精细调控活性层微观形貌是提升有机光伏器件性能的重要途径。现有形貌调控方法在功能性、稳定性、重复性及大面积加工适用性等方面的欠缺迫使研究者着力发展新思路、新技术, 以追求光伏器件效率、寿

命以及良率的同步提升。固体添加剂因其具有良好的加工稳定性以及多样的形貌调制功能，被认为是用以制备稳定、高良率光伏电池器件的有效形貌调控方法。在本报告中，报告人将系统介绍不同结构固体添加剂在有机光伏活性层形貌调控中的应用，介绍如何从分子设计的角度实现固体小分子表面电荷分布、挥发性和自组装空间的协同调控，以实现诱导有序分子排列的分子间非共价相互作用，以及热力学相变动态过程中活性层分子二次自组装过程的精准控制，尤其是能量耗散的渐进式控制。随后，本报告将介绍固体添加剂在高性能光伏器件中的应用及其作用机制的探索。综上，固体添加剂的系统研究为高性能有机光伏器件中活性层形貌调控提供创新思路。

参考文献（5 篇以内）

- [1] Yu, R.; Shi, R.; He, Z.; Zhang, T.; Li, S.; Lv, Q.; Sha, S.; Yang, C.; Hou, J.; Tan, Z.* *Angew. Chem.* 2023, 62 (40), 2308367.
- [2] Yu, R.; Wei, X.; Wu, G.; Zhang, T.; Gong, Y.; Zhao, B.; Hou, J.; Yang, C.; Tan, Z.* *Energy Environ. Sci.* 2022, 15: 822.
- [3] Zhang, Y.; Yu, R.*; Li, M.; He, Z.; Dong, Y.; Xu, Z.; Wang, R.; Ma, Z.; Tan, Z.* *Adv. Mater.* 2023, 36, 2310203.
- [4] Yu, R.; Yao, H.; Chen, Z.; Xin, J.; Hong, L.; Xu, Y.; Zu, Y.; Ma, W.; Hou, J. *Adv. Mater.* 2019, 31: 1900477.
- [5] Yu, R.; Yao, H.; Hong, L.; Qin, Y.; Zhu, J.; Cui, Y.; Li, S.; Hou, J. *Nat. Commun.* 2018, 9: 4645.

A04-46

受体光伏材料设计与活性层形貌调控

李骁骏*

中国科学院化学研究所

有机太阳能电池作为极具应用前景的太阳能利用方式，近年来吸引了广泛关注，并取得了迅速发展。有机太阳能电池活性层材料结构单元是构成分子的重要部分，也是分子间相互作用的基础。基于此，我们在 n-型有机半导体材料的设计、合成及其在有机光伏器件中应用的研究主要分为：1. 从固态堆积角度揭示了受体结构单元对分子相互作用、堆积和器件性能影响的原因，并利用分子相互作用，提出内侧链末端苯环修饰策略，实现对小分子受体在非卤溶剂中自组装特性的有效调控。2. 为提升活性层形貌稳定性，以小分子受体结构为基础，利用共价键连策略合成了高效聚合物受体，并开发了兼具小分子与聚合物优点的巨分子受体体系，此外，利用非共价键（氢键）策略修饰小分子受体获得了高效高稳定柔性有机太阳能电池。

A04-47

高效率有机太阳能电池组件的可控制备与性能研究

刘权*

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

Significant advancements in research have been made in recent years, with single-junction organic solar cells achieving efficiencies exceeding 20%. However, scaling up laboratory prototypes to large-area commercial modules remains challenging due to the absence of high-quality thin-film deposition techniques, particularly for ultra-thin interfacial layers[1]. Here, a fully vacuum-processed approach utilizing InCl₃ as a hole contact and C60/BCP as an electron-contact interlayer, respectively, which act as dense and uniform charge transporting layers, while also ensuring consistent batch-to-batch reproducibility of module performance (PCE = 17.3%@15.6 cm²) [2]. To broaden the processing window of active layer for large-area modules, a seed crystal strategy by incorporating oligo (ethylene glycol)-modified asymmetric BDTF-CA20 molecule donors was proposed to optimize the nucleation and crystallization of PM6:BTP-eC9 blend, leading to a record active area module efficiency of 17.7%[3]. When consider semi-transparent modules for energy-generating windows, NIR-absorbing PCE10 polymer is used instead of PM6 for achieving high visible transparency over 40%. By integrating strategies to reduce non-radiative

recombination losses, a cost-effective double-layered nano-photonic structure, and a high-quality 12-nm-thin Ag top electrode, semi-transparent modules achieve 9.4% with AVT > 40%, and demonstrate excellent reproducibility[4].

Reference

[1] L. Xie, Q. Liu*, et al. Energy Environ. Sci., 17, 7838–7849 (2024)

[2] Z. Jin, Q. Liu*, et al. Energy Environ. Sci. (2025)

<https://doi.org/10.1039/D5EE00014A>

[3] H. Hu, Q. Liu*, et al. Adv. Mater, 37, 202420308 (2025).

[4] C. Han, Q. Liu*, et al. Adv. Energy Mater (2025)

<https://doi.org/10.1002/aenm.202501682>

A04-48

聚集诱导发光电子受体设计及其高效光伏器件应用

施妍琦、安存彬*

首都师范大学

有机太阳能电池(OSCs)因其轻质、柔性、低成本制造、溶液可加工性以及适合大面积制备等独特优势而受到广泛关注。电子受体材料的发展(尤其是Y6及其衍生物)推动了单结二元OSCs能量转换效率(PCE)的显著提升,目前效率已突破20%。然而,与硅基和钙钛矿等光伏技术相比,OSCs仍存在明显差距,其核心问题在于OSCs存在显著的能量损失(E_{loss}),这对开路电压(V_{oc})产生重大影响。其中,非辐射能量损失(ΔE_{nr})可调性较大,它与BHJ层的电致发光量子效率(EQE_{el})和光致发光量子产率(PLQY)相关。因此,开发高发光兼高迁移率的电子受体对提高OSC的PCE至关重要。

基于此,我们开发了一种高 EQE_{el} (1.0×10^{-3})和优异电子迁移率(SCLC, $1.5 \times 10^{-4} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$)的非稠环电子受体材料TT-TCBr。TT-TCBr在溶液的PLQY为9.24%,但是在薄膜状态下的PLQY提升到20.7%,表现出聚集诱导发光特性。通过制备二元和三元器件对材料性能进行表征。基于D18:TT-TCBr的OSCs实现了13.20%的PCE,具有1.09 V的高开路电压和0.177 eV的低 ΔE_{nr} 。将TT-TCBr引入到使用广泛的D18:L8-B0二元OSC中,使得其 E_{loss} 从0.543 eV降低到0.530 eV。D18:L8-B0二元OSCs的PCE从19.16%提升到20.10%,这是目前非稠环电子受体作为第三组分引入到OSCs的最高效率。该工作表明设计具有聚集诱导发光和良好电子迁移率的非稠环电子受体极有可能构建出高效的OSC。

A04-49

曲面碗烯分子功能化及其光伏应用

安明伟*¹、邢舟²

1. 福建师范大学 海峡柔性电子(未来科技)学院

2. 福建师范大学 化学与材料学院

曲面碗烯是一种具有正曲率 π 共轭结构的碗状分子纳米碳材料,其独特的三维结构赋予其区别于传统平面纳米碳的新颖性质。在晶体中,碗烯分子主要通过CH- π 相互作用而非常见的 π - π 堆积进行组装,碗状结构的凸凹面因电性差异而增强了分子间的相互作用。其曲面结构可有效调控薄膜材料的结晶性与无定形特性:通常,良好的结晶性有助于提高载流子迁移率,但可能降低分子的溶解性、成膜性和环境稳定性;而无定形结构则在这方面表现出相反的趋势。

基于碗烯这一独特的构建单元,我们发展了一系列功能材料,并将其应用于新一代高性能光伏器件中,具体包括以下工作:(1)空穴传输材料的开发:我们设计合成了一种新型碗状三苯胺基空穴传输材料——Cor-OMePTPA。该分子呈相对平面构型,并通过指状交叉构建互锁式二聚体结构。基于其构建的钙钛矿太阳能电池表现出优异性能,最高光电转换效率达20%,在60°C氮气氛围下连续加热1000小时后仍可保持初始效率的86%,表现出优良的热稳定性。(2)界面修饰材料的设计:我们进一步合成了一系列碗烯铵盐,并将其应用于钙钛矿电池的界面层修饰,器件能量转换效率最高达25%,同时显著提升了器件的运行稳定性。(3)添加剂在有机太阳能电池中的应用:我们将碗烯作为添加剂引入有机太阳能电池中,不仅将光电转换效率提升至20.5%,还显著增强了器件的环境稳定性,预测其 T_{80} 寿命可达9000小时。

A04-50**有机光伏器件中的激子和电荷动力学**

张康宁*

山东大学物理学院

得益于材料设计、器件工程以及器件物理机制理解的协同发展，单结非富勒烯有机太阳能电池的认证能量转换效率已突破 20% 大关。该进展使得其商业化应用前景可期。光电转换基础理论涉及飞秒至微秒时间尺度内一系列激子与电荷动力学过程，解析这些动力学机制是提升器件效率、理解工作原理以及增强光伏稳定性的关键所在。尽管目前对有机光伏体系中激子和电荷动力学的理论框架已初步建立，但一些具有争议性的理论和实验现象仍需深入探究。特别需要强调的是，在高性能非富勒烯体系中，电荷复合过程、陷阱态响应及与稳定性密切相关的动力学演化信息的解析具有重要意义。通过系统探讨当前高效率有机光伏体系中的激子与电子激发态演化规律，以及光电物理特性与器件功能间的构效关系，旨在深入理解光电转换机理，为潜在问题的解决提供理论依据和方法学参考。

A04-51**面向产业化的钙钛矿太阳能电池制备技术**

徐保民*

南方科技大学

钙钛矿太阳能电池经过十余年的研究，已经到了从实验室走向产业化的关键阶段，因而必须发展能够面向产业化的制备技术。在这个报告中，我将介绍我们团队在这方面的近期几项工作。首先，我们开发了水相绿色合成钙钛矿晶体原料的技术，能够用低纯度（99%）的前驱体原料合成纯度高于 99.99% 的 FAPbI₃、MAPbI₃、CsPbI₃ 等多种钙钛矿晶体，且成本比商业 PbI₂ 和甲脒碘化物低两个数量级，基于这些钙钛矿晶体原料制备的电池器件效率达到 27.03%，同时具有很好的稳定性。在界面材料设计方面，我们通过对小分子空穴传输材料骨架和功能基团的综合设计以优化其电荷传输性能和界面钝化能力，将基于小分子空穴传输层的电池效率从 24.34% 提高到 26.10%。此外，我们通过减少 SAM 分子的旋转不确定性和增加锚定位点，使基于 NiO_x/SAM 的反式电池的效率达到 26.21%，1.02cm² 器件的效率达到 25.31%，是其时 1cm² 的器件的效率最高值。这些结果展示了使用低成本低纯度起始原料和通过合理的界面分子设计实现规模化制备高效率钙钛矿电池的可能性。

A04-52**潮湿空气中制备高效钙钛矿太阳能电池**

肖立新*

北京大学

目前，高性能钙钛矿太阳能电池的制备与优化策略主要基于 N,N-二甲基甲酰胺（DMF）及配位溶剂二甲基亚砜（DMSO）组成的经典混合溶剂体系，且通常需要在手套箱惰性气氛环境或受控的低湿度等严苛条件下进行，这无疑增加了器件制备的工艺复杂度及其成本。然而，在较高湿度下制备器件时，配位溶剂的吸收水分子会诱导中间相向无光伏特性的黄相钙钛矿的不利相变，进而阻碍具有光伏活性的黑相 FAPbI₃ 钙钛矿的形成，致使器件光伏性能与器件制备可重复性的明显下降。

我们采用多种（准）原位光谱表征手段，深入研究经典溶剂体系在湿度环境下钙钛矿薄膜的结晶动力学过程，提出了一种原位构建晶态覆盖层策略，通过向两步法前驱体溶液中引入一系列有机自由基分子，组份间的表面能差异及其相互作用改变了碘化铅中间相薄膜的结晶动力学过程，在退火过程中形成了明显的分层结构。薄膜上层逐渐原位形成致密且疏水的晶态覆盖层，下层则是优化钙钛矿结晶过程的关键组份 DMSO-PbI₂ 复合物。由此，这一原位形成的晶态覆盖层极大程度减少了制备过程中水分子的侵蚀，并且有效阻挡了下层中 DMSO 在退火过程中的挥发，同时实现了阻止 DMSO 吸水和保留 DMSO-PbI₂ 以优化结晶的双重效果，解决了经典溶剂体系在高湿度环境下稳定制备高质量钙钛矿光伏活性层的难题（图 1）【1】。最近，针对钙钛矿光伏材料的环境氛围制备所面临的关键挑战及可能的应对措施进行了深入分析与总结【2】。

A04-53

杂化钙钛矿太阳能电池中的缺陷与载流子调控

王植平*

武汉大学

卤化物钙钛矿太阳能电池因其优异的光电性能和低廉的制造成本，已成为新一代光伏技术的有力竞争者。然而，其商业化进程仍面临诸多挑战，其中最关键的问题之一是材料中高密度的内在与外在缺陷所导致的不稳定性和能量损失。此外，载流子在钙钛矿层及其界面中的运输与提取效率也有待进一步提升。本报告将系统介绍我们在提升钙钛矿太阳能电池效率和稳定性方面所开展的系列研究工作，重点围绕缺陷钝化、半导体掺杂、固定电荷钝化等多种创新策略展开。将从材料设计、器件物理机制、界面工程与缺陷调控等多个角度，深入分析影响器件性能和可靠性的关键因素，提出适用于高性能钙钛矿光伏器件的新思路与新方法。

A04-54

钙钛矿活性层的结晶动力学调控及钙钛矿太阳电池的性能研究

郝玉英*, 李仕奇, 张晨曦, 郝阳, 吴玉坤

太原理工大学 太原市迎泽西大街 79 号 邮编 030024 地址

摘要：钙钛矿活性层的结晶质量是影响钙钛矿太阳能电池（PSCs）性能和稳定性的关键因素。本工作对两步法制备钙钛矿薄膜的结晶动力学过程进行了深入的研究，并围绕钙钛矿埋底层修饰、埋底层界面修饰、钙钛矿层本体修饰三个方面提出了多种有效方案调控了钙钛矿的结晶动力学过程，有效提升了钙钛矿薄膜的结晶质量。同时，钝化了钙钛矿的体界面缺陷，改善了界面能级排列，缓解了界面应力，减少了界面非辐射复合，使修饰后的刚性及柔性 PSCs 的光电转化效率和稳定性都得到了有效提升。同时，本工作还研究了 PSCs 的低温特性及随温度演化的机理，并提出了提高电池低温特性的有效方案。

A04-55

光伏电池效率极限理论研究

郑皓峰, 肖晋, 胡静, 侯绍聪*

武汉大学电气与自动化学院

目前，单结硅和钙钛矿太阳能电池的实验室效率均已超过 27%，接近单晶硅电池的效率记录。然而，光伏电池的理论效率极限及其大面积器件可实现效率最高值仍不明确。本报告将介绍我们在光伏电池光子回收模型上的最新进展，并通过材料和结构设计，突破传统平板状光伏电池的效率极限。

1. H Zheng, Zheng*, *Advanced Materials* 2024, 36, 2405063
2. H Zheng, S Hou*, *ACS Photonics* 2024, doi.org/10.1021/acsp Photonics.4c00140
3. Y Wang, S Hou*, *Advanced Energy Materials* 2024, 14, 2401585
4. X Ma, S Hou*, *ACS Materials Letters* 2024, 6 (11), 5076–5092

A04-56

钙钛矿太阳电池界面缺陷钝化与自修复研究

胡林华*, 孙爱青, 卜昌山

中国科学院合肥物质科学研究院

钙钛矿太阳电池（PSC）由于其优异的光伏性能、易于制备以及潜在的高光电转换效率，具有很好的应用前景。作为 PSC 中的核心组分，钙钛矿材料中由缺陷导致的载流子的非辐射复合损失，以及高湿度环境下易分解带来的稳定性较差等问题，制约了 PSC 在实际应用的进一步发展。抑制钙钛矿中缺陷带来的负面影响和提升在高湿度环境下器件的工作稳定性，是目前钙钛矿太阳电池急需解决的重点问题。

我们结合硫醇路易斯碱的性质和烷基链优异疏水性的特性，引入了表面疏水改性剂—十二硫醇（DDT）来修复钙钛矿晶体缺陷并提高钙钛矿薄膜的耐湿性。发现 DDT 中硫醇基团对缺陷的修复性能，从而降低了陷阱密度，抑制了缺陷诱导的载流子非辐射复合，提高了载流子传输和提取性能。为了探究含有多种功能性官能团的钝化剂对钙钛矿的多重影响，为此我们选用了一系列溴化季铵盐离子液体，系统的研究了不同官能团同时作用于钝化缺陷和湿度侵蚀保护的机理。研究发现十二烷基和十六烷基对电流密度都产生负面影响，说明疏水性烷基链阻碍了载流子的传输。但是将季铵盐中 N⁺周围的一个甲基替换为苯基后，苯基能与

空穴传输层中的苯环形成 $\pi-\pi$ 堆叠, 促进载流子的提取, 从而减弱了绝缘性烷基链带来的载流子传输负面影响, 最终获得了超过 24% 的光电转换效率且湿度稳定性优异的 PSCs 器件。相关研究成果, 为今后改进钙钛矿太阳能电池稳定性提供了实用价值。

A04-57

钙钛矿太阳能电池异质结构调控研究

王言博*

上海交通大学

低成本光伏技术的发展, 是实现双碳目标的关键。钙钛矿电池具有高效率, 低能耗的优点, 受到国内外的广泛关注。目前, 钙钛矿电池面向产业化的关键在于工作稳定性差, 其根源在于离子缺陷的形成与扩散, 主要包括以下三个方面: (1) 钙钛矿键合弱, 在光、热诱导下, 容易形成离子缺陷; (2) 异质结构均匀钝化难, 离子缺陷扩散通道多; (3) 电极与离子缺陷反应, 驱动持续的离子扩散。

针对以上问题, 我们从异质结构的角度进行设计, 运用表面处理、原位反应等方法解决问题。钙钛矿与电荷传输层形成的载流子提取异质结构, 以及电荷传输层与电极形成的载流子收集异质结构是载流子运输的关键。通过表面处理、原位反应调控异质结构, 禁阻离子缺陷的形成与扩散, 可以在保留甚至提高光电性能的基础上, 提高稳定性。通过构建基于强键合的高效稳定载流子提取异质结构, 开发基于电荷传输层掺杂反应的均匀钝化技术, 以及构建高效稳定载流子收集异质结构, 实现了钙钛矿太阳能电池 5000 小时标准光照下的输出稳定性, 为当时报道的最佳水平。

[1] Wang. Y, Han. L*, et al., Science, 2019, 365(6454): 687-691.

[2] Lin. X, Wang. Y*, Han. L*, et al., Nature Energy, 2022, 7, 520-527.

[3] Qin. Z, Wang. Y*, Han. Liyuan*, et al., Energy Environ. Sci., 2025, 18, 2264 - 2272

[4] Chen. M, Wang. Y*, Han. Liyuan*, et al., Energy Environ. Sci., 2025, 10.1039/d5ee00851d

[5] Chen. M, Wang. Y*, Han. Liyuan*, et al., Nature Communications, Accepted

A04-58

有机光伏激发态动力学机制解析与器件性能调控

郝晓涛*

山东大学

有机光伏 (OPV) 材料与器件作为新材料与新能源领域的前沿, 因其低成本、轻质、柔性及可卷对卷加工等优势备受关注。器件性能的核心在于光激发态 (如激子、极化子和自由电荷) 的产生、传输、解离与复合等动力学行为。因此, 精确探测并调控这些过程是设计高性能 OPV 器件的关键。本研究系统运用飞秒瞬态吸收光谱和时间分辨荧光光谱技术, 深入解析了有机半导体中的激发态动力学, 为高性能 OPV 电池的构筑提供了重要依据。

基于时间分辨超快光谱, 我们揭示了高性能非富勒烯太阳能电池中独特的非定域空穴转移机制, 并据此设计了双能量转移策略以提升器件性能。同时, 通过分析非富勒烯受体的激子扩散行为, 实现了扩散长度的有效增益。进一步, 采用时间分辨荧光显微成像技术, 阐明了非富勒烯活性层在老化过程中激子的能量转移与复合路径, 显著提升了器件的运行稳定性。针对绝缘半导体稀释异质结光伏器件, 我们利用瞬态吸收光谱定量解析了载流子的缺陷复合动力学机制及其调控方法。通过聚合物吸附策略 (如引入聚苯乙烯 PS 或聚甲基丙烯酸甲酯 PMMA) 调控活性层分子堆叠, 增强了分子间相互作用, 优化了电子波函数分布, 从而实现了更有序的分子排列, 延长了激子寿命与扩散长度。其中, PMMA 还可协同抑制电子传输层 ZnO 的氧空位缺陷, 降低体系的动态与静态无序, 提升空穴传输效率并促进激子解离。

参考文献

[1] J.W. Qiao, F.Z. Cui, W.Q. Zhang, R.H. Gui, Z. Fu, M. Sun, P. Lu, H. Yin, X.Y. Du, X.T. Hao*, Enhanced Exciton Delocalization in Organic Near-Infrared Photodetectors via Solid Additive-Mediated J-Aggregation, Advanced Materials, 37, 2418844 (2025).

[2] Z. Fu, J.W. Qiao, F.Z. Cui, W.Q. Zhang, L.H. Wang, P. Lu, H. Yin, X.Y. Du, W. Qin, X.T.

Hao*, $\pi - \pi$ Stacking Modulation via Polymer Adsorption for Elongated Exciton Diffusion in High-Efficiency Thick-Film Organic Solar Cells, *Advanced Materials*, 36, 2313532 (2024).

[3] Z. Fu, J.W. Qiao, F.Z. Cui, R.H. Gui, P. Lu, H. Yin, X.Y. Du, X.T. Hao*, Suppressing Static and Dynamic Disorder for High-Efficiency and Stable Thick-Film Organic Solar Cells via Synergistic Dilution Strategy. *Advanced Materials*, 36, 2413317(2024).

[4] K.N. Zhang, Z.N Jiang, J.W. Qiao, P. Lu, C.C. Qin, H. Yin, X.Y. Du, W. Qin, X.T. Hao*, Dredging photocarrier trapping pathways via “charge bridge” driven exciton - phonon decoupling enables efficient and photothermal stable quaternary organic solar cells, *Energy & Environmental Science*, 16, 3350(2023).

[5] K.N. Zhang, X.Y. Du*, J.W. Qiao, H.X. Hu, W.Q. Zhang, L.H. Wang, M.S. Gao, H.Y. W. Qin, X.T. Hao*, Triggering favorable energy landscape: a general approach towards highly-efficient and photostable organic solar cells, *Energy & Environmental Science*, 15, 5261(2022).

A04-59

柔性有机太阳能电池：类网格银纳米线电极设计、器件构筑及活性层机械性能调控

孙延娜*

山东大学

柔性电子器件，特别是基于有机材料的光电器件，因其在可穿戴设备、便携式能源等领域的巨大潜力，已成为下一代电子技术发展的重要方向。其中，开发高性能的柔性透明电极（FTEs）是构建高效柔性有机光电器件的核心挑战。我们设计制备了具有类网格结构的银纳米线基柔性透明电极，该电极同时实现了高导电率、高透光率、表面平滑、耐弯曲性能等优点。为了证明其在有机光电器件中的实用性，将该电极应用于有机太阳能电池，实现了柔性有机太阳能电池的效率纪录。此外，研究深入探讨了活性层材料的分子工程（如端基共轭拓展策略）以及三元组分的相容性对活性层共混薄膜机械性能的关键影响，解析薄膜微纳结构、薄膜机械性能与器件性能参数之间的多维关联关系，为设计兼具高效率和高机械稳定性的柔性有机光电器件提供了重要的理论基础。

报告人将重点阐述：高性能类网格结构 AgNWs 柔性透明电极的设计理念、制备与表征；基于该电极的高效柔性有机太阳能电池的构筑；活性层材料分子结构-薄膜机械性能-器件性能/稳定性关联机制，为发展高效、稳定的柔性有机光伏电池提供理论支撑。

A04-60

有机太阳能电池主客体活性层设计及组件性能研究

陈海阳*

苏州大学

近年来，可溶液印刷有机太阳能电池由于具有活性层薄、轻质、柔性、结构简单、可制备成半透明器件等优点，在便携式能源、光伏建筑一体化等方面展现了巨大的应用前景，有望突破晶硅电池在应用场景方面的局限性，成为一种颠覆性光伏技术。目前，实验室制备的小面积有机太阳能电池效率已经突破 20%。然而，通过溶液印刷方法获得高质量有机活性层仍需严苛的制备条件，如溶剂选择窗口窄，需要借助高挥发性、有毒的氯仿溶剂；且高性能器件通常基于 ~ 100 nm 的薄膜活性层制备，在大面积印刷时易造成薄膜不连续，严重制约了有机太阳能电池的产业化进程。为此，报告人率先提出了有机太阳能电池活性层的主客体材料设计策略：1) 实现了使用环境友好的高沸点溶剂溶液印刷过程中活性层主体组分在相容性、溶解性、宏观和微观尺度组装行为的有效调控，环境友好溶剂中刮涂制备了效率超过 16%的有机太阳能电池组件[1, 2]；2) 有效调控了活性层给受体结晶顺序，获得了本体异质结梯度分布的活性层，提高了膜厚不依赖性，最终基于 250 nm 厚膜活性层，获得了有机太阳能电池组件记录认证效率（18.04%）[3]；3) 利用客体材料协同调控给体分子堆积模式（H-、J-型）和受体材料成核、结晶，同时提升了半透明有机太阳能电池平均可见光透过率和效率，获得了纪录光利用率的小面积半透明有机太阳能电池（6.02%）和大面积半透明有机光伏组件（4.53%）。相关工作解决了可溶液印刷有机太阳能电池大面积组件制备过程中的多个瓶颈性问题，有望加速推动有机太阳能电池的产业化进程。

A04-61**有机光伏：从高效窄带隙给体材料到物理机制探究**

高珂*

山东大学

高效窄带隙给体材料是有机太阳能电池材料设计的重点与难点，我们通过多重分子工程合成系列宽吸收、低能量损失的卟啉类材料，初步探讨从化学结构到低能量损失的关系。并将材料应用于多类太阳能电池器件，助力多种类型太阳能电池实现光电转换效率新突破。譬如获得全小分子太阳能电池器件的最高认证效率。

多维尺度形貌是影响有机光伏器件性能的重要因素，其成因复杂、表征难度高，很难在实空间与倒易空间同时验证；此外，有机光伏领域亟需一个综合且通用的模型，用于描述活性层共混薄膜在非平衡态下的形貌转变与器件性能间的关系，加深对形貌演变的理解，指导器件效率和稳定性的提升。

报告人将从材料的设计开发与应用展开，重点介绍多维尺度形貌在有机太阳能电池中的验证，及对器件优化的指导与广泛应用；最后，聚集基于非平衡态相图的普适性理论模型，通过结合热力学与动力学，用于理解 OPV 中的形貌演变过程，为深入理解有机太阳能电池中形貌生成过程与器件优化提供理论支撑。

A04-62**有机/高分子材料的光电转换机制研究**

陈先凯*

苏州大学

光电转换功能有机/高分子材料具有分子结构方便可调、器件制作工艺简单、易于制备大面积/柔性器件等突出优势，已经在有机电致发光(OLED)和有机光伏(OPV)等领域表现出巨大的应用潜力，得到了学术和工业界的广泛关注。揭示有机/高分子材料的光电转换机制是本领域的共性科学问题，是高效率材料设计与构筑的前提。在将电转换为光的有机电致发光器件和将光转换为电的有机光伏器件，激子在有机光电材料中形成、传输和转换，因此抑制激子非辐射复合极为关键。鉴于此，围绕“如何抑制有机/高分子材料的激子非辐射复合”这一关键科学问题，报告人通过跨尺度理论模拟结合实验表征，揭示了有机/高分子材料的光电转换机制，阐明了有机/高分子材料结构与激子非辐射复合之间的关系，提出了抑制有机/高分子材料激子非辐射复合的材料设计策略，为具有光电转换功能的新型高效率有机/高分子材料构筑奠定了理论基础。

A04-63**重原子修饰的小分子受体材料精准合成与光伏性能调控**

王金亮*

北京理工大学

单分散有机光电转换材料具有明确结构和分子量，在探究分子结构与性能构效关系、厘清高效电池工作机制等方面具有重要的科学意义。针对新颖的活性层单分散材料有限、精准解析构效机制难、综合性能优异聚合物太阳能电池稀缺等瓶颈科学问题，近年来围绕“新型重原子杂化活性层材料体系创制及在高效聚合物太阳能电池中的多功能应用”开展了系统研究。1) 提出了“非对称硫/硒杂化核心”的单分散受体合成新策略，创新创建了硒杂稠环受体新材料体系，有效解决了硒杂稠环受体类电池效率低和能损大的难题，持续引领该类材料器件记录性能。2) 提出了“多卤非对称杂化末端”的形貌调控新策略，发展了单晶堆积模型介导和机器学习智能辅助的解析构效关系和揭示电荷传输机制的新研究策略，实现了重原子杂化受体材料性能突破。3) 提出了氟氯异卤化同源砌块共聚高分子给体材料或双受体组分共混协同优化活性层的新策略，构建了同期记录效率兼具卓越稳定性的多种类聚合物太阳能电池。

A04-64**平面异质结有机光伏电池形貌调控与性能研究**

阚志鹏*

广西大学

本研究以聚合物 PM6 为给体材料，以小分子 ITIC 及 Y6 衍生物为受体材料，构建了由纯给体层与纯受体层组成的平面异质结有机光伏电池，旨在系统探究电离能偏移以及给/受体层形貌对器件性能的影响机

制。通过超快光谱与时间分辨电荷载流子密度分析发现,当给体与受体之间的电离能偏移在 0.3 eV 时,电荷转移效率最高,双分子复合率最低,三重态生成也显著减少,从而实现了最优的光电转换效率。基于此,我们选用具有较大电离能偏移的 PM6/N3 组合构建活性层,以期进一步提升平面异质结有机太阳能电池的性能。与相同活性层材料制成的体异质结器件相比,PHJ 结构因界面数量减少而有效降低了双分子复合速率,并抑制了缺陷态密度的形成,从而提高了电荷提取效率。此外,由于给体与受体形成了更有序的纯相结构,减少了约 3 - 5 meV 的能级无序度,使得基于 PM6/N3 体系的平面异质结器件达到了 18.1% 的功率转换效率,优于相应 BHJ 器件的 17.2%。为进一步优化受体层形貌,我们采用不良溶剂(如二氯甲烷,DCM)与高沸点溶剂添加剂(如 FN、CN、BN)共混的方法,在室温条件下成功制备出微米尺度的受体多晶结构。研究表明,该方法延长了受体分子的 J 聚集过程,调控了分子排列方式,促进了多晶结构的形成,从而增强了电荷传输能力,最终获得了 18.63% 的效率(认证效率为 18.17%)。在此基础上,通过引入双添加剂策略进一步优化给体与受体层的微观形貌,使平面异质结有机光伏电池的光电转换效率提升至 20%,展现了其在高效有机太阳能电池领域的应用潜力。

A04-65

低能量无序度环状受体光伏材料与器件

袁俊*

中南大学

近年来,具有低能量无序度的 A-DA'D-A 型受体材料出现与发展推动了有机太阳能电池(OSCs)效率的快速提升。迄今为止,基于这类小分子受体的单结 OSCs 能量转化效率已超过 19%。除了效率的提升,器件稳定性也是亟待解决的关键问题之一。基于此,本文选择 A-DA'D-A 型受体(A)为前驱体,通过使用不同功能化 π 桥将两受体 A 相连,制备出具有确定分子量(>3.5kDa)的 A- π -A 型“准大分子”受体。器件结果表明,分子量的提升不仅增加了器件稳定性,且不会对器件性能造成衰减。随后,通过精准调控共轭 π 桥长度,构建出平面性更优异的准大分子受体 QM-2T,在保持高器件稳定的同时实现了电流的显著提升。为进一步调控共混薄膜热力学弛豫过程,构建出具有更高分子量的三臂星型准大分子受体 TBT。分子量的增加提高了材料的 Tg,抑制了共混薄膜中的热力学弛豫及器件的电压损失,最终实现了效率超 18% 且稳定的电池器件。与此同时,为进一步抑制分子振动,降低准大分子的结构上的无序度,申请人构筑了具有多重 D-A 作用的共轭环状准大分子受体 RCM。由于环状的刚性抑制了分子振动,RCM 热分解温度接近 400°C,所制备的器件在 80°C 连续加热 600h,仍可维持其初始效率 92% 以上。该系列准大分子材料研究为实现高效稳定的有机太阳能电池提供了新思路 and 材料体系。

A04-66

面向高性能有机光伏电池的材料聚集行为调控和匹配规则

李荪荪*

南京工业大学

在有机光伏电池中,发展高性能活性层体系,即电子给、受体组合,对于能量转换效率的提升具有重要意义。目前,聚合物给体的溶液聚集效应被广泛认为是构筑理想活性层形貌的关键因素,但其内在机制仍不清晰。我们围绕代表性给、受体材料开展了系统研究,发现聚合物的溶液聚集效应与其成膜过程中的聚集动力学存在密切关联,且给、受体在成膜过程之间的聚集演变竞争决定了共混薄膜的相分离特征,进而影响器件的光伏性能。[1-3]基于分子设计来精细调控给体和受体的聚集行为,共混体系的相分离尺度和光伏参数呈现显著变化趋势,证明了给、受体之间需要形成匹配的聚集能力。我们进一步发现,这一机制也可用于非卤加工溶剂的筛选。当采用新型非卤溶剂/添加剂组合对活性层体系的多尺度形貌结构进行优化,相关器件的效率和稳定性获得了协同提升。

[1] L. Xu, S. Li, W. Zhao, Y. Xiong, J. Yu, J. Qin, G. Wang, R. Zhang, T. Zhang, Z. Mu, J. Zhao, Y. Zhang, S. Zhang, V. Kuvondikov, E. Zakhidov, Q. Peng, N. Wang, G. Xing, F. Gao, J. Hou, W. Huang, J. Wang, *Advanced Materials* 2024, 36, 2403476.

[2] L. Xu, Y. Xiong, S. Li, W. Zhao, J. Zhang, C. Miao, Y. Zhang, T. Zhang, J. Wu, S. Zhang, Q. Peng, Z. Wang, L. Ye, J. Hou, J. Wang, *Advanced Functional Materials* 2024, 34.2314178.

[3] S. Li, Y. Ding, L. Xu, W. Zhao, J. Zhang, J. Qin, Y. Zhang, J. Zhao, C. He, Q. Peng, J. Hou, Chinese Journal of Chemistry 2022, 40, 2867-2874.

A04-67

基于水/醇的纳米颗粒墨水用于有机太阳能电池的加工

谢湛*

深圳技术大学

有机太阳能电池 (OPV) 具有质量轻、半透明、高柔韧性等优势, 被认为是未来能取代硅太阳能电池的新型光伏电池。然而, 器件加工过程中所使用的卤代溶液会造成严重的环境污染并将成为 OPV 产业化的阻碍之一。我们通过引入水/醇等绿色溶剂作为加工溶剂, 将疏水的有机半导体材料分散在极性的水/醇中制成纳米颗粒分散液, 最终制成基于纳米颗粒的 OPV 器件。此外, OPV 活性层通常是给-受体混合的体异质结结构, 溶液加工过程中导致的内部形貌的不可控始终阻碍着器件性能的进一步提升。我们通过对纳米颗粒合成过程的精细调控来间接控制活性层内部各组分达到最佳的相分离和分子取向, 实现有计划、有规律地控制器件性能的目的。最终, 实现用卷对卷的大面积印刷工艺制备纳米颗粒 OPV。该项目的实施能更加系统地揭示 OPV 中各组分形貌与器件性能的关系。绿色溶剂的使用能降低 OPV 的加工成本, 为实现其大面积印刷和日常应用打下基础。

A04-68

非中心对称稠环电子受体

高威*

华侨大学发光材料与信息显示研究院

通过将梯形给电子核的对称性打破设计合成了一系列具有非中心对称结构的稠环电子受体, 探究了分子结构, 材料性质, 光活性层形貌, 光电转换过程和器件性能之间的关系, 并提出了稠环电子受体的非对称分子设计策略: (1) 非对称结构赋予了稠环电子受体较大的偶极矩, 偶极-偶极相互作用增强了分子间 $\pi-\pi$ 堆积强度, 偶极矩的矢量方向诱导分子形成更有利的反平行堆积, 提高了分子间 $\pi-\pi$ 堆积的有序性, 从而优化了活性层的微观纳米形貌, 提高了载流子迁移率和平衡传输, 最终将 A-D-A 型稠环电子受体的填充因子提高到 78.9%; (2) 非对称结构允许更加精细的分子结构修饰和性质调控, 利用非对称共轭延长和非对称同分异构体策略实现了 A-DA' D-A 型稠环电子受体分子构型的全构建, 阐明了稠环电子受体分子构型对器件性能的影响, 并发现偶极矩可以提高活性层的介电常数, 降低激子结合能, 抑制电池的非辐射能量损失; (3) 非对称结构可以实现稠环电子受体的二聚体堆积种类多样性, 通过降低部分二聚体的电子空穴轨道重叠, 提高材料本征光生电荷产生的能力, 契合平面混合异质结器件, 使有机太阳能电池实现了超过 29 mA cm⁻² 的短路电流和 19% 的能量转换效率。

A04-69

用于有机太阳能电池的新型受体材料的结构与能级调控

邹博森*

香港理工大学

有机太阳能电池作为一种新型太阳能电池, 具有质量轻、成本低、易于大面积制备等突出优势, 在学术界和工业界引起了广泛关注。近年来, 聚合物太阳能电池能量转换效率提高迅速, 单结器件效率值已超过 19%。在材料设计中, 开发高性能受体材料成为提高有机光伏器件效率与稳定性的重要策略之一。为此, 我们通过在 Y 系列受体分子的侧链与末端处引入给电子单元, 从而削弱了受体分子内的电荷转移效应, 从而增强其能量带隙, 并将其应用于高效有机光伏体系的构建。其中, 基于 PM6: PYFO-V 体系的光电器件在 LED 光照条件下产生了 27.1% 的最高室内光电转换效率, 这是迄今为止报道的二元室内全聚体系的最高值之一; 此外, 采用 BTP-2FC10 和 BTP-eC9 两种非富勒烯受体的三元有机光伏体系取得了太阳光下 19.34% 的高效率。该系列工作开辟了未来中带隙受体材料分子设计的新思路, 而且为开发高效率太阳能电池提供了材料支持。

A04-70

高性能全聚合物有机太阳能电池

孙瑞*

武汉大学

有机光伏电池 (OPV) 因其质轻、多彩、柔性等优越特性, 展现出广阔的应用前景。得益于非富勒烯小分子受体材料的发展, 效率达到 20% 以上。然而, 目前面临“基于小分子受体的活性层受热易相变”的科学问题, 使得稳定性与实际应用需求仍存在一定差距。高分子受体材料因其较大的分子体积和较高的玻璃化转变温度, 在抑制分子迁移、提升活性层稳定性方面展现出显著优势, 是改善活性层稳定性的理想研究载体。汇报人创制了系列高性能窄带隙聚合物受体材料: 拓展了窄带隙聚合物受体材料体系, 拓宽了其吸收光谱范围, 构筑了高效且稳定的全聚合物活性层体系, 为解决“活性层受热易相变”的关键难题提供有效解决方案。发展了活性层形貌物理重构策略: 开发了逐层刮涂成膜工艺, 实现了全聚合物体系活性层垂直相分布的精准调控, 克服了全聚合物体系成膜过程相域分离过大的问题。解决了聚合物受体批次敏感性问题: 开发了基于荧光光谱参数化的聚合程度分析技术, 实现了对聚合过程中材料分子量的实时监测与控制, 解决了中低分子量聚合物批次重复性与宏量制备差异问题。

A04-71

不对称受体光伏材料实现高效有机太阳电池

郭静*

河北大学

高性能有机太阳电池 (OSCs) 高度依赖于理想的光吸收, 适配的能级以及良好的共混形貌三者相辅相成。本文聚焦于不对称分子结构设计合成了一系列受体光伏材料: 基于不对称的卤素端基合成了两个结构相似, 分子骨架不同的聚合物小分子受体 (PSMA) PYFC1-T 和 PYF&PYC1-T, 随后分别将其作为第三组分掺入到 PM6:PY-IT 二元共混物中, 成功构建了三元全聚合物太阳电池 (a11-PSCs)。得益于 PYFC1-T 与 PY-IT 之间良好的相容性, 构建的 PM6:PY-IT: PYFC1-T (10 wt%) 三元 a11-PSC 具有更高和更平衡的电荷迁移率, 同时能有效抑制电荷复合, 因此获得了更高的 JSC 和 FF, 最终获得了 18.12% 的能量转换效率 (PCE), 远高于 PM6:PY-IT 二元 a11-PSCs (PCE 为 16.09%)。此外, PYFC1-T 第三组分的加入有助于优化给/受体共混形貌, 使得基于 PM6:PY-IT:PYFC1-T 的三元全聚合物太阳电池表现出更优越的光稳定性。该工作强调了聚合物分子骨架在调制优化 PSMA 形态, 提高 a11-PSCs 器件性能方面的重要具有意义。此外, 降低有机太阳电池 (OSCs) 能量损失, 特别是非辐射复合损失 (ΔE_{nr}), 也是当前的研究重点。而不对称受体分子在保持高效电荷收集的同时, 对降低器件能量损失也发挥着关键作用。为此, 我们提出了一种不对称分子设计策略: 通过开发基于烷基/噻吩烷基杂化侧链的新型不对称小分子受体 (BTP-C11-TBO 和 BTP-B0-TBO), 精准调控分子间相互作用, 旨在提升材料发光效率并降低能量损失。理论计算与实验结果共同表明, 此类不对称小分子受体能有效抑制电子-振动耦合, 显著降低 ΔE_{nr} 。此外, 分子的不对称性促使给体/受体 (D:A) 界面形成多样化的构型及相应的界面能级分布, 使得电荷转移态 (CT state) 的能量更接近于具有强吸收 (和发射) 特性的局域激子态 (LE state) 能级。该特性在保障高效激子解离的同时, 实现了较低的 ΔE_{nr} 。最终, 基于 PM6: BTP-B0-TBO 的有机太阳电池实现了 19.76% 的能量转换效率。该工作不仅为抑制有机太阳电池的非辐射能量损失提供了新的分子设计思路, 也为进一步提高器件能量转换效率开辟了新的途径。

A04-72

齐聚物策略构建高效有机太阳电池: 能级设计与形貌调控的协同效应

夏浩*

香港理工大学

摘要:

有机太阳电池 (OSCs) 因其轻质柔性等特点备受关注, 但能量损失问题制约其发展。本研究通过创新分子设计, 系统探索了齐聚物策略在高效 OSCs 中的应用。首先, 设计合成了 D-A-D-A-D 和 A-D-A-D-A 构型齐聚物 (5BDTBDD 和 5BDDBDT), 作为第三组分引入 PM6:BTP-B04C1 体系。研究发现, 尽管其 HOMO 能级高于主给体, 但可显著降低非辐射复合损失, 实现 17.5% 的 PCE, 突破了传统能级匹配理论的限制。进

一步开发了 5BDDBDT-F 和 5BDDBDT-C1 齐聚物, 通过调控活性层聚集动力学, 采用绿色溶剂制备出 PCE 达 18.43% 的三元器件, 其 1cm^2 空气刮涂器件效率达 17.06%。系统研究不同构型齐聚物 (3BDTBDD、DRCN5BDT 等) 发现, DRCN5BDT:Y6 二元器件效率达 14.04%, 是当时二元齐聚物 OSCs 最高效率之一。最后通过模块化设计 5BDT-F 和 5BDT-C1 齐聚物, 发现第三组分 HOMO 能级对 OSCs 的 VOC 影响微弱, 而给-受体材料之间的相容性起主导作用, 最终实现 20.1% 的三元器件效率 (认证效率为 19.76%), 为理解 OSCs 工作机制提供了新视角。本研究为 OSCs 的能量损失控制和产业化应用提供了系统的解决方案。

A04-73

马万里*

苏州大学

基于低温溶液法制备的量子点太阳能电池具有制备成本低、易于批量化生产和稳定性优异等特点, 引起了人们的极大关注。特别是近年来钙钛矿量子点材料的出现, 将单结量子点电池的效率提升到超过 18%。与有机和钙钛矿薄膜材料相比, 量子点成膜过程中不需要精细的结晶性和形貌调控, 并且具备更加优异的稳定性, 在印刷大面积器件、多层器件结构构筑和柔性器件制备方面均有潜在优势。本报告将介绍我们课题组在 PbS 和新型钙钛矿两类量子点太阳能电池方面的研究进展。包括: 1) 一步法制备 PbS 量子点墨水, 大幅降低量子点墨水制备成本、简化器件制备工艺; 2) 通过钙钛矿量子点表面钝化调控, 提升量子点薄膜的电荷传输, 实现高效稳定的光伏器件效率。

参考文献:

1. X. Zhang, H. Huang, L. Jin, C. Wen, Q. Zhao, C. Zhao, J. Guo, C. Cheng, H. Wang, L. Zhang, Y. Li, Y. Maung Maung, J. Yuan*, W. Ma*, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2023, 62, e202214241.
2. Y. Liu, H. Wu, G. Shi, Y. Li, Y. Gao, S. Fang, H. Tang, W. Chen, T. Ma, I. Khan, K. Wang, C. Wang, X. Li, Q. Shen, Z. Liu*, W. Ma*, *Adv. Mater.* 2023, 35, e2207293.
3. G. Shi, H. Wang, Y. Zhang, C. Cheng, T. Zhai, B. Chen, X. Liu, R. Jono, X. Mao, Y. Liu, X. Zhang, X. Ling, Y. Zhang, X. Meng, Y. Chen, S. Duhm, L. Zhang, T. Li, L. Wang, S. Xiong, T. Sagawa, T. Kubo, H. Segawa, Q. Shen, Z. Liu*, W. Ma*, *Nat. Commun.* 2021, 12, 4381.
4. Y. Wang, Z. Liu, N. Huo, F. Li, M. Gu, X. Ling, Y. Zhang, K. Lu, L. Han, H. Fang, A. G. Shulga, Y. Xue, S. Zhou, F. Yang, X. Tang, J. Zheng, M. Antonietta Loi, G. Konstantatos, W. Ma*, *Nat. Commun.* 2019, 10, 5136.
5. J. Yuan, X. Ling, D. Yang, F. Li, S. Zhou, J. Shi, Y. Qian, J. Hu, Y. Sun, Y. Yang, X. Gao, S. Duhm, Q. Zhang*, W. Ma*, *Joule* 2018, 2, 2450-2463.

A04-74

纳米晶激光植入钙钛矿光伏

王洪强*

西北工业大学

钙钛矿薄膜的表面及晶界工程是抑制钙钛矿活性层降解和表面/晶界载流子复合的关键, 更是推动钙钛矿太阳能电池光电转换效率和长期稳定性提升亟待解决的重要途径。本报告基于液相脉冲激光辐照技术, 通过在反溶剂中辐照一系列靶材, 获得了常规条件不易获得的系列亚稳纳米晶, 如氯功能化碳点、氟化金簇、多元金属氧化物纳米晶、液态金属超纳颗粒等。并通过反胶体溶液法成功将所得亚稳纳米晶植入钙钛矿薄膜表面和晶界, 构筑了一系列纳米晶植入多晶钙钛矿表面/晶界的光活性层, 创制了异于原子掺杂的、母钙钛矿体材料电子结构及载流子动力学调控的独特有效途径。获得了具有极高性能的亚稳纳米晶植入钙钛矿太阳能电池。

A04-75

量子点表面特性调控原理及其光伏性能

张晓亮*

材料科学与工程学院, 北京航空航天大学, 北京 100191, 中国

量子点纳米材料具有光谱可调、可溶液加工和与柔性基板兼容性高等特点，被广泛用于太阳能电池、发光二极管和光电探测器等光电器件的研发。通过有效调控量子点表面特性、器件结构和界面物理特性等，量子点太阳能电池的光电能量转换性能和稳定性均得到了大幅提升。量子点表面特性直接决定了量子点太阳能电池器件的光电能量转换性能和稳定性，因此通过有效控制量子点表面特性可以减少量子点太阳能电池器件中的电荷复合，实现提高器件中载流子的提取效率，最终提高器件的光电能量转换性能。本文将介绍钙钛矿量子点表面特性调控的方法与原理，通过对钙钛矿量子点表面晶格钉扎和表面缺陷钝化等方法提高材料的光电物理性能和稳定性，实现提高钙钛矿量子点太阳能电池器件的光伏性能和稳定性，探讨钙钛矿量子点表面特性对太阳能电池器件工作过程的影响原理，并对存在的挑战和机遇进行探讨。

关键词：量子点，太阳能电池，光伏性能，光电材料，能量转换

参考文献：

- [1] G. Wang, Y. Sun, M. Zhang, X. Mei, J. Qiu, Z. Sun, X. Zhang*, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2025, 64, e202416747.
- [2] J. Chen, L. Ye, T. Wu, Y. Hua, X. Zhang*, *Adv. Mater.* 2024, 36, 2404495
- [3] M. Zhang, Q. Gao, X. Mei, J. Qiu, R. Zhuang, Y. Hua, Z. Sun, X. Zhang*, *Energy Environ. Sci.* 2024, 17, 2145.
- [4] S. Xiao, X. Mei, X. Zhang*, *Energy Environ. Sci.* 2024, 17, 5756.
- [5] D. Jia, J. Chen, R. Zhuang, Y. Hua, X. Zhang*, *Adv. Mater.* 2023, 35, 2212160.
- [6] J. Chen, D. Jia, R. Zhuang, Y. Hua, X. Zhang*, *Adv. Mater.* 2022, 34, 2204259.
- [7] D. Jia, J. Chen, J. Qiu, H. Ma, M. Yu, J. Liu, X. Zhang*, *Joule* 2022, 6, 1632.
- [8] D. Jia, J. Chen, R. Zhuang, Y. Hua, X. Zhang*, *Energy Environ. Sci.* 2022, 15, 4201.
- [9] D. Jia, J. Chen, X. Mei, W. Fan, S. Luo, M. Yu, J. Liu, X. Zhang*, *Energy Environ. Sci.* 2021, 14, 4599.
- [10] J. Chen, D. Jia, E. M. J. Johansson, A. Hagfeldt, X. Zhang*, *Energy Environ. Sci.* 2021, 14, 224.

A04-76

添加剂制备高性能 NiO_x 基反式钙钛矿太阳能电池研究

李炫华

西北工业大学

基于 NiO_x 基空穴传输材料的反式钙钛矿太阳能电池是当前该领域的重要研究方向，如何解决 NiO_x 固有电导率低，能带与钙钛矿活性层不匹配，SAM 分子在 NiO_x 表面覆盖率不高的问题是当前的研究难点。报告重点介绍团队近年来通过在 NiO_x 中引入离子液体提高其导电性并减小杂质，通过引入功能性分子提高 SAM 分子在 NiO_x 表面的覆盖度等策略，最终器件效率提升到 26% 以上，器件在 55° C、连续光照下，最大功率点连续追踪 1000 小时后，保持初始效率 90% 以上，表现出优异的操作稳定性。

A04-77

钙钛矿光生载流子动力学

龙闰*

北京师范大学

非辐射电子-空穴复合是光电转化过程中电荷和能量损失的重要途径。发展和采用非绝热动力学模拟方法，构建机器学习模型，我们在原子尺度系统地研究多种因素影响钙钛矿光生载流子复合动力学，预测的电荷和能量转移、弛豫过程变化源于弹性与非弹性电声相互作用以及晶格热紊乱，并提出了合理的缺陷钝化策略，实现了光生载流子动力学过程的理性调控，获得的动力学的详细信息为设计高性能的钙钛矿太阳能电池提供了有益参考。

A04-78

钙钛矿太阳能电池表界面精准调控

陈江照

昆明理工大学，材料科学与工程学院，云南省昆明市五华区学府路 253 号，650093

开发清洁可再生能源是实现“碳达峰、碳中和”战略目标的重要途径。面向国家对再生清洁能源的

重大战略需求，陈江照教授团队紧紧围绕设计和构筑低成本、高效率和高稳定性钙钛矿太阳能电池目标，针对表界面缺陷、表界面离子迁移、表界面应变和界面能级失配导致电池光电转换效率和稳定性降低等关键科学问题，提出了钙钛矿异质结多维度原位构筑策略、钙钛矿表界面亚分子尺度精准调控策略和钙钛矿表界面离子定向修饰策略，阐明了相关表界面调控机制，实现钙钛矿薄膜表界面光电性质的定向修饰与精准调控，获得了高性能钙钛矿光伏器件，3次打破反式无甲铵钙钛矿电池世界纪录效率，5次创造真空闪蒸技术钙钛矿电池世界纪录效率，为钙钛矿光伏技术的商业化应用奠定了坚实的基础。

A04-79

钙钛矿薄膜体相及界面能量损失研究

吴义辉*

四川大学

近年来，钙钛矿太阳能电池在全球光伏同仁的努力下，持续创造世界纪录，目前小面积认证效率已突破 26%，逐渐接近晶硅电池的最高效率。也有不少企业开始关注并启动了钙钛矿组件的研发工作，然而，其实用化发展仍然面临不少问题，如稳定性、面积放大后效率衰退明显等。为此，我们重点围绕钙钛矿活性层、电荷传输层及其界面开展了系列研究，初步取得了一些成果：如开发新型无机空穴传输材料、创新空穴传输层薄膜制备方法，获得效率大于 26%反式钙钛矿电池；通过构建多功能界面桥，有效调控自组装单分子空穴传输层的分子堆积及空穴传输性能，并改善后续钙钛矿薄膜的结晶过程、抑制界面非辐射复合，将基于多元阳离子钙钛矿的反式平面电池效率提高到 26.5%以上；同时 1 cm² 开孔面积的大面积电池效率突破 25%，5*5 cm² 基底的微型模组效率接近 23%等。这些研究结果为高效、高稳定钙钛矿器件的发展提供了新的研究思路和技术支撑。

A04-80

柔性铜锌锡硫硒薄膜太阳电池界面处理及作用机制

程树英*

福州大学物理与信息工程学院，福建，福州

柔性 Cu₂ZnSn(S,Se)₄ (CZTSSe) 太阳电池因材质柔软、可弯折性强等特性，在众多领域拥有极大的应用潜力。CZTSSe 吸收层分别与缓冲层 CdS 和 Mo 箔衬底形成异质结前界面和背界面，界面传输、复合、能级结构对 CZTSSe 太阳电池性能具有重要影响。针对背界面势垒问题，将 CuO 介质层成功地引入到 CZTSSe 太阳电池的背界面，有效阻隔 Se 元素向钼背电极扩散，降低了 MoSe₂ 层厚度，并且界面缺陷密度降低近 50%，有效地降低了载流子复合，实现太阳电池效率的提升。针对异质结界面的缺陷和晶格失配问题，研究了氧掺杂对柔性 CZTSSe 太阳电池内非辐射复合缺陷的钝化作用及载流子输运的影响。采用紫外臭氧处理技术成功实现对 CZTSSe/CdS 异质结的氧掺杂，获得了吸光率和缺陷浓度均降低的 CdS 薄膜，变温及瞬态光电测试表明氧掺杂后的界面实现了良好的能带排列，PN 结内建电势增强，载流子的分离和收集能力被有效增强，最终柔性器件的光电转换效率达到 11.21%。

A04-81

硒硫化锑光伏材料与器件

陈涛

中国科学技术大学

硒硫化锑[Sb₂(S,Se)₃]是一种新型光伏材料，具有如下特性：(i)带隙在 1.1-1.8 eV 内连续可调，理论光电转换效率为 32%，同时可以用于制作全锑基叠层太阳能电池；(ii)鉴于其稳定、可柔性、无毒、元素储量丰富等特点，在高功率重量比大面积低成本光伏发电及单兵携行电源等应用领域具有无可替代的优点。作为一种新兴光伏材料，对其基本性质的理解以及构建合适的器件结构以提高光电效率是重要的课题。本报告主要介绍我们课题组近期在制备硒硫化锑太阳能电池的所开展的工作，包括界面材料及界面诱导晶体取向的调控方法、水热沉积制备高质量硒硫化锑薄膜、以及点缺陷及电压损失机制的研究。通过高质量薄膜最终实现了>10.0%的光电转换效率突破，使之成为继有机/无机杂化钙钛矿之后又一效率超过 10%的新型光伏材料。

关键词：硒硫化锑，低维半导体，薄膜制备，光电转换

参考文献:

- [1] Nat. Energy, 2020, 5, 587-595.
- [2] Nat. Commun., 2021, 12, 3260.
- [3] Adv. Mater., 2023, 35, 2208564.
- [4] Adv. Mater., 2022, 34, 2200723.
- [5] Angew. Chem. Int. Ed., 2025, e202525639.
- [6] Adv. Mater., 2024, 36, 2404826.

A04-82**硫化锑太阳能电池及其室内光伏应用**

周儒

合肥工业大学 电气与自动化工程学院

室内光伏能够室内照明中收集环境光能,为低功耗物联网终端节点提供可持续电力供给,是实现自驱物联网的有效解决方案之一。硫化锑(Sb₂S₃)半导体具备优异的材料和光电性能,兼具环境友好、价格低廉、熔点较低、兼容柔性衬底等优势。其带隙宽度约为 1.75 eV,非常适合用于室内光伏。然而,目前硫化锑太阳能电池器件效率还亟需进一步提升,尤其是开路电压(VOC)损失较大。有鉴于此,我们从载流子管理的角度出发,探索了一系列器件性能提升策略以改善载流子输运、抑制电荷复合,包括薄膜晶粒工程、薄膜取向工程等[1-4]。从而实现 Sb₂S₃ 太阳能电池性能提升,并获得超过 800mV 的 VOC 记录值。进一步,研究了 Sb₂S₃ 太阳能电池的室内光伏性能及其在自驱物联网供能系统中的应用。

关键词: 薄膜太阳能电池; 硫化锑; 开路电压; 室内光伏; 物联网

参考文献:

1. Xiao Chen,# Xiaoxuan Shu,# Jiacheng Zhou, Lei Wan, Peng Xiao, Yuchen Fu, Junzhi Ye, Yi-Teng Huang, Bin Yan, Dingjiang Xue, Tao Chen, Jiejie Chen,* Robert L. Z. Hoyer* and Ru Zhou*, Additive engineering for Sb₂S₃ indoor photovoltaics with efficiency exceeding 17%, Light: Science & Applications, 2024, 13, 281.
2. Xinnian Liu,# Zhiyuan Cai,# Lei Wan, Peng Xiao, Bo Che, Junjie Yang, Haihong Niu, Huan Wang, Jun Zhu, Yi-Teng Huang, Huimin Zhu, Szymon J. Zelewski, Tao Chen,* Robert L. Z. Hoyer,* Ru Zhou,* Grain Engineering of Sb₂S₃ Thin Films to Enable Efficient Planar Solar Cells with High Open-Circuit Voltage, Advanced Materials, 2024, 36, 2305841.
3. Wentao Wu, Bo Tang, Lei Wan, Xiaoli Mao, Haolin Wang, Guoqing Tong, Tao Chen, Ru Zhou*. Enhanced performance of close-spaced sublimation processed antimony sulfide solar cells via seed-mediated growth, Advanced Science, 2024, 2409312.
4. Ru Zhou,* Bo Tang, Qiang Xie, Wentao Wu, Lei Wan, Szymon J. Zelewski, Jun Zhu, Orientation control of close-spaced sublimation processed Sb₂S₃ thin films for efficient and stable planar solar cells, Applied Physics Letters 2024, 124, 233903.

A04-83**硫化锑薄膜太阳电池及其光电应用**

邓辉*

福州大学物理与信息工程学院, 福建, 福州

硫化锑由于其高吸收系数、低成本和环保特性,越来越受到人们的关注。硫化锑薄膜光伏器件由于其低成本和环保性,在光伏市场上具有巨大的应用前景。在硫化锑太阳电池方面,开发全无机结构,优化无机空穴传输层,以改善背接触并减少界面复合损失,并提出了一种基于钼箔的底衬结构的柔性太阳能电池,通过对钼箔硒化,在背面界面引入硒化钼层,以匹配能级并避免复合损失,实现良好的弯曲性。此外,开发了一种硫气氛再结晶策略,通过快速热蒸发方法从非晶硫化锑薄膜中获得致密均匀的硫化锑膜,通过两步退火策略,实现了 8.2% 的光电转换效率。硫化锑太阳电池被应用于光电探测器中,并通过入光面聚二甲基硅氧烷(PDMS)陷光,实现了自供能的弱光探测,探测率达到 10¹³ Jones 以上;将光伏器件应用于

可见光通信的接受端，实现了音频实时传输的通信应用。

A04-84

铜锌锡硫薄膜太阳能电池及类光伏结构薄膜光电极研究

陈烁*、赵珺、苏正华、梁广兴

深圳大学

铜锌锡硫(Cu₂ZnSnS₄, 简称 CZTS) 凭借原材料储量丰富、环境友好、理想带隙匹配高吸光系数、光电性能优异且稳定等优势，在新型薄膜太阳能电池及太阳能光解水制氢薄膜光电极研究领域引起广泛关注。但是，目前 CZTS 薄膜太阳能电池、薄膜光电极的最高光电转换效率与其理论效率相比存在明显差距。进一步分析，CZTS 光吸收层体内高浓度深能级缺陷以及 CZTS/CdS 异质结界面非理想的能带匹配是限制效率提升的关键。本课题组针对上述问题开展集中研究，相关工作取得系列特色研究成果。

对于 CZTS 薄膜太阳能电池，采用绿色稳定乙二醇甲醚溶剂体系的前驱体溶液旋涂结合硫化热处理自组装生长 CZTS 薄膜。创新设计在富氧环境下对 CZTS/CdS 异质结进行热处理，引入活性氧占据硫空位位点，实现深能级硫空位缺陷的有效钝化。同时，气氛热处理诱发阳离子内部迁移，促使异质结能带构型从非理想的悬崖型转为理想的类长钉型，从而大幅度抑制太阳能电池内部的载流子非辐射复合。此外，氧气氛贡献的 Na₂O_x 和 SnO_x 可降低晶界势垒，进一步提高载流子输运效率。最后，绿色溶液法制备的 CZTS 薄膜太阳能电池效率提升至 11.89%，经国家光伏产业计量测试中心(NPVM)认证的效率达 11.51% [1]，代表目前已报道无合金掺杂的 CZTS 电池的最高效率值。

对于 CZTS 薄膜光电极，创新性提出一种有效的前驱体种子层工程(PSLE)技术，成功优化 CZTS 薄膜的晶体生长，获得大晶粒紧密堆积且低缺陷密度的光吸收层。同时，延长了载流子寿命，降低了界面缺陷浓度，调制了异质结能带排列，整体优化载流子动力学特性。据此构建的类光伏结构 Mo/CZTS/CdS/TiO₂/Pt 光电极在酸性条件下达到最高的 9.91% 的半电池太阳能-氢能(HC-STH)转换效率和 29.44 mA cm⁻² 的光电流密度，以及出色的稳定性。该光电极在天然海水中也表现出良好的性能，对应 HC-STH 转换效率为 2.56%。最后，构建的 CZTS-BiVO₄ 串联电池实现无外加偏压 2.20% 的可见 STH 转换效率 [2]。

参考文献：

[1] T. Wu#, S. Chen#, Z. Su#, Z. Wang#, P. Luo, Z. Zheng, J. Luo, H. Ma, X. Zhang, G. Liang*, Nat. Energy 2025, 10, 630-640.

[2] M. Abbas, S. Chen*, Z. Li, M. Ishaq, Z. Zheng, J. Hu, Z. Su, Y. Li, L. Ding*, G. Liang*, Nano-Micro Lett. 2025, 17, 257.

A04-85

非钢柔性透明导电电极及其应用

高进伟

赣南师范大学物理与电子信息学院

透明电极兼备高导电和高透光，是光伏、光电探测、发光二极管、智能窗等光电子器件的核心元件。近些年，随着柔性光电子器件的快速发展，对透明电极的机械柔韧性提出新的要求。当前，主流氧化铟锡(ITO)透明电极具备良好的可见光透过率和较低的电阻率，但受限于材料和制备工艺的限制，ITO 质脆易碎，无法适应柔性电子器件。另外，由于铟资源短缺，ITO 的成本和可持续性都存在隐忧。本研究通过对材料、微结构，及其光电界面的创新设计，开发了系列高透光、低电阻、高柔性及其高化学稳定性透明电极薄膜，特别是首创龟裂光刻和仿生技术制备“局部无序、整体均匀和多级分形”微纳金属网络透明导电电极。最后，基于自主开发的卷对卷中试设备和印刷工艺，完成宽幅 1020 mm 金属网络电极卷材中试生产，并实现高性能超薄金属微米金属片材回收，中试产品性能优异。大面积触控面板、车载功能膜以及智能窗正在适配实验中，有望规模量产。

A04-86

生长动力学调控及深能级缺陷钝化实现高效率硒化铋太阳能电池

莫安明、李志强*

河北大学物理科学与技术学院

Sb₂Se₃ 光伏器件效率受限于异质结界面与体相内严重的载流子复合, 根源在于材料本身的低缺陷形成能及准一维结构导致的高密度深能级缺陷(如硒空位 V_{Se}、锑硒反位 Sb_{Se})。如何通过界面工程与缺陷钝化提升器件性能, 是该领域的核心挑战。

针对背接触界面特性, 我们应用原位硒化工艺对钼(Mo)及钨(W)背电极表面进行了处理, 诱导形成 MoSe₂ 或 WSe₂ 界面层。这一处理促使后续生长的 Sb₂Se₃ 从[hk0]取向薄膜转变为[hk1]方向生长的纳米棒阵列结构, 不仅消除了背电极与吸收层间的肖特基势垒, 增加背接触界面欧姆接触, 提升载流子收集效率, 还通过纳米棒阵列的粗糙表面增强光散射, 降低器件反射率, 实现准全向光吸收。此外, 在吸收层与缓冲层间引入原子层沉积的超薄 TiO₂ 层, 有效抑制了 Sb₂Se₃ 在 CdS 缓冲层制备过程中的溶解, 并减少界面漏电通道。器件填充因子达 70.3%, 短路电流密度 32.58 mA/cm², 光电转换效率(PCE)提升至 9.2%[1]。

为解决 Sb₂Se₃ 传统制备工艺中缺陷控制的难题, 我们开发了射流气相沉积(IVD)技术。该技术通过衬底精准控温实现 Sb₂Se₃ 沿(001)方向的择优生长, 形成(Sb₄Se₆)_n 链状结构垂直于衬底堆叠的高质量薄膜。与共蒸发、近空间升华法相比, IVD 制备的薄膜界面缺陷与体缺陷显著减少, 载流子输运效率提升。制备出高质量沿(001)方向择优生长的 Sb₂Se₃ 薄膜, 获得了创纪录 10.12%的光电转换效率[2]。

针对高纯度源材料的成本瓶颈, 我们系统研究了不同纯度源(3N-6N)中非故意掺杂的影响。通过电感耦合等离子体质谱(ICP-MS)与第一性原理计算发现, 杂质主要通过增加缺陷密度与俘获截面而非引入新的缺陷能级影响器件性能。通过在制备过程中引入硒(Se)补偿策略, 成功抑制了本征反位缺陷 Sb_{Se} 及硅相关缺陷复合物(E3), 载流子寿命从 0.37 ps 显著提升至 3.4 ps。这一策略使使用低纯度源材料的器件 PCE 达到 10.41%[3], 为低成本高效器件制备提供了关键技术突破。

针对界面与体缺陷的协同钝化, 我们提出光退火处理策略。该工艺通过光热协同作用促进 Cd 从 CdS 缓冲层向 Sb₂Se₃ 体相扩散, 诱导异质结界面原子重排, 改善晶格匹配并降低界面缺陷密度。同时, Cd 元素替代有效钝化了体相深能级陷阱, 形成浅缺陷(CdSb)。器件并联电导降低, 载流子分离与收集效率显著提高。最终, 光退火处理的器件实现 10.58%的光电转换效率, 经独立实验室认证为 10.18%[4], 刷新了 Sb₂Se₃ 基太阳能电池的效率纪录。

本研究通过生长动力学调控与缺陷钝化的协同创新, 系统提升了 Sb₂Se₃ 太阳能电池的效率, 揭示了缺陷形成与钝化的微观机制, 为低成本、柔性光伏器件的发展提供了可扩展的技术路径。未来研究将聚焦于新型界面缓冲层开发、柔性衬底低温沉积技术, 推动 Sb₂Se₃ 太阳能电池在商业化应用中的潜力。

参考文献:

- [1] Z. Li, X. Liang, G. Li, H. Liu, H. Zhang, J. Guo, J. Chen, K. Shen, X. San, W. Yu, R. E. I. Schropp, Y. Mai, Nature Communications, 2019, 10(1): 125.
- [2] Z. Duan, X. Liang, Y. Feng, H. Ma, B. Liang, Y. Wang, S. Luo, S. Wang, R. E. I. Schropp, Y. Mai, Z. Li, Advanced Materials, 2022, 34(30): 2202969.
- [3] A. Mo, Y. Feng, B. Yang, W. Dang, X. Liang, W. Cao, Y. Guo, T. Chen, Z. Li, Advanced Functional Materials, 2024, 34(29): 2316292.
- [4] X. Liang, X. Wang, Q. Chang, B. Yang, W. Dang, Z. Zhang, Y. Guo, L. Yang, Z. Li, Energy & Environmental Science, 2024, 17(24): 9499-9508.

A04-87

水热沉积硫化锑室内光伏器件的载流子传输与缺陷性能优化

黄玉茜、余振、冯琳、尹永太、李彦磊、王刚*

信阳师范大学

硫化锑(Sb₂S₃)太阳能电池已展现出优秀的室内光伏性能, 使其成为在弱光环境中实现可持续能源收集的潜在候选材料。目前, 微量硒掺杂的 Sb₂S₃ 太阳能电池已经获得了 8.08%的认证效率, 纯 Sb₂S₃ 室内光伏器件的性能也达到了 17.55%。然而, Sb₂S₃ 室内光伏器件的载流子传输仍受限于不理想的器件结构, 缺陷性能也缺乏高效的钝化策略。本研究通过优化器件结构和开发能够实现原位钝化缺陷的新颖沉积策略, 系统优化 Sb₂S₃ 太阳能电池和室内光伏器件的性能。首先, 通过双超薄 SnO₂/CdS 电子传输层的设计, 极大地降低了短波长的寄生吸收和优化了载流子传输性能, 使得 450 nm 波长的外量子效率达到了 80%。此外, 我们通过在水热沉积中原位缓释单质硫源, 成功制备了富硫的非晶预制膜, 打破了电中性原

则对非晶硫化锑中锑硫比例的限制,在退火时实现了原位硫化作用进而高效钝化缺陷。经过上述理性的优化设计,我们在福建省计量院“国家光伏产业计量测试中心”获得了纯 Sb_2S_3 太阳能电池 7.78% 和 8.21% 的目前最高认证效率。而且,基于上述的优化策略, Sb_2S_3 室内光伏器件的性能在 3000 K@1000 lux 下的效率达到了 18.36%, 6000 K@200 lux 下的效率达到了 20.80%。本研究提供了一种新颖的沉积策略来制备硫化锑吸光层,为优化 Sb_2S_3 器件结构提供了指导,并且为原位高效钝化 Sb_2S_3 缺陷提供了指南。

A04-88

透光光伏薄膜建筑光伏一体化及其动态光热调控技术

陆阳华*

浙江大学长三角智慧绿洲创新中心

针对窗户等透明围护结构,第三代薄膜太阳能电池特别是有机太阳能电池和钙钛矿太阳能电池是下一代半透明太阳能电池最有前途的技术,其工作原理是捕获不可见的紫外线或红外线光谱中的光,同时允许可见光谱中的光通过。相比传统的太阳能电池材料比如硅、砷化镓等,虽然有机太阳能电池的效率略低,但其具备无毒、质轻、价低、透明度较高、可兼容大面积印刷等优点;而钙钛矿更是具有带隙可调、发电效率高等优势。因此在高透明度应用领域如建筑透明围护结构中,有机太阳能电池、钙钛矿太阳能电池等透光光伏薄膜具有巨大的潜力。透光太阳能电池在透过适量的可见光以满足视觉需求的同时,尽量吸收人类无法感知的紫外和近红外光,并转化为电能。以有机太阳能电池为例,活性层材料根据其吸收光谱特性可分为宽带隙(WBG)与窄带隙(NBG)体系。WBG 给体材料如 PM6 在 600 nm 附近具有强吸收峰,而 NBG 给体材料如 PCE10 的吸收峰在 700 nm 附近,结合 Y6 为代表的 NBG 非富勒烯受体实现优异近红外吸收特性。根据人眼明视觉函数曲线,人眼最敏感的光波长为 550 nm (绿光),因此通过调整活性层给受体材料,则可以获得高平均可见光透射率 AVT 和高光电转换效率 PCE。针对有机太阳能电池和钙钛矿太阳能电池,通过材料选择性设计可以实现光谱选择性,最大化透过不同波段的可见光或近红外光等,以满足不同的建筑应用场景,为建筑透光围护结构及光-热-电协同调控提供了新方案。结合电致变色 EC、热致变色 TC 等动态光热调控技术,可以实现光电转换与光热调控的多效耦合,提高太阳能综合利用效率的基础上拓展其应用场景,满足不同气候、季节和地区的建筑光伏光热一体化动态需求。

A04-89

钙钛矿光伏电池用前驱体材料标准技术规范

李林鸿、曾强、刘芳洋*

中南大学

有机无机金属卤化物钙钛矿材料凭借其光电性能优异的特点已成为新一代量产光伏电池的优良选择。钙钛矿吸光层的品质直接影响光伏器件效率、稳定性等关键指标,目前产业化的钙钛矿太阳电池核心层吸光材料仍普遍采用甲脒铅基钙钛矿材料,其前驱体为碘化铅(PbI_2)和甲脒氢碘酸盐(FAI)。然而,国内对半导体级前驱体材料需求巨大但可供应的厂家少,产量小,且现有厂家无相关标准,材料质量参差不齐。国外生产规模小、价格高,易受国际环境影响,长期稳定提供大批量材料有风险。因此,钙钛矿光伏在原材料供应方面迫切需要一个行业认同的标准。结合前期 PbI_2 和 FAI 材料性质研究工作及 PbI_2 和 FAI 材料与钙钛矿太阳电池性能之间构效关系的研究结果,本团队联合钙钛矿光伏领域多家头部企业,分别对 PbI_2 和 FAI 材料的外观、物相、溶解性、纯度和稳定性等参数做出技术规范。其中钙钛矿光伏电池用 PbI_2 团体标准已由中国光伏协会在 2024 年 3 月 10 日发布,于 2024 年 3 月 15 号实施,标准编号为 T/CPIA 0067-2024。钙钛矿光伏电池用 FAI 团体标准已在审查阶段。

A04-90

液相化学组装富勒烯材料及其钙钛矿电池研究

邢舟*¹、李姝慧²、安明伟³

1. 福建师范大学化学与材料学院

2. 广西师范大学化学与药学院

3. 福建师范大学海峡柔性电子(未来科技)学院(研究院)

富勒烯是目前钙钛矿电池中性能最好的电子传输材料。但是由于裸笼 C60 存在溶解和液

相成膜问题,高质量 C60 电子传输层薄膜通常只能通过真空热蒸发沉积得到,从而给电池制备带来高成本、高耗能等问题。相比于裸笼 C60,富勒烯衍生物 PCBM 具有更好的溶解性和液相成膜性,但是在持续高温下易发生团聚结晶,从而破坏薄膜形貌,降低电池性能和稳定性[1]。为了解决上述问题,我们基于富勒烯液相化学组装的设计理念:①设计刚性共轭单元和柔性烷基链,通过 prato 一步反应将它们模块化组装为富勒烯衍生物,研发出一系列新型富勒烯电子传输层[2],并通过调控共轭单元外围取代基,进一步增强电子传输性能和化学作用,实现 PCE>25%的高效、稳定富勒烯电子传输层[3];②设计引入碗烯添加剂至 C60 薄膜中,利用球-碗化学作用提升 C60 的液相成膜性并且优化电子转移过程,获得 22%的光电转化效率和不错的工况稳定性[4];③设计引入 n 型聚合物添加剂至 C60 薄膜中,利用球-链化学作用促进 C60 液相组装为致密、稳定、高效的电子传输层薄膜,获得>25%的第三方认证光电转化效率和不错的工况稳定性[5]。上述工作将有助于推动全溶液法制备高效、稳定的钙钛矿电池。

参考文献:

- [1] Z. Xing et al. *Small Struct.* 2022, 3, 2200012.
- [2] Z. Xing et al. *Adv. Funct. Mater.* 2021, 31, 2107695.
- [3] Z. Xing et al. *Adv. Funct. Mater.* 2025, 35, 2419582.
- [4] Z. Xing et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2023, e202305357.
- [5] Z. Xing et al. *Joule* 2025, 9, 101817.

A04-91

钙钛矿太阳能电池的进展及今后的研究课题

韩礼元

上海交通大学材料科学与工程学院

钙钛矿太阳能电池作为新型光伏技术之一,具有效率高、制造工艺简单等优势,受到了学术界与产业界的广泛关注。目前实验室器件效率已突破 27%,大面积模组效率已接近 20%。国内有许多公司正在推进钙钛矿太阳能电池的商业化。但是从商业化角度来看器件的长期稳定性及制造成本控制仍面临考验。本报告将从目前的商业化进展过程分析了钙钛矿太阳能电池模组的制造成本和度电成本,并且和目前主流的晶硅电池进行了比较。然后从成本角度提出了今后研究开发课题。介绍本课题组在提高效率和稳定性的研究进展,将讨论光热环境下的抑制离子迁移方法,引入复合电极等策略在提高稳定性的方面取得的进展。

A04-92

钙钛矿太阳能电池:空穴传输材料与埋底界面

吴永真*

华东理工大学

界面工程对提升钙钛矿太阳能电池性能与稳定性至关重要。近年来,基于化学锚定策略的界面工程,特别是自组装单分子层(SAM)型空穴选择界面材料,显著提升了倒置结构钙钛矿太阳能电池的光电转换效率。目前对于界面化学锚定组装提升期间性能的机制和原理仍然不够清晰,存在争议。本次报告主要介绍我们课题组在化学锚定组装超薄空穴传输层、钙钛矿表面锚定组装分子钝化等方面的研究工作,重点聚焦有机界面材料的分子设计和工作原理。

A04-93

铅衍生物改善钙钛矿卤素均一性研究

张渊*

北京航空航天大学

Perovskite solar cells (PSCs) with supreme opto-electrical properties and solution-processability have attracted tremendous interests. To realize state-of-the-art efficiencies in PSCs, delicate control of bandgap (E_g) is required, which generally involves using mixed halogens. This, however, can result in unfavorable phase segregation to negatively influence on the target efficiency and long-term stability. Herein, we demonstrate a viable

precursor method for preparing halide-uniform perovskites based on lead derivatives of $n\text{PbI}_2:1\text{PbXA}$. We found that $n\text{PbI}_2:1\text{PbXA}$ enables tuning the bonding preference and strength between PbI_2 and PbBr_2 in the precursor, leading to generating stable $-\text{I}-\text{Br}-\text{I}-\text{Br}-$ fragments, which eventually minimizes halide segregation in the perovskite. We have applied the precursor approach to a series of wide-bandgap mixed halide perovskites, achieving boosted efficiencies of 21.3% and 20.3% in $\text{CsPbI}_{2.8}\text{Br}_{0.2}$ (bandgap of 1.74 eV) and $\text{Cs}_{0.2}\text{FA}_{0.8}\text{I}_{1.9}\text{Br}_{1.1}$ (bandgap of 1.77 eV) based solar cells. Interestingly, we found the connection between the modified halide homogeneity and mechanical tolerance: the better the uniformity in the halide-distribution, the higher the mechanical resistance of the perovskite to compressive or bending forces. The solar cells with modified halogen uniformity exhibit impressive long-term stability, with the retention of >90% of the initial efficiencies after 1500 hours of continuous illumination under maximum power point tracking.

A04-94

钙钛矿太阳能电池的高效稳定性研究及空间应用

王爱丽¹, 李绿洲¹, 袁宁一², 丁建宁^{1,2}

扬州大学碳中和技术研究院

常州大学江苏省光伏科学与工程协同创新中心

钙钛矿太阳能电池因其优异的光电转换效率（目前已高达 27%）、制备工艺简单、可柔性化、可叠层及抗辐照性能好等优势，成为新一代光伏技术的研究热点。然而，其商业化应用仍面临稳定性不足、大面积制备性能衰减等关键挑战，特别是在极端环境（如高温、强辐射等）下的性能衰减问题，严重制约了其在空间应用中的潜力。本文分别从高效稳定的钙钛矿太阳能电池技术、大面积钙钛矿太阳能电池技术、空间应用的钙钛矿太阳能电池技术三个方面讨论了钙钛矿太阳能电池的高效稳定性研究，推动其在空间领域的广泛应用。

A04-95

实时原位观测钙钛矿材料中的缺陷和离子迁移

李澄*

厦门大学

有机无机杂化钙钛矿展示了优异的光电应用前景，但是其稳定性问题仍然是制约其应用的最大困难。特别是针对缺陷离子的研究仍处于初步阶段，缺陷离子动力学过程仍然存在争议。本研究结合物理模型讨论了离子迁移的动力学过程和造成光电器件性能衰减的机制。本研究定性地研究离子以及量化分析缺陷密度、离子迁移率和离子扩散系数等。本研究一方面为进一步提高光电器件稳定性提供方法；另一方面，对于深入理解钙钛矿的光电性能以及载流子/缺陷离子之间相互作用，具有重要的意义。

A04-96

面向环境适应性的钙钛矿光伏器件结构调控与稳定机制

李桂香*

东南大学

在推动卤化物钙钛矿太阳能电池实际应用的过程中，实现其在复杂温度环境下的高效稳定运行是一项核心挑战。实际应用中普遍存在的温度波动与热循环，会加剧钙钛矿层的结构应力与缺陷演化，进而影响器件性能与寿命。本报告围绕钙钛矿对温度变化的响应行为，探讨其晶体结构演变与器件性能退化之间的内在联系，并提出多尺度调控策略以提升器件的热环境稳定性。具体内容包括：(i) 系统研究温度应力驱动下的钙钛矿晶体相变与结构重构，揭示材料-器件之间的热稳定性耦合机制；(ii) 通过调控钙钛矿的成核与生长过程，实现结晶质量提升和应力释放路径优化，从而在变温运行下稳定光伏性能。力求为钙钛矿光伏器件的环境适应性提升与长寿命运行提供理论支撑与设计思路。

A04-97

金属卤化物钙钛矿光电化学多场耦合微环境研究

韩金宝, 赵晋津*

河北师范大学化学与材料科学学院, 河北省石家庄市南二环东路 20 号, 050024

金属卤化物钙钛矿材料由于其高光吸收系数、可调带隙、高光电转换性能、n/p 双极性电子传输性质、温和合成条件以及低成本低能耗等优点, 被薄膜太阳能电池、发光显示、信息存储和生物医药领域广泛关注[1]。然而, 在外界光场和电场作用下, 钙钛矿结构中出现了严重离子迁移、铁电极化以及电化学应变等问题, 引起结构对称性破缺[2], 导致钙钛矿材料结构稳定性和器件光电转换稳定性出现衰减。因此, 如何解决光电化学多场耦合效应引起钙钛矿微环境破坏, 我们从光致钙钛矿铁电极性翻转[3]、非极性铁电畴提高光电转换[4]、热应变和残余应变[5]对光电转换影响角度出发, 开展了一系列金属卤化物钙钛矿光电化学多场耦合微环境对器件性能影响研究[6]。

关键词: 金属卤化物团簇, 团簇晶态材料, 光电化学耦合, 结构对称性破缺

参考文献:

- [1] Jiao, Y.; Yi, S.; Wang, H.; et al. *Advanced Functional Materials* 2021, 31 (4), 2006243.
- [2] Guo, H.; Yi, S.; Yang, S.; Jiao, Y.; et al. *Advanced Functional Materials* 2023, 2214180.
- [3] Wang, P.; Zhao, J.; Wei, L.; Zhu, Q.; et al. *Nanoscale* 2017, 9 (11), 3806.
- [4] Huang, B.; Kong, G.; Esfahani, E. N.; et al. *npj Quantum Materials* 2018, 3 (1), 30.
- [5] Qin, S.; Su, H.; Jiao, Y.; et al. *Journal of Materials Chemistry A* 2025, doi:10.1039/D4TA08199D.
- [6] Qin, S.; Liu, Y.; Li, R.; et al. *Journal of Materials Chemistry A* 2024, 12, 5805.

A04-98

期刊与专刊介绍: *Transactions of Materials Research & Review of Materials Research*

张文华

云南大学

A04-99

钙钛矿光电器件的稳定化策略

姜岩*

北京理工大学 北京市海淀区中关村南大街 5 号

金属卤化物钙钛矿具有优越的光电性能, 是一类极具潜力的光电材料, 在高效太阳能电池和 X 射线探测领域有非常广泛的应用前景。近期的研究表明, 钙钛矿晶体的表界面处的缺陷会导致钙钛矿光电器件效率降低和稳定性衰减。稳定性不足已成为制约钙钛矿光电器件应用的重要瓶颈。

本次报告我们从钙钛矿太阳能电池和 X 射线探测器两个应用领域展开, 探讨如何提升多晶钙钛矿薄膜的晶界、1 晶相和层间界面的稳定性, 2,3 以及通过降低暗电流提升钙钛矿单晶的稳定性, 4-6 进而实现器件的长期运行稳定化。采用上述方法制备的钙钛矿太阳能电池的 T95 工作稳定性超过 1200 小时, 钙钛矿单晶 X 射线探测器在在累积辐照剂量达到 1944 mGyair 时 (相当于~10000 次胸部 X 线透视) 展现出杰出的运行稳定性。

参考文献

- [1]. X. Jin, S. Zhu, W. Tan, J. Tang, X. Gong, Y. Zhang, C. Zhou, Z. Tang, V. O. Nyamori, B. S. Martincigh, M. L. Davies, M. Li, T. Chen, Q. Chen, J. Hu, Q. Liang*, W. Chen*, Y. Jiang*, pH-independent lead sequestration and light management enable sustainable and efficient perovskite photovoltaics, *Energy Environmental Sciences*, 2025, 18, 1901-1910.
- [2]. T. Zhao, X. Jin, M-H. Li*, J. Li, S. Wang, Z. Zhang, P. Sun, S. Lin, Q. Chen, J-S. Hu*, Y. Li*, Y. Jiang*, π -conjugation induced in-situ nanoscale ordering of spiro-OMeTAD boosts the efficiency and stability of perovskite solar cells, *Journal of the American Chemical Society*, 2024, 146, 45, 30893-30900.
- [3]. Z. Zhang, Y. Yang, Z. Huang, Q. Xu, S. Zhu, M. Li, P. Zhao, H. Cui, S. Li, X. Jin, X. Wu, M. Han, Y. Zhang, N. Zhao, C. Zou, Q. Liang, L. Xian, J. Hu, C. Zhu, Y. Chen, Y. Bai, Y. Li, Q. Chen, H. Zhou, B. Zhang*, Yan Jiang*, Coordination engineering with crown ethers for perovskite precursor stabilization and defect passivation,

Energy Environmental Sciences, 2024, 17, 7182-7192.

[4]. C. Zhou, M.-H. Li, Y. Xiao, W. Tan, X. Jin, X. Wu, Y. Yang, S. Zhu, H. Lin, S. Lin, Q. Chen, Q. Liang*, J. Hu*, W. Zhang*, Y. Jiang*, Lead-free perovskites and derivatives enable direct and scintillation-type X-ray detection, Materials Sciences & Engineering: R Report 2023, 156, 100756.

[5]. M. Han, Y. Xiao, C. Zhou, Z. Xiao, W. Tan, G. Yao, X. Wu, R. Zhuang, S. Deng, Q. Hu, Y. Yang, Z. Tang, X. Zhou, H. Lin, H. Liang, S. Lin, Z. Mei, C. Wang, Q. Chen, W. Zhang*, Y. Jiang*, Suppression of ionic and electronic conductivity by multilayer heterojunctions passivation toward sensitive and stable perovskite X-ray detectors, Advanced Functional Materials 2023, 33, 2303376.

A04-100

基于富 π 电子添加剂工程对钙钛矿太阳能电池性能和稳定性研究

蒋晓庆*、杨广越、朱丽娜、逢淑平

中国科学院青岛生物能源与生物过程研究所光电转换与太阳能利用国家重点实验室

为了抑制缺陷态对器件性能的不利影响，添加剂工程作为一种有效策略受到广泛关注。通过在钙钛矿前驱体溶液中引入功能性添加剂，可同时实现缺陷钝化和薄膜结晶质量优化。富 π 电子添加剂以独特的化学配位能力，有效钝化薄膜中的主要缺陷，在调节晶粒生长和抑制缺陷方面表现出显著优势。此类分子不仅能够降低薄膜缺陷密度、延长载流子寿命，还可有效调控薄膜表面电子态分布。进一步的研究发现，富 π 电子添加剂在大面积钙钛矿组件中同样展现了优异的效率表现。

研究发现^[1]含羰基材料表现出强烈的结构依赖性电子供体效应，但分子空间构象对含羰基钝化剂效能的影响仍然不明确。将芳香酮的空间扭转角从扭曲构型改变为平面构型，如二苯甲酮(BP-27.2°)、蒽酮(AR-15.3°)和9-蒽酮(FO-0°)所示，会导致羰基周围的电子云密度显著增加，从而提高了钝化 Pb^{2+} 缺陷的能力。实验结果表明，PSCs 的性能依赖于芳香酮的扭转角，基于共面结构的 FO 制备的 PSCs 实现了 25.13% 的最高 PCE，并在室温下老化 2000 h 后仍保持 92% 的初始效率。

另一项研究发现^[2]含羰基的芳香醛作为钙钛矿薄膜的缺陷钝化剂，其分子结构中羰基和芳香单元的 π 电子均可与离子缺陷相互作用。通过研究联苯-4-甲醛(BPCA)、2-萘甲醛(NACA)和1-萘甲醛(PyCA)三种具有不同共轭平面的芳香醛，揭示了分子中不同部分对缺陷钝化的影响机制。研究发现，位于共轭体系中的 π 电子不会直接对缺陷进行强钝化，但会增强羰基的电子云密度，从而增强其与缺陷位点的相互作用。随着分子共轭平面的扩展，羰基的电子云密度逐渐提高，使得 PyCA 表现出最优的钝化性能。基于 PyCA 的 PSCs 实现了 25.67% (0.09 cm^2) 和 21.76% (14.0 cm^2) 的最高 PCE。

普遍的小分子添加剂容易受到钙钛矿结晶动力学的影响，导致结晶膜内分布不均。研究发现^[3]采用原位自聚合策略，使含磺酸盐的富 π 电子添加剂和配位不足的铅阳离子之间能够均匀配位。这种方法提高了钙钛矿薄膜的质量，促进了更大的晶粒畴，并促进了更有效的电荷跨晶粒边界传输。因此，钙钛矿太阳能电池(PSC)在小面积器件中实现了 25.34% 的显著功率转换效率，在 14.0 cm^2 的微型模块中实现了 21.54% 的功率转换效率。

参考文献：

[1] Xiaoqing Jiang, Lina Zhu et al. Journal of the American Chemical Society, 2024, 146, 34833-34841.

[2] Xiaoqing Jiang, Lina Zhu et al. Angewandte Chemie International Edition, 2025, 64, e202420369.

[3] Guangyue Yang, Xiaoqing Jiang et al. Advanced Materials, 2025, 2503435.

A04-101

竞争配位诱导结晶调控实现高效稳定的 Sn-Pb 钙钛矿太阳能电池

岳芳、周忠敏*

青岛科技大学

窄带隙 Sn-Pb 钙钛矿因其具有较高的理论效率极限，在太阳能电池领域显示出巨大的应用前景，并且可作为底电池的光吸收层用于组装高性能全钙钛矿叠层太阳能电池，突破单结太阳能电池的

Shockley-Queisser 极限以进一步提升效率。然而, Sn 和 Pb 钙钛矿的不同结晶速率会对 Sn-Pb 钙钛矿薄膜的质量产生不利影响, 从而制约 Sn-Pb 钙钛矿太阳能电池 (PSCs) 的性能和稳定性。与 Pb²⁺相比, Sn²⁺具有更强的路易斯酸性, 使得 Sn 钙钛矿的结晶速率要比 Pb 钙钛矿快, 这会影响 Sn-Pb 钙钛矿组分分布, 降低钙钛矿薄膜质量。因此, 改善 Sn-Pb 钙钛矿不平衡结晶速率对于获得高性能的 Sn-Pb PSCs 至关重要。

本文通过在 Sn-Pb 钙钛矿前驱体溶液中引入 5-氨基乙酰丙酸甲酯盐酸盐 (5-AH), 利用前驱体组分间的竞争性配位作用, 调节钙钛矿结晶过程, 从而改善钙钛矿薄膜的组成均匀性和结晶质量。采用热力学和分子轨道理论揭示了竞争性配位机制, 5-AH 选择性与 SnI₂ 配位形成具有较强 SnI₂-Cl 的热力学有利的 SnI₂-5-AH 加合物。这种竞争性配位有利于缓解 Sn 和 Pb 钙钛矿结晶速率失配, 有效延缓了 Sn-Pb 钙钛矿的结晶, 从而提高了钙钛矿膜组分均匀性, 降低了缺陷密度, 抑制了非辐射复合损耗。此外, Sn²⁺和 5-AH 之间的强相互作用有效抑制了 Sn²⁺的氧化。最终, 基于 5-AH 处理钙钛矿膜的器件获得了 23.76%的效率, 且展现出优异的稳定性。该工作为构建高效稳定的单结和全钙钛矿叠层太阳能电池提供了一种有效的策略。

A04-102

快速成核驱动的稳定钙钛矿太阳能电池

王贞*

南京工业大学

近些年来研究表明, 钙钛矿光伏器件稳定性差主要根源在于本征离子通过空位缺陷及晶界发生迁移, 导致晶格结构畸变、相分离等微结构损坏和钙钛矿材料失效[1-2]。此类缺陷主要来自钙钛矿结晶过程中铅卤配合物转化过程较慢, 导致无法快速成核并最终获得大尺寸钙钛矿晶粒。因此, 通过调控结晶过程抑制空位缺陷和晶界形成, 有望成为阻断离子迁移通道、提升器件稳定性的有效策略

本工作首先利用有机分子 (α -IPE) 中 C-I 键的亲核取代反应形成离子碘的过程, 精准调控钙钛矿结晶过程中铅卤配合物的转化, 原位光谱发现铅卤配合物实现了从 PbI₄ 到 PbI₆ 的逐步快速有序转化及快速成核过程。推测有机活性碘的亲核取代可有效避免 DMSO 与 Pb²⁺配位竞争, 加快了 PbI₆ 形成及成核过程, 有效抑制了缺碘铅卤配合物 (PbI₃、PbI₄) 的产生, 进而抑制了碘空位缺陷, 大幅提升钙钛矿太阳能电池热稳定性至 2800 小时 (Adv. Mater. 2024, 2401916)。为进一步抑制表界面缺陷生成, 通过下界面优化促进钙钛矿快速异质成核, 进而诱导自下而上的定向结晶生长。该策略实现了贯穿活性层的大尺寸钙钛矿晶粒, 使钙钛矿表界面缺陷态进一步降低, 最终获得稳定的钙钛矿光伏器件, 器件工作 500 小时后, 性能几乎未出现衰减 (ACS Energy Lett. 2025, 10, 2972 - 2977)。

参考文献:

[1] J. K. Zhang, X. Q. Niu, C. Peng, H. Jiang, L. Yu, H. Zhou, Z. M. Zhou, Angew. Chem. Int. Ed., 2023, 50, e202314106.

[2] Y. Zhao, I. Yavuz, M. Wang, M. Xu, J. Lee, T. Huang, R. Wang, J. Xue, S. Bae, A. Zhang, S. Choi, Y. Yin, J. Liu, T. Han, Y. Shi, W. Yang, Q. Xing, Y. Zhou, P. Shi, Y. Yang, Nat. Mater., 2022, 21, 1396 - 1402.

A04-103

钙钛矿晶体调控和光伏器件稳定性研究

李萌*

河南大学纳米科学与材料工程学院, 河南省开封市龙亭区金明大道北段, 475004

钙钛矿太阳能电池因功率转化效率高、制备成本低、制备工艺简单等优点备受关注。十余年来, 钙钛矿太阳能电池的效率得到了长足的发展。但是, 光照、温度、偏压和缺陷等因素严重影响器件的稳定性, 阻碍了钙钛矿太阳能电池商业化发展。特别是在极端环境下, 巨大的温度变化极易引发卤化物钙钛矿材料的相变, 晶格应变和晶格失序, 破坏其晶体的内部结构, 诱导钙钛矿薄膜分解, 致使器件性能迅速衰减直至损坏。因此, 通过调控钙钛矿薄膜的结晶及排列来抑制变温过程中的相变和应变等不利因素, 对开发耐变温器件的钙钛矿太阳能电池材料具有重要意义。另外, 大尺寸器件的研究是钙钛矿太阳能电池下一步发展的关键, 研究温度变化对钙钛矿材料的影响可为实现高效稳定的大尺寸器件奠定坚实的基础, 可更好的

实现商业化对接。

A04-104

基于八面体晶格调控提升钙钛矿材料及器件稳定性研究

王勇*

浙江大学

APbX₃ 型铅卤钙钛矿材料稳定性差, 使钙钛矿太阳能电池这一新兴光伏技术的产业化前景蒙上阴影。初期钙钛矿太阳能电池中 MAPbI₃ 钙钛矿光吸收层, 由于含易挥发、化学稳定性低的甲胺阳离子, 光、热稳定性较差, 无法实现产业化应用。研究人员基于阳离子工程获得了化学稳定的 CsPbI₃ 和 FAPbI₃ 钙钛矿。但这类钙钛矿因离子尺寸匹配欠佳和材料“软晶格”特性, 存在相稳定性差的问题, 即具备光电活性的八面体共顶点的黑相易转变成无光电活性的八面体共棱/面的黄相。针对此关键科学问题, 我们(1)设计并合成了新型共晶分子, 用于抑制结晶过程中共面八面体形成, 获得了八面体共顶点的纯相钙钛矿;(2)开发了高稳定新钙钛矿晶相(β相)和“晶格褶皱”甲脒基钙钛矿, 阐明了晶格调控提升钙钛矿材料和电池稳定性的新机制;(3)进一步通过研究钝化材料与钙钛矿晶格的相互作用, 发明并制备了与钙钛矿兼容性更佳的非晶钝化材料, 使得钙钛矿性能和稳定性都得以显著提升。

A04-105

钙钛矿材料的组分均一性

白阳*

北京理工大学

钙钛矿材料和太阳能电池近年来取得突破性进展, 是重要的下一代光伏技术。混合钙钛矿是钙钛矿材料家族中的重要一员, 对提升器件效率和稳定性有着显著作用。然而, 由于体系复杂, 混合钙钛矿薄膜中常呈现材料组分的非均相分布, 并在材料和器件的工作过程中发生演变, 造成器件性能、稳定性的衰减。针对这一问题, 我们从多尺度研究了薄膜非均相的形成机制、演变规律和调控策略, 从材料生长的反应动力学过程入手, 开发了薄膜组分非均相分布状态的调控技术, 实现了高均一性薄膜的可靠制备, 提高材料稳定性和光伏器件性能。

A04-106

稳定安全钙钛矿太阳能电池的研究

张飞*

天津大学

由于其独特的性能, 钙钛矿太阳能电池的 PCE 在过去十年中大幅上升, 从 3.8% 上升到 27%。制约其商业化的关键因素已逐渐从单纯追求效率转向长期运行稳定性和铅泄漏问题。本报告首先介绍了一些结晶调控和界面修饰策略以提高稳定性。最后介绍一些有效的化学吸附铅策略。

A04-107

分子化学调控的钙钛矿光伏研究

陈睿豪*

西北工业大学

钙钛矿太阳能电池凭借其光电转换效率高、成本低、易加工等诸多优势, 其效率已可与主流的硅基光伏器件相媲美。然而钙钛矿及表界面的不稳定性和大面积加工难的问题制约了其光伏模组的实际应用进程。申请人开发了“由下至上”一体式全方位的调控策略, 明晰了埋底界面分子修饰与能级结构的关系, 阐明了二硫分子重排调控钙钛矿结晶的内在机制, 发展了多肽分子共修饰、原位化学转化对界面缺陷和抑制离子迁移的调控新思路, 提升了薄膜表界面的光热稳定性。最终, 基于以上策略构建的倒置器件实现了超过 26% 的光电转换效率, 其兼具优异的光、热稳定性; 光热稳定性均超过 1700 小时, 36 cm² 面积的模组实现了 21.7% 的效率, 为高效稳定的大面积钙钛矿光伏器件产业化提供重要参考。

参考文献:

[1] Chen, R. H.* et al., Bilateral Chemical Linking at NiO_x Buried Interface Enables

Efficient and Stable Inverted Perovskite Solar Cells and Modules. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2024, e202409689

[2] Chen, R. H.* et al., Interfacial Crosslinking Benzimidazolium Enables Eco-friendly Inverted Perovskite Solar Cells and Modules. *Nano Energy*, 2024, 110190.

[3] Chen, R. H.* et al., Peptide-Based Ammonium Halide with Inhibited Deprotonation Enabling Effective Interfacial Engineering for Highly Efficient and Stable FAPbI₃ Perovskite Solar Cells. *Adv. Funct. Mater.* 2024, 2405735.

A04-108

钙钛矿微晶合成及光伏应用

章勇*

香港科技大学 (广州)

传统的高效钙钛矿太阳能电池制备方法依赖于高纯度 (>99.99%) 的碘化铅与有机碘化物在极性非质子溶剂中的混合前驱体。然而,考虑到成本效益,这种昂贵的材料可能阻碍其在大规模工业生产中的应用。因此,我们探索了使用低成本、低纯度的铅源来合成钙钛矿微晶作为原料,并深入研究了基于这些前驱体制备的钙钛矿太阳能电池的光伏性能。在乙腈溶剂中,我们成功利用 99%纯度的 PbI₂ 合成了甲脒碘化铅和甲脒碘化铅钙钛矿微晶。以甲脒碘化铅钙钛矿微晶为基础,我们成功制备了高重现性的钙钛矿太阳能电池,其效率经 Newport 认证,达到了 21.07%。我们还进一步探讨了不同链长的氯化烷基胺添加剂对甲脒碘化铅钙钛矿薄膜结晶过程的影响。通过采用氯化丙胺取代传统的氯化甲胺,我们成功研制出稳定的无甲脒钙钛矿太阳能电池。此外,我们还开发了一种水相合成方法,合成了纯度高达 99.99%的钙钛矿微晶,实现钙钛矿公斤级量产。利用这些纯化后的前驱体,实现了 25.6%的光电转换效率。此外,我们通过钙钛矿薄膜均质化及界面调控,我们成功将光电转换效率提升至 26%以上。

A04-109

钙钛矿太阳电池的多维度协同设计与调控

胡婷*

南昌大学

作者聚焦新型太阳电池失稳的核心机制,主要针对钙钛矿薄膜多尺度缺陷、低维钙钛矿各向异性载流子传输受限以及界面复合降解的关键问题,展开多维度的协同设计与调控:(1)分子尺度胶体工程揭示了低维量子阱演化规律,实现了低维钙钛矿太阳电池效率的突破^[1-2];(2)提出了相分布调控和界面异质结构设计新策略,建立体相缺陷抑制-界面能级匹配-载流子定向运输的优化体系^[3-4];(3)通过外场驱动与纳米界面的跨尺度协同,实现了低维印刷太阳电池的自封装^[5-6]。

1. Zhi Xing#, Xiangchuan Meng#, Dengxue Li, Yanyan Zhang*, Baojin Fan, Zengqi Huang, Fuyi Wang, Xiaotian Hu, Ting Hu*, Yiwang Chen*, Modulation of Colloidal Assembly Behavior Enables Printable Low-Dimensional Perovskite Photovoltaics, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2023, 62(24), e202303177.

2. Kaiqin Xu#, Zhi Xing#, Dengxue Li, Canqiang Du, Yang Gao, Xiaotian Hu, Ting Hu*, Yiwang Chen*, Boosting Efficiency to 22.73%: Unraveling the Role of Solvent Environment in Low-Dimensional Perovskites Through Competitive Bonding Interactions. *Adv. Funct. Mater.*, 2024, 35(7), 2415429.

3. Dengxue Li#, Zhi Xing#, Yajun Wang, Jianlin Li, Biao Hu, Xiaotian Hu, Ting Hu*, Yiwang Chen*, Regulating Charge Transport Dynamics at the Buried Interface and Bulk of Perovskites by Tailored-phase 2D Crystal Seed Layer, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2024, 63(17), e202400708.

4. Dengxue Li, Zhi Xing, Lu Huang, Xiangchuan Meng, Xiaotian Hu, Ting Hu*, Yiwang Chen*, Spontaneous Formation of Upper Gradient 2D Structure for Efficient and Stable Quasi-2D Perovskites, *Adv. Mater.*, 2021, 33 (34), 202101823.

5. Jiajie Hong, Zhi Xing, Dengxue Li, Biao Hu, Kaiqin Xu, Xiaotian Hu, Ting Hu*, Yiwang Chen*,

Managing Solvent Complexes to Amplify Ripening Process by Covalent Interaction Driving Force under External Field for Perovskite Photovoltaic, *Adv. Mater.*, 2024, 37(3), 2409971.

6. Zhi Xing#, Baojin Fan#, Xiangchuan Meng, Dengxue Li, Zengqi Huang, Linfeng Li, Yanyan Zhang, Fuyi Wang, Xiaotian Hu, Ting Hu*, Thomas Riedl*, Yiwang Chen*, Repairing Humidity-Induced Interfacial Degradation in Quasi-2D Perovskite Solar Cells Printed in Ambient Air, *Energy Environ. Sci.*, 2024, 17, 3660-3669.

A04-110

二维钝化策略对不同带隙钙钛矿电池性能与稳定性的影响研究

李灿*

西北工业大学材料学院

钙钛矿薄膜体相和表面的缺陷对其光电性能和器件稳定性具有重要影响。钝化缺陷、提升其光电性能和稳定性是当前钙钛矿太阳能电池领域的研究热点。本报告主要介绍近期关于二维钝化策略提升不同带隙钙钛矿太阳能电池性能与稳定性的研究成果。在二维钝化策略方面，我们在铅锡混合钙钛矿材料中引入多巴胺阳离子，在钙钛矿薄膜表面构建了一层还原性二维钙钛矿层，提升钙钛矿电池的效率 and 稳定性。基于该还原性二维钙钛矿钝化层的铅锡混合钙钛矿电池获得了 22.31% 的效率。在还原性二维钙钛矿层的保护下，钙钛矿器件在氮气环境下连续工作 1000 小时后仍保持 86% 的初始效率，表现出优良的稳定性。其次，在宽带隙钙钛矿薄膜中利用富溴二维钝化层实现体相和表面钝化，基于该富溴二维钝化策略制备的宽带隙钙钛矿电池，在 1000 lux LED 光照条件下获得了 41.58% 的能量转换效率，电池组件在室内光照条件下有效驱动物联网传感器模块，实现环境信息的提取和无线广播。此外，我们使用离子交换策略合成了一种新型胺盐分子 MeOPEA TFSI，既可以替代传统的 LiTFSI 实现对空穴传输层 spiro-OMeTAD 的掺杂，还可以扩散进入钙钛矿表面形成二维钝化层。该策略通过抑制离子迁移和钝化缺陷提高钙钛矿电池的性能和稳定性，在 0.045 cm^2 和 16.8 cm^2 的器件上获得了 25.52% 和 21.01% 的能量转换效率。基于该钝化策略和 PTAA 空穴传输层的器件在 60 摄氏度氮气环境下连续老化 1300 小时仍保持初始效率的 84%，表现出良好的稳定性。

A04-111

界面调控构建高效稳定的钙钛矿太阳能电池

周勤*

杭州电子科技大学

钙钛矿材料独特的光电性能，使得基于其制备的钙钛矿太阳能电池 (PSCs) 发展迅速，光电转换效率 (PCE) 已经突破 27%，可以和硅基太阳能电池 (27.6%) 相媲美。尽管如此，根据 Shockley-Queisser 理论 33% 的效率极限，PSCs 的效率仍有很大的提升空间，而且长期运行稳定性和大规模制造尚未成功解决，这也阻碍了 PSCs 的商业化发展。在典型的平面 PSCs 中，钙钛矿吸收层夹在电子传输层 (ETL) 和空穴传输层 (HTL) 之间。因此，界面接触本质上对于实现高效稳定的 PSCs 尤为重要。然而，由于埋底界面的非暴露特性，对其进行研究和优化存在一定的挑战性。目前，大多数研究工作主要通过界面工程来优化埋底界面，然而许多钝化分子在钙钛矿前驱体溶剂中具有很高的溶解度，如 N, N 二甲基甲酰胺 (DMF) 和二甲基亚砜 (DMSO)，导致后续旋涂钙钛矿前驱体溶液时对底界面修饰层产生潜在的溶解和冲刷，阻碍了界面材料发挥作用潜力。基于此，我们设计了一个刚性的分子桥策略，通过构建一个良性的埋底界面来有效地稳定钙钛矿的底表面。引入的 DL-乙硫氨酸 (DLEO) 分子在 DMF 和 DMSO 溶剂中几乎不溶并含有多功能官能团。该策略最大限度地发挥了功能材料在钝化埋底界面缺陷、调节能带对准和促进电荷输运方面的优势。结果表明，基于 DLEO 所制备的器件最高效率达到 25.08% 并具有良好的工况稳定性。

A04-112

Inorganic Perovskite/Silicon Tandem Solar Cells

Xiaodan Zhang*, Sanlong Wang, Pengyang Wang, Shanshan Qi, Ying Zhao

Nankai University

Inorganic perovskites are excellent top cell candidates for silicon-based tandem solar cells (TSCs) due to better thermal stability and suppressed phase segregation under illumination.

However, unsatisfactory hole extraction and nonradiative recombination leading to significant voltage and fill factor losses. Here, we develop a weak p-type material of ethylenediamine acetic acid methylamine (EDTA-N) combined with nickel oxide (NiOx) as a hole selective layer, the EDTA-N acts as a bridge between CsPbI₃ and NiOx, effectively enhancing carrier extraction from CsPbI₃ to NiOx, which also facilitates subsequent growth of high-quality inorganic perovskite films and coordinate with uncoordinated Pb²⁺ at the bottom interface while suppressing interfacial non-radiative recombination. Moreover, the formation of gradient energy level alignment between CsPbI₃ and NiOx result in higher open-circuit voltage. As a result, a record power conversion efficiency (PCE) of 21.52% was realized in an inverted 1.68 eV single junction CsPbI₃ inorganic perovskite solar cells (IPSCs). We also achieved a record PCE of 27.92% (certified 27.18%) of inorganic perovskite/silicon TSCs. In air, without encapsulation, the IPTSCs maintained 96.89% of its initial efficiency after 500 hours of continuous operation and retained 87.48% of its initial efficiency after 1,000 hours of heating at 85° C in a nitrogen atmosphere.

A04-113

全钙钛矿叠层太阳能电池研究 - 表界面材料与器件集成

赵德威*

四川大学

叠层太阳能电池可突破单结太阳能电池光电转换效率理论极限。卤化物钙钛矿材料具有带隙宽幅调控、光电性质优异、制备成本低等优势，非常适合用于构建低成本、高效率的叠层电池。围绕如何构建高性能全钙钛矿叠层太阳能电池，介绍埋底界面材料设计与合成及诱导结晶制备高质量钙钛矿吸光层；介绍宽、带隙钙钛矿电荷传输材料(SAM 和 HTL)和表界面修饰材料，降低界面电荷损失，提升开路电压；讨论中间连接层设计和优化，实现低光电损耗连接及高效全钙钛矿叠层电池。

A04-114

无机钙钛矿光伏及其叠层

严克友*

华南理工大学

无机钙钛矿光伏电池表现出良好的光热稳定性，因此发展叠层电池，突破单结效率瓶颈，具有重要意义。目前因为窄带隙子电池钙钛矿溶解度太低、Sn-Pb 同步序构及结晶成膜控制困难、能量损耗大且稳定性差等关键问题亟需解决。近年来，项目组在无机钙钛矿电池器件材料设计、成膜规律以及电池结构优化方面做了一些研究工作，本报告将汇报无机钙钛矿成核结晶及其调控规律，无机叠层器件的制备和光电性质的一些研究进展。

A04-115

钙钛矿叠层光伏中的有机组分调控

薛晶晶*

浙江大学

有机无机杂化钙钛矿作为一种新型半导体光伏材料，因其具有光吸收系数高、禁带宽度可调、载流子寿命长、缺陷容忍度高、可低温溶液加工，原料来源广泛、有利于低成本的大规模生产等优势，展现出了极大的发展潜力，有望成为今后太阳能光伏产业的重要选择途径之一，其科学和技术问题已成为国际学术界和产业界极度关心的领域，也是我国高科技产业发展的关键领域。

光电转换效率、尺寸放大和运行稳定性是钙钛矿半导体光伏实际应用中必须解决的三大关键问题，也是目前领域内研究的重中之重。在光电转换效率方面，钙钛矿半导体光伏经历了最初的迅速上升阶段到现阶段增速显著变缓的“平台期”，如何进一步突破转换效率急需新材料和新结构的设计与开发，以打破现有材料体系和理论框架的局限；钙钛矿半导体器件在尺寸放大过程中，由于结晶机制、缺陷产生机制等差异，往往会面临严重的性能损失，如何找到钙钛矿半导体各种沉积场景下晶体调控的统一化机制以发展通用性策略是其器件规模化制备的重要问题；在器件运行稳定性的研究中，尽管大量研究已经聚焦于钙钛矿

薄膜的稳定策略,但传输层的不稳定性问题日益凸显,成为了制约整体器件运行稳定性、阻碍钙钛矿光伏器件寿命进一步提升的关键因素。而不同于传统半导体光伏材料的主要结构由纯无机组分构成,钙钛矿光伏中有机组分大量参与了其晶体结构和器件结构的构建中,这种独特的有机-无机杂化半导体体系导致上述关键问题背后的很多基础科学理论和技术框架难以沿用传统半导体领域的理论和策略。

本次报告主要聚焦于钙钛矿半导体光伏材料与器件中特有的有机结构,围绕该种非传统半导体的组分特性探索其结构调控和半导体性质间的理论关联机制,报告我们在调控有机组分以实现高效稳定叠层钙钛矿太阳能电池方面的最新研究进展,主要包括钙钛矿晶格中的有机组分特殊结构的形成、宽带隙钙钛矿薄膜结晶中的有机组分添加剂的分子调控、叠层器件传输层材料中的有机小分子结构的设计与开发等。

A04-116

全钙钛矿叠层电池的分子和界面优化工程

柯维俊*

武汉大学

近年来,单结太阳能电池越来越接近其理论效率极限,然而多结薄膜光伏电池可以突破单结电池的 Shockley-Queisser 理论极限。特别地,全钙钛矿叠层太阳能电池的理论效率可达到~44%,且具有可全溶液法制备和优异的弱光效应等优点。全钙钛矿叠层电池由窄带隙钙钛矿子电池和宽带隙钙钛矿子电池组成,需要同时实现两个子电池的高性能、兼容性,并且叠层电池具有更加复杂的表界面问题。为了解决这些问题,我们提出了包括“分子锁”、多维分子工程、晶体调控和普适性界面工程等策略。这些方法旨在解决该领域的挑战问题,包括窄带隙混合铅锡钙钛矿的易氧化、宽带隙混合碘溴钙钛矿的光诱导卤素相分离,以及严重的界面复合等。通过这些策略,我们显著提升了全钙钛矿叠层电池的效率 and 稳定性,实现两端、四端全钙钛矿叠层电池的效率超过 28%,这为未来窄带隙和宽带隙钙钛矿子电池及其叠层太阳能电池的进一步性能提升提供了参考。

A04-117

高性能全无机钙钛矿叠层太阳能电池的制备

段程皓*

河南大学

用无机阳离子(如 Cs^+)取代有机阳离子(如甲基铵(MA^+)和甲脒(FA^+))制备的全无机钙钛矿是提高钙钛矿太阳能电池(PSCs)长期光稳定性和热稳定性的有效途径。因此,无机钙钛矿串联太阳能电池(IPTSC)有望打破效率瓶颈,并解决稳定性问题。然而,由于锡离子的引入导致窄带隙(NBG)无机钙钛矿薄膜质量差和缺陷态严重,制备2端(2T)IPTSC仍然存在挑战。本文采用对甲苯磺酰肼(PTSH)的配体演变(LE)策略来调节NBG无机钙钛矿薄膜形成过程并消除缺陷态,从而成功开发了2T IPTSC。因此,1.31 eV $\text{CsPb}_{0.4}\text{Sn}_{0.6}\text{I}_3$:LE 器件提供了17.41%的创纪录效率。结合1.92 eV CsPbI_2Br 顶电池,2T IPTSCs的冠军效率为22.57%(认证为21.92%)。此外,IPTSC在最大功率点(MPP)跟踪下具有卓越的耐久性,在65°C下1510小时和85°C下800小时分别保持80%的初始效率。我们阐明了LE策略在无机NBG钙钛矿薄膜制备过程中的多重作用,并期望我们的研究为开发高效稳定的IPTSC提供有价值地指导。

A04-118

钙钛矿叠层电池界面的选择性钝化

李崇文*

东南大学

全钙钛矿叠层太阳能电池的功率转换效率上升迅速,有望突破单结太阳能电池的理论极限,但其耐用性低仍是实现钙钛矿电池商业化的重要阻碍。全钙钛矿叠层太阳能电池由倒置 p-i-n 结构的子电池构建而成。制备子电池过程中往往会在钙钛矿/电子传输层界面处引入缺陷,造成界面复合,并进一步导致稳定性问题。为此,我们首先通过 PLQY 分析了界面复合的机理,并相应提出了类场效应钝化的二胺分子钝化策略。此外,我们通过 ALD 沉积金属氧化物工艺进一步减小了界面复合,并大幅提升了器件重复性。最后,我们将汇报针对混合 Sn-Pb 钙钛矿薄膜中界面氧化的问题:表面过量的 Sn 加剧了氧化并增加了复合速率。受螯合化学的启发,我们使用二胺来螯合表面的 Sn/Pb 金属离子,并在旋涂过程中将其去除。由

于 Sn 的活性比 Pb 强，二胺优先螯合 Sn 原子，将它们从薄膜表面去除，实现更平衡的 Sn:Pb 化学计量，增加了 Sn-Pb 薄膜的抗氧化性。该工艺形成电阻低维二胺-Sn/Pb 阻挡层，钝化缺陷并减少界面复合。

A04-119

叠层太阳能电池的材料探索和器件优化

唐江

华中科技大学武汉光电国家研究中心

随着单结硅基和钙钛矿基太阳能电池的功率转换效率接近其理论极限，包含宽带隙顶电池和窄带隙底电池的双结叠层太阳能电池引起了全世界的关注，因为它们具有高达 45% 的理论转换效率。目前，硅基和钙钛矿基叠层太阳能电池是研究热点，主要挑战是找到具有适当带隙、优异光电性能、兼容制备工艺和低成本的合适吸收材料。在过去的十年里，我们广泛探索了具有优异稳定性和低成本的二元硫族化合物宽带隙太阳能电池，如 CdSe、Sb₂S₃、CsPbI₃ 和混合钙钛矿叠层太阳能电池。最近，我们主要关注无反溶剂的全钙钛矿叠层太阳能电池，并实现了 29% @ 0.04 cm²、27.4% @ 1cm²、24.5% @ 20cm² 的验证效率。最后我们也将简要介绍实际光谱对钙钛矿叠层电池发电性能影响。

A04-120

钙钛矿膜抽气结晶器：助力钙硅叠层电池一步溶液法产业化

杨冠军

西安交通大学，凯伏绿能（西安）光电有限公司

大绒面晶硅底电池表面的绒面结构高达数 μm，导致钙钛矿溶液涂覆之后的干燥结晶过程中易出现晶硅底电池漏尖，引发电池短路、效率下降。绒面晶硅叠层钙钛矿专用抽气结晶器，通过抽气管理、结晶控制、基底适配等创新设计技术，有效破解了大尺寸绒面基底与钙钛矿薄膜的界面匹配难题，为 210mm × 105mm 尺寸钙钛矿/晶硅叠层电池的规模化生产提供了关键装备支撑。未来，与叠层产线进行节拍匹配、控制衔接等适配协调，有望推动高效叠层电池的产业化进程。

关键词：大绒面晶硅；钙钛矿薄膜；抽气结晶器；基底适配；产业化

A04-121

高效稳定钙钛矿/硅基叠层太阳能电池研究

刘明侦

电子科技大学

钙钛矿/硅基叠层太阳能电池近年来发展迅速，光电转换效率已突破 34.6%，成为了新型光伏技术的研究热点。本报告将聚焦钙钛矿/硅基叠层太阳能电池中界面载流子输运问题，通过钙钛矿薄膜保形制备、界面粘附性增强、钙钛矿/传输层界面精准钝化等策略，大幅提升叠层器件中界面载流子输运，突破钙钛矿/硅基叠层太阳能电池的光电转换效率至 34% 以上。该系列工作为钙钛矿/硅基叠层太阳能电池的进一步产业化发展提供了科学支撑。

关键词：钙钛矿/硅基叠层太阳能电池，钙钛矿薄膜制备，载流子输运，界面粘附

A04-122

基于工业绒面晶硅的高效钙钛矿/晶硅（HJT）叠层太阳电池

章文峰*

西南石油大学

在全绒面硅底电池上实现自组装单分子层（SAM）的保形沉积对于钙钛矿/晶硅叠层太阳电池（PSTSC）的产业化意义重大。然而，对于大面积 SAM 薄膜的狭缝涂布来说，这颇具挑战性，因为 SAM 分子倾向于聚集成团簇，而狭缝涂布缺乏克服其成核障碍的驱动力。在此，我们报道了多种添加剂及分子工程策略，通过将添加剂掺入商业化 SAM 中或设计新型 SAM 分子，一方面通过受能量层级控制的动态氢键网络抑制 SAM 微胶束的形成，另一方面通过分子工程调控 SAM 分子的偶极提高其沉积均匀性。这使得通过狭缝涂布在环境空气（相对湿度 < 35%）中实现大面积全纹理化异质结技术（HJT）硅底电池（金字塔高度：~3 μm）

上的共形 SAM 锚定成为可能。我们实现了 29.00% (认证值为 28.30%, 面积为 19.90 平方厘米) 和 24.67% (面积为 220.46 平方厘米) 的转换效率, 这两个数值均为狭缝涂布型 PSTSC 的最高纪录, 且与在手套箱中制备的器件效率相当, 这是叠层器件从实验室创新迈向产线兼容制造的关键一步。

A04-123

太阳能电池新型钝化技术：从产业化晶体硅到钙钛矿叠层的关键技术创新

陈剑辉*

河北大学

产业化晶体硅太阳能电池器件核心技术一界面钝化, 主要由氧化硅、氧化铝、本征氢化非晶硅等无机材料体系构成。报告人课题组发现了全新的有机钝化体系, 建立了包括物化机理、功能本源、材料体系、器件应用的完整研究体系, 并针对“产业化光伏电池切割分片产生边缘缺陷导致电池效率下降”的痛点问题, 提出了涂边增效的“钝化液技术”, 研制出适配生产线的钝化设备和成套量产方案。本报告介绍了钝化液提效技术的发现过程、钝化机制、材料体系, 以及在当前产业化钙钛矿电池关键技术创新方面的最新研究成果: 叠层电池新型钝化技术、非陶瓷新型透明导电玻璃、室温浆料、钙钛矿节能建筑产品新应用场景开发等。

A04-124

高效晶体硅-钙钛矿二端叠层太阳能电池的稳定性研究

杭鹏杰*、张道永、余学功

浙江大学

晶体硅-钙钛矿叠层器件的稳定性除了强烈依赖于混合组分宽带隙钙钛矿材料本身的稳定性以外, 还与传输层材料及界面性质强烈相关。为此, 我们主要研究了钙钛矿中的空位缺陷、晶面性质及与埋底界面的性质对叠层器件效率及稳定性的影响机制。通过溶剂工程、添加剂工程及取向工程, 均可获得低缺陷浓度的高品质宽带隙钙钛矿薄膜, 从而抑制其内部的离子迁移所致的相分离来提高薄膜稳定性, 从而提高器件的稳定性。此外, 通过在制绒硅-钙钛矿叠层里引入局部接触结构, 避免金字塔谷底应力集中区钙钛矿的沉积, 且避免过剩载流子在界面处的累积, 可进一步提升叠层器件的长期工作稳定性。我们将以上策略协同应用于晶体硅-钙钛矿叠层太阳能电池的制备中, 成功获得了在各种老化场景下 T90 超过 1000 小时的高效叠层器件。

A04-125

基于钾盐结晶策略的钙钛矿/TOPCon 双端叠层电池效率达 33.65%

徐孟雷*、王俊淦、闫循磊、徐影、顾诚俊、杨洁、张昕宇

浙江晶科能源有限公司

钙钛矿在晶硅绒面上保形且均匀生长是实现高效叠层电池的基本要求, 然而钙钛矿慢成核快结晶的特性导致钙钛矿薄膜无法延金字塔致密生长。在本研究中, 通过在钙钛矿前驱液中添加钾盐有效调控钙钛矿结晶, 钾盐率先沉积在金字塔表面充当钙钛矿的成核位点, 使得钙钛矿晶体沿金字塔表面均匀紧密生长, 避免钙钛矿底部的剥离及顶部的塔尖刺穿。同时基于钾盐的结晶调控策略, 钙钛矿晶粒可进一步生长, 使得钙钛矿薄膜具有更优的发光特性及成膜均一性。最终, 基于钾盐调控的钙钛矿晶硅叠层电池取得了 33.65% 的第三方认证效率, 创造了基于 TOPCon 叠层电池的效率世界纪录。

A04-126

基于多系统协同策略的 TOPCon 电池大高宽比细栅银浆制备研究

刘静*

中南大学

面对 TOPCon 光伏电池银浆成本高昂、细栅印刷工艺瓶颈及钝化层损伤等关键技术挑战, 本研究通过多系统协同创新策略, 开展高宽比细栅银浆体系开发及激光烧结工艺优化研究。采用液相还原-自组装耦合技术制备碳纳米管复合超细银粉, 借助流变学模型指导浆料配方设计, 结合激光诱导烧结技术实现界面电传输强化, 系统解决“高导电-低银耗-高精度”的协同优化难题。研究重点突破碳纳米管轴向取向调控、

流变-印刷跨尺度协同、激光-碳热导增强等核心技术。通过设计“银珠链”复合结构提高电导率，乙基纤维素-丙烯酸酯梯度聚合载体体系，优化流变特性并匹配超细网版印刷需求，开发激光-浆料响应匹配模型，精准调控 Ag-Si 互扩散深度，有效降低接触电阻。研究成果将大幅度降低 TOPCon 电池银耗至 60mg/片，为突破光伏金属化“卡脖子”技术提供原创性解决方案。对 TOPCon 电池开发具有重要指导意义，助力光伏产业降本 10%，光电转化效率提升至 27%，同时为双碳目标达成提供关键技术支撑。

A04-127

高性能 N 型晶体硅太阳能电池的切割损失机理与边缘缺陷钝化研究

张旭宁*

河北大学物理科学与技术学院

半片与叠瓦组件技术通过电池切割降低工作电流，有效抑制了热损耗及热斑效应，展现出优于传统全电池组件的功率输出与可靠性。其中，电池切割是关键环节，热激光分离技术 (TLS) 凭借其低切割损伤特性正逐步取代传统激光烧蚀 (LSMC) 工艺。然而，切割工艺不适配及切割后新边缘界面高载流子复合导致的电池效率衰减，显著影响组件整体功率输出。本研究聚焦产业化光伏组件制备中的切损问题，旨在通过优化切割工艺减少效率损失，并引入边缘液相钝化技术进一步修复电池片边缘损伤。具体研究内容如下：

TLS 工艺优化：创新性地利用高精度红外热成像技术，建立了激光功率参数与热裂解温度的映射关系，为解析切割损伤与热裂解温度的关联提供数据支撑。

SHJ/TOPCon 切损机理研究：基于优化的切割工艺，对比研究了 SHJ 与 TOPCon 电池的 TLS 切割损失。定量分析了热裂解温度对两种电池效率损失的影响规律，并通过拉曼光谱、光致发光扫描成像 (PL Mapping)、光学显微镜及仿真模拟等手段，揭示了过高热裂解温度对电池边缘特性的影响机制，为产业界优化切割工艺提供了重要理论依据。

边缘液相钝化技术：针对切割导致的边缘复合问题，提出并开发了适配产线的边缘液相钝化技术。该技术通过将有机钝化溶液均匀涂覆于电池切割截面，实现界面缺陷钝化。

本研究通过系统优化 TLS 切割工艺并开发高效边缘钝化方案，有效降低了晶体硅太阳能电池切割过程中的效率损失，显著提升了组件输出功率，对推动光伏产业降本增效具有重要应用价值。

A04-128

Progress and Perspective of Cu(InGa)(SSe)₂ Based Tandem Solar Cells

Xudong Xiao

School of Physics and Technology, and Key Laboratory of Artificial Micro- and Nano-structures of Ministry of Education, Wuhan University

Perovskite/Cu(InGa)Se₂ (PSC/CIGSe) tandem configuration is an attractive way to achieve an ultra-high efficient and cost-effective all-thin-film solar cell. In this presentation, I will first briefly review the status of this tandem cell, and then present our progressive study of such tandems in 4-terminal and 2-terminal structures. In particular, I will discuss the fabrication of highly efficient narrow bandgap CIGSe solar cell by a number of techniques to reach optimal energy band engineering; the construction of wide bandgap CsFAPb(IBr)₃ based perovskite solar cell by using various treatments to successfully reduce the bulk and interface defect densities and to greatly enhance the open-circuit voltage. By integrating a highly efficient and highly infrared transparent wide bandgap PSC top cell with various narrow bandgap CIGS solar cells, we demonstrate that the bandgap matching could reach synergetic effect and realize a four-terminal tandem cell with 28.4% PCE, the highest for PSC/CIGS tandems at the time of publication. Moreover, by creating a highly effective composite intermediate recombination layer between CIGSe and PSC, a monolithic two-terminal PSC/CIGS tandem device with over 30% efficiency has been produced. In the end, I will also share my view on the potential of CIGS/Si tandem solar cells.

References:

1. Xinxing Liu, Junjun Zhang, Liting Tang, Wang Li, Zexin Tu, Yanyan Li, Ruiming Li, Xuzhi Hu, Chen Shen, He Wang, Zhiping Wang, Qianqian Lin, Guojia Fang, Sheng Wang, Chang Liu, Zengming Zhang, Jianmin Li, Junbo Gong, Xudong Xiao, "Over 28%

Efficiency Perovskite/Cu(InGa)Se₂ Tandem Solar Cells: Highly Efficient Sub-cells and Their Bandgap Matching”, *Energy Environ. Sci.* 2023, 16, 5029-5042.

2. Liting Tang, Li Zeng, Jun Luo, Wuji Wang, Zhuo Xue, Zekai Luo, Hui Yan, Junbo Gong, Sheng Wang, Jianmin Li, and Xudong Xiao, “All-round Passivation Strategy Yield Flexible Perovskite/CuInGaSe₂ Tandem Solar Cells with Efficiency Exceeding 26.5%”, *Adv. Mater.*, 2024, 2402480.

3. Liting Tang, Xiaomin Wang, Xinxing Liu, Junjun Zhang, Shaoying Wang, Yuqi Zhao, Junbo Gong, Jianmin Li, and Xudong Xiao, “Mixed solvents assisted post-treatment enables high-efficiency single-junction perovskite and 4T perovskite/CIGS tandem solar cells”, *Adv. Sci.* 2022, 9, 2201768.

4. Jun Luo, Liting Tang, Shijin Wang, Hui Yan, Wuji Wang, Zheng Chi, Junbo Gong, Jianmin Li, and Xudong Xiao, “Highly efficient Cu(In,Ga)Se₂ solar cells with actively controlled Ga grading on flexible polymer films and their application in all-flexible perovskite/CIGS tandem devices”, *Chem. Eng. J.* 2023, 455,140960.

5. Junjun Zhang, Zengyang Ma, Yitian Zhang, Xinxing Liu, Ruiming Li, Qianqian Lin, Guojia Fang, Xue Zheng, Weimin Li, Chunlei Yang, Jianmin Li, Junbo Gong, Xudong Xiao, “Highly efficient narrow bandgap Cu(In,Ga)Se₂ solar cells with enhanced open circuit voltage for tandem application”, *Nat. Comm.* 2024, 15,10365.

6. Liting Tang, Hui Yan, Li Zeng, Zhuo Xue, Zekai Luo, Jun Luo, Wuji Wang, Sheng Wang, Junbo Gong, Jianmin Li, and Xudong Xiao, “Record-Efficient Flexible Monolithic Perovskite–CIGS Tandem Solar Cell with VOC Exceeding 1.8 V on Polymer Substrate”, *Adv. Energy Mater.* 2025, 2403682.

A04-129

钙钛矿/有机叠层太阳能电池材料与器件

李耀文*

苏州大学

叠层太阳能电池可突破单结电池的肖克利-奎伊瑟理论极限效率，是推动能源革命转型升级的重要源动力。钙钛矿/有机叠层太阳能电池是唯一可实现两种活性层在稳定性、光谱吸收方面高度互补和兼容性的叠层电池，且具有轻质、柔性、可溶液印刷制备等本征优势，有望与晶硅太阳能电池在应用场景上实现双向奔赴。目前，叠层电池效率距离 S-Q 极限效率仍有较大差距，且叠层电池构筑过程中额外层的引入对器件稳定性带来了更大的挑战。如何构筑低光电损耗的钙钛矿/有机叠层太阳能电池，并提升其效率和稳定性成为研究重点和难点。为此，报告人围绕叠层电池构筑以及光电转换过程中的能量与电荷载体调控机制开展了系列工作：1. 开发了基于光子管理的叠层电池新结构，突破单结电池制约性能的瓶颈问题，光谱响应大幅提升；2. 发展了功能基元分子调控载流子传输新方法，获得纪录效率钙钛矿/有机叠层器件；3. 构建了分子模板修复离子缺陷新思路，抑制了钙钛矿薄膜光致相分离，实现了本征稳定的叠层器件。相关工作解决了钙钛矿/有机叠层太阳能电池性能提升的多个瓶颈性问题。

A04-130

宽带隙钙钛矿相分离抑制构建高效钙钛矿/有机叠层器件

丘龙斌*

南方科技大学

单节钙钛矿太阳能电池光电转换效率达到了 26.7%，不断接近其 SQ 理论极限值。为了突破单节太阳能电池的 SQ 极限值，构建多节叠层太阳能电池可以更有效地利用太阳能，降低热载流子损失，有望实现光电转换效率大于 30% [1]。然而，叠层器件中所用到的宽带隙钙钛矿由于含有较高的 Br 含量导致易于产生严重的相分离，这不利于器件的稳定性。如何提高宽带隙钙钛矿相纯度，抑制相分离和降低电压损失，是提升叠层器件效率与稳定性的重要挑战 [2-4]。我们通过离子交换策略，基于蒸镀-旋涂工艺制备可共形的纯相均质钙钛矿薄膜，反式钙钛矿太阳能电池实现了 24.43% 的效率 [5]。提出基于 SnO_x 的无金属高导电性连接层结构，制备钙钛矿-有机叠层太阳能电池，前电池为宽带隙钙钛矿，背电池为窄带隙有机半导体。该简化的无金属连接层有助于增强器件近红外区域的光俘获，抑制宽带隙钙钛矿的电致相分离，降低界面非辐射复合过程，经过进一步优化近红外吸收，能量转换提升效率至 25%。

参考文献:

1. S. Li, X. Xu, X. Wang, N. Huang, J. Fang, D. Lin, Y. Shao, J. Zhou, A. K. K. Kyaw, S. He, L. Qiu, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2025, 64, e202421174.
2. G. Xie, H. Li, J. Fang, X. Wang, H. Peng, D. Lin, N. Huang, L. Gan, W. Li, R. Jiang, T. Bu, F. Huang, S. He, L. Qiu, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2025, 64, e202501764.
3. X. Cui, G. Xie, Y. Liu, X. Xie, H. Zhang, H. Li, P. Cheng, G. Lu, L. Qiu, Z. Bo, *Adv. Mater.* 2024, 36, e2408646.
4. G. Xie, H. Li, X. Wang, J. Fang, D. Lin, D. Wang, S. Li, S. He, L. Qiu, *Adv. Funct. Mater.* 2023, 33, 2308794.
5. J. Fang, D. Lin, G. Xie, S. Li, H. Li, X. Wang, D. Wang, N. Huang, H. Peng, L. Gan, Y. Zhu, S. He, L. Qiu, *Energy Environ. Sci.* 2024, 17, 7829-7837.

A04-131

高效钙钛矿/有机叠层太阳能电池

孟磊*

中国科学院化学研究所

摘要: 在有机太阳能电池领域, 非富勒烯受体材料逐渐取代了富勒烯衍生物成为有机光伏的热点, 并大幅推动了有机太阳能电池光电转化效率的提升。一方面由于非富勒烯受体材料在可见及近红外区具有宽而强的吸收, 同时器件表现出低的能量损失有利于实现高的开路电压和更充分的太阳光谱吸收, 另一方面非富勒烯受体的光吸收特性和电子能级可以通过分子修饰轻易调节, 可以充分利用和发挥有机材料具有的结构多样性, 为叠层电池光伏材料提供了更多的选择。将具有互补吸收光谱的两个或更多个本体异质结电池堆叠形成串联叠层电池结构, 可以有效地收获更宽范围的太阳光谱并且减少了较高光子能量的量子损失。综合考虑利用钙钛矿太阳能电池紫外光下稳定性好、有机太阳能电池吸收光谱宽的优点, 克服共轭有机光伏材料紫外光下稳定性差的缺点, 利用钙钛矿材料作为前结电池活性层吸收紫外至~ 620 nm 太阳光、有机活性层为后结电池活性层吸收 620~1000 nm 左右的长波长太阳光, 构筑新型叠层太阳电池, 实现既具有高稳定性又具有高效率的新型薄膜太阳电池。随着一系列 A-DA' D-A 型窄带隙非富勒烯受体的出现, 使得有机太阳电池对太阳光谱近红外部分的能量利用率进一步提高。

A04-132

柔性钙钛矿光伏与叠层器件研究

黄增麒^{*1}、胡笑添²、陈义旺^{1,2,3}

1. 江西师范大学
2. 南昌大学
3. 赣南师范大学

柔性钙钛矿光伏技术具有高功质比、低成本、可印刷加工等优点引起了广泛关注, 然而在遭受力学形变时, 不可避免地会产生晶膜破裂与界面层离, 限制了其在复杂工况下的持续电力供应。近年来, 团队通过点击化学反应实现了液晶弹性体在钙钛矿底部界面的周期排列, 构建了纳米尺度的有序粘附界面。这种有序纳米界面能够抑制界面电荷的积累与复合, 钝化深能级缺陷, 同时优化器件的整体应力分布。通过该策略获得了效率达 22.10% 的柔性钙钛矿太阳电池, 从刚性基底转移至柔性基底的效率损失仅有 5%。这种取向液晶弹性体界面强韧化设计能够从源头上抑制钙钛矿晶相偏析, 保护整体结构的力学稳定^[1]。在此基础上, 团队开发了基于液晶聚合物的结晶自驱动模板, 实现了可贴附阴影识别传感器件的集成, 并应用于环境光条件下的非接触式人机交互技术。通过长短期记忆模型的构建, 可以训练和区分 8 种手势动作信号, 并识别需要 0.2 秒以上才能完成的手势动作, 识别准确率高达 95%^[2]。另一方面, 团队从造成辐照不稳定的根源出发, 采用了色氨酸分子辅助碘捕获策略, 抑制紫外光照射下晶相偏析, 优化后的宽带隙(1.79 eV)钙钛矿器件效率达 19.04%, 开路电压达到 1.30 V, 这是无 SAMs 层的 NiO_x 基宽带隙钙钛矿太阳电池所达到的最高开路电压。相应的钙钛矿/有机叠层太阳电池小面积器件(0.04 cm²)效率达 24.30%, 开路电压高达 2.09 V, 大面积器件(1.05 cm²)效率达 22.87%。未封装的器件经过 500 h 紫外光辐照后仍保持

80%的初始效率^[3]。相关研究有望通过大面积轻量化集成，推动光伏发电多场景融合。

参考文献

[1] Huang, Z.; Li, L.*; Wu, T.; Xue, T.; Sun, W.; Pan, Q.; Wang, H.; Xie, H.; Chi, J.; Han, T.; Hu, X.; Su, M.*; Chen, Y.*; Song, Y.* Wearable perovskite solar cells by aligned liquid crystal elastomers, Nat. Commun. **2023**, 14, 1204.

[2] Wu, T.; Huang, Z.*; Li, L.; Sun, W.; Xue, T.; Pan, Q.; Xie, H.; Chen, S.; Guo, L.; Chi, J.; Wang, H.; Zhang, Z.; Han, T.; Su, M.*; Song, Y.* Wearable Perovskite-Based Shadow Recognition Sensor for Ambient and Nonobtrusive Human-Computer Interaction, Adv. Intell. Syst. **2023**, 5, 2200307.

[3] Yao, S.#; Liu, C.#, Lv, J.; Li, H.; Gong, C.; Ye, Q.; Zhou, Y.; Dai, R.; Hu, X.; Huang, Z.*; Chen, Y.*; Efficient and stable perovskite/organic tandem solar cells via molecules-assisted iodine capture under ultraviolet light, Sci. China Chem. 2025, <https://doi.org/10.1007/s11426-025-2587-9>.

A04-133

柔性窄带隙铜铟镓硒电池的表面工程及高效率钙钛矿/铜铟镓硒叠层太阳能电池

李伟民*、邵兴超、杨春雷

中国科学院深圳先进技术研究院

窄带隙铜铟镓硒 (CIGSe) 具有比晶体硅 (Si)、碲化镉 (CdTe) 和钙钛矿更窄的带隙，能够更充分地吸收和利用太阳光谱中红外长波区域的能量，是制备叠层电池底电池的理想材料。利用柔性窄带隙 CIGSe 底电池与柔性钙钛矿顶电池制备的柔性叠层太阳能电池在未来具有巨大的竞争力和广阔的市场空间。然而，目前中国在柔性窄带隙 CIGSe 薄膜太阳能电池领域的研究投入仍然不足，特别是在钛 (Ti) 基窄带隙 CIGSe 薄膜太阳能电池方面，与国际先进水平差距较大。同时，窄带隙 CIGSe 薄膜太阳能电池存在界面能带匹配性差、界面载流子复合严重、界面及内部缺陷多、寄生电阻大等问题。

为解决上述问题，本研究采用高纯度柔性钛金属箔 (Ti) 作为基底，通过三步共蒸发法和适当的基底温度制备了钛基窄带隙 CIGSe 薄膜太阳能电池。同时，本文提出了一种提升钛基窄带隙 CIGSe 薄膜太阳能电池性能的策略，即在窄带隙 CIGSe 吸收层表面进行少量碱金属钠掺杂的表面处理方法，并结合高温退火工艺，旨在进一步优化 CIGSe 吸收层表面的能带结构和梯度，改善 CIGSe 吸收层的界面及内部缺陷态和寄生电阻，从而提高其性能。

实验结果表明，通过上述优化策略和方法，在钛基底上有效解决了窄带隙 CIGSe 薄膜太阳能电池吸收层界面能带匹配性差、界面载流子复合严重、界面及内部缺陷多以及寄生电阻大的问题，在保证高短路电流密度的同时，有效提高了开路电压和填充因子，器件效率从 17.0% 提升至 19.3%。其中，效率为 19.3% 的器件开路电压为 648mV，短路电流密度为 39.7mA/cm²，填充因子为 75.1%。将其与效率为 19.35% 的柔性钙钛矿顶电池进行机械堆叠后，获得了效率为 28.14% 的柔性四端钙钛矿/CIGSe 叠层太阳能电池。

A04-134

高性能钙钛矿-硅叠层电池的产业化技术开发

吴林*

通威太阳能 (成都) 有限公司

钙钛矿-硅叠层电池技术从理论层面打破单结电池的物理极限，将会成为下一代光伏发电的核心技术路线。本报告从叠层电池技术背景和产业化现状等方面展开，阐述通威特色的基于商业硅片的叠层电池关键技术开发和研发进展，重点分析了钙钛矿吸光层的高质量制备和量产化制备的关键技术瓶颈和应对策略，并展望未来叠层电池技术的可行性路线。

A04-135

全钙钛矿叠层太阳能电池及规模化制备

谭海仁

南京大学

A04-136**钙钛矿光伏材料的均一性**

陈棋*

北京理工大学

钙钛矿太阳能电池是下一代光伏技术的重要候选之一。但材料本征稳定性不佳，主要表现在晶格形成能低、反应活性高、离子迁移能低。这造成混合钙钛矿多晶薄膜的成分与晶体组织结构分布不均一。薄膜的不均一性不仅影响器件效率和寿命，也给材料和器件的可重复制备带来了挑战。深入理解钙钛矿材料不均一性的产生与演化机制，发展新方法制备均一性好的材料，是实现高效、稳定钙钛矿太阳能电池可重复制备的关键。围绕混合钙钛矿材料的均一性，报告从其演化机制、调控手段与表征方法三方面介绍相关的研究工作，主要包括 1) 发展“谢林模型”揭示薄膜不均一性的演化机制，阐明不均一性影响稳定性的边界条件；2) 开发“液相介质退火”的通用合成手段，实现纳米尺度组分均一的高质量材料的大规模可重复制备；3) 发展新表征方法揭示表面的晶体结构异质性，通过界面调控实现器件稳定性与效率的同步提升。

A04-137**构建高效稳定的钙钛矿基太阳能电池**

王睿*

西湖大学

基于有机无机杂化的钙钛矿材料在未来高性能光伏领域表现出巨大的潜力。甲脒基钙钛矿由于其具有理想的带隙和热阻，因此成为钙钛矿材料中最有希望的高效光伏器件的候选材料。然而，在室温下，具有光活性的黑相甲脒钙钛矿在热力学上不易形成。其他中间的非光活性相很容易产生，这损害了其光伏性能。通过对钙钛矿结晶过程的多模式原位监测，我们发现了一种定向成核机制，它是避免不良相的关键。这一策略可以适用于在不同的薄膜加工方式下，均可以有效改善光伏器件的性能。在这次报告中，我将介绍我们在提高甲脒基钙钛矿太阳能电池的稳定性和效率方面的最新进展，并探讨其商业化的潜力。

A04-138**钙钛矿多结光伏的结构设计和材料筛选**

王在伟*

中国科学院深圳先进技术研究院

多结光伏作为光伏的未来产业技术，具有巨大的发展前景。基于目前的器件和材料的发展，钙钛矿基多结光伏是最有希望同时实现高效、稳定、廉价的多结光伏技术。目前许多钙钛矿基多结光伏结构还不曾被研究，未来选用的器件结构类型还不明了，于是，开发新型光伏结构极为重要，另外，基于器件结构，对钙钛矿材料的选择和开发是实现器件稳定性的基础。基于材料的筛选和开发，我们提出了增大 I/Br 混合的钙钛矿晶格扰乱可以有效抑制钙钛矿的光诱使相分离的机制，进而开发出光稳定性超宽带隙的 Rb/Cs 混合的无机钙钛矿材料，实现了三结光伏效率和稳定性的显著提升。同时，基于结构优化，我们设计了具有高效且稳定潜力的全钙钛矿四结光伏及钙钛矿/Si 与柔性钙钛矿/CIGS 的四端四结光伏器件。

参考文献：

[1] Z. Wang, L. Zeng, T. Zhu, H. Chen, B. Chen, D. J. Kubicki, A. Balvanz, C. Li, A. Maxwell, E. Ugur, R. dos Reis, M. Cheng, G. Yang, B. Subedi, D. Luo, J. Hu, J. Wang, S. Teale, S. Mahesh, S. Wang, S. Hu, E. D. Jung, M. Wei, S. M. Park, L. Grater, E. Aydin, Z. Song, N. J. Podraza, Z.-H. Lu, J. Huang, V. P. Dravid, S. De Wolf, Y. Yan, M. Grätzel, M. G. Kanatzidis, E. H. Sargent*, Suppressed phase segregation for triple-junction perovskite solar cells. *Nature* 2023, 618, 74-79.

[2] S. Hu, W. Li, S. Liu, Z. Zhou, Y. Zhang, Z. Luo, H. Jin, Q. Jin, Y. Hou*, X. Zhou*, Z. Wang*, Flexible perovskite-based multiple-junction photovoltaics. *Joule*, 2025, DOI : 10.1016/j.joule.2025.101870.

A04-139**半透明钙钛矿太阳能电池及其叠层器件**

蔡墨朗*

华北电力大学

混合卤素宽带隙钙钛矿太阳能电池因其相偏析的存在性能和稳定性仍然不理想。针对光吸收层的表界面缺陷与应力问题，我们通过引入小分子添加剂苯磺酸钠、原位外延生长方法在宽带隙混合卤素钙钛矿的晶界精确地组装一种高度结晶的阻挡结构聚乙烯苯磺酸钠 (PSSS) 晶体释放钙钛矿晶界应变、增加卤化物离子迁移到界面的势垒，在此基础上获得了基于有机无机杂化半透明宽带隙钙钛矿器件的认证效率 19.15%。针对全无机 CsPbI₃ 易受环境影响发生相变的问题，我们在前驱液中添加微量 HBr，获得 α/γ 混合相 CsPbI₃ 薄膜，相比纯相体系显著降低晶体内部应变并提升稳定性，对应的半透明器件效率提升至 19.89%；考虑到光学损失对半透明器件效率的制约，我们在前述优化基础上设计梯度折射率的双层 SnO₂ 电子传输层，增强 n-i-p 型 ST-PSCs 的光吸收，使认证效率提高到 20.22%，其与晶硅构成的四端叠层电池效率达 31%；我们将上述顶电池用于两端叠层器件制备时，先通过光学模型模拟顶底电池隔层的光学耦合以优化匹配参数，再结合埋底界面预成核调控与场钝化策略，制备出效率超 29% 的 p-i-n 型钙钛矿 / 晶硅叠层电池，同时开发 RbCl 促进高浓度 PbI₂ 溶解的厚膜制备策略，在商业化晶硅衬底上获得工业适配的绒面叠层器件，效率大于 29%；此外，我们拓展宽带隙钙钛矿在光伏建筑一体化中的应用，通过蒸镀 Ag 前沉积 1 nm Au 种子层的方式制备层状生长的 MoO₃/Au/Ag/MoO₃ 多层透明电极，并对 MoO₃ 增透层进行光学设计，使半透明器件的可见光利用率 (LUE) 达 3.23%，创 OMO 电极体系的最高值。

参考文献:

- [1] Zhuoxin Li, Xing Li*, Xianggang Chen, Xiaoxia Cui, Chunlin Guo, Xuzheng Feng, Dongxu Ren, Yaqi Mo, Miao Yang, Huiwei Huang, Rui Jia, Xuepeng Liu, Liyuan Han, Songyuan Dai*, **Molang Cai***, *Joule*, 2023, 7, 6, 1363 - 1381.
- [2] Xiaoxia Cui, Xing Li, Zishuo Wang, Zhuoxin Li, Xianggang Chen, Jixiang Tang, Xuzheng Feng, Sijia La, Jieqiong Chen, Zhao Zhang, Zhengbo Yuan, Xiaoxu Sun, **Molang Cai***, *Device*, 2025, 3, 1, 100558.
- [3] Jieqiong Chen, Xiaoxu Sun, Zishuo Wang, Xiaoxia Cui, Xianggang Chen, Zhuoxin Li, Xuzheng Feng, Jixiang Tang, Miao Yang, Zhengbo Yuan, Zhao Zhang, Sijia La, Xing Li*, Songyuan Dai, **Molang Cai***, *Advanced Functional Materials*, 2024, 35, 2411010.
- [4] Xianggang Chen, Huirong Peng, Xiaoxu Sun, Longfei Yan, Xuzheng Feng, Shuyuan Fan, Rui Jia, Songyuan Dai, Xiaolong Li, Xingmin Zhang, Xing Li, **Molang Cai***, *Small*, 2025, 25 (2500710), 1-8.

A04-140

钙钛矿/晶硅叠层太阳能电池产业化关键问题分析

李子佳*

正泰新能科技股份有限公司

目前，晶硅电池最高认证效率为 27.1%，已接近其理论极限 29.4%，通过进一步提高电池效率降低成本已基本没有空间。但是，将窄带隙的晶硅与宽带隙的钙钛矿集成两端叠层太阳能电池，可以实现对太阳能光谱的有效利用，降低热化损失，突破晶硅电池理论极限。目前实验室小面积钙钛矿/晶硅叠层太阳能电池的最高认证效率已经达到 34.6%。钙钛矿/晶硅叠层太阳能电池技术被认为是光伏技术的终极路线。目前主流的钙钛矿/晶硅叠层技术主要分为两种：钙钛矿/HJT 和钙钛矿/TOPCon。①钙钛矿/HJT 有着天然的结构优势，基本不用对底电池做任何结构修改即可集成叠层电池，但是商业 HJT 电池 N 面大绒面 (2-5 μ m) 很难通过溶液法获得高质量全覆盖的钙钛矿薄膜，因此如何平衡上下电池工艺兼容保障底电池性能和顶电池薄膜质量是未来大面积钙钛矿/HJT 叠层的关键。②钙钛矿/TOPCon 叠层，TOPCon 电池 N 面核心补氢钝化结构 SiN_x 本身绝缘需要在叠层结构中去除，因此高温工艺 (700-900 $^{\circ}$ C) 绝缘 SiN_x 的取代或去除对于高效钙钛矿/TOPCon 叠层至关重要。除上述由于底电池类型带来的差异之外，钙钛矿/晶硅叠层产业化也面临着共性挑战：(1) 大面积低温丝网金属化工艺开发；(2) 极低水氧透过率和低温封装工艺开发；(3) 稳定高

效的宽带隙钙钛矿配方筛选。本报告分享了正泰新能前沿技术研发团队在钙钛矿/晶硅叠层方面研究思路和创新性成果，也总结了未来钙钛矿/晶硅叠层亟待解决的关键问题。

A04-141

钙钛矿叠层光伏的仿真与实验

王长播*

苏州大学

全钙钛矿叠层太阳电池具有高效率、低成本等优势，近年来发展迅速。高精度仿真手段是揭示器件内部微观物理机制的重要手段，并且精确调控钙钛矿结晶性质是减少效率损失的有效策略。我们通过开发“光电热”多物理场耦合器件级仿真实验，指导实验调控功能层光电学性质；进一步发展了叠层钙钛矿吸光材料结晶性质新策略，通过增加膜厚提升载流子寿命、调控薄膜电子无序度和发展新型限域退火技术等方法，解决了锡铅钙钛矿厚膜制备难题，结合无空穴传输层器件结构，获得超过十微米的载流子扩散长度，同时借助卤素掺杂和择优晶相抑制了宽带隙钙钛矿薄膜的离子迁移和相分离，大幅提升了全钙钛矿叠层太阳电池性能。

A04-142

铜基薄膜太阳能电池制备及其叠层器件性能研究

魏要伟*

郑州大学

*通讯作者：魏要伟，研究方向为薄膜太阳能电池材料与器件、功能薄膜材料等，E-mail: ywwei@zzu.edu.cn。

研究内容：

叠层太阳电池由宽禁带的顶电池和窄禁带的底电池组成，通过对太阳光谱的分段利用提高太阳能利用率，从而提高电池效率。但组成叠层电池的子电池效率偏低和带隙不匹配限制了叠层电池的效率。为获得高效率叠层电池，首先采用磁控溅射法制备高性能 CuGaSe₂ 电池；再采用溶液法制备 CZTSSe 电池，将吸收层厚度从 100 nm 增加至 600 nm，研究电池基本性能参数和透过光谱的变化；最后进行结合理论进行叠层电池性能研究，分析禁带宽度变化对叠层电池电流匹配的影响，顶电池禁带宽度从 1.6 eV 增加至 1.9 eV，底电池禁带宽度从 1.00 eV 增加至 1.71 eV，改变顶电池厚度使叠层电池达到电流匹配，研究不同禁带宽度下叠层电池的性能。

结果与讨论：

首先采用磁控溅射法沉积宽禁带 CuGaSe₂ 预制膜，并在氩气下添加硒粉退火，得到具有大晶粒尺寸、单一相组成、高吸光性、表面平整的吸收层。高质量吸收层中晶界和缺陷数少，晶体结构有序性增加，与背界面的能级匹配度提升。制得的 CuGaSe₂ 太阳能电池光电转化效率提升，复合电阻增加，载流子复合率降低，载流子寿命增加。退火过程中添加硒粉形成硒气氛，能够补充溅射和退火过程中损失的硒元素并促进晶粒生长，得到更高质量的吸收层。

对窄禁带的 CZTSSe 电池进行研究。随着 Se/(S+Se) 比的增加，效率先增加后降低，在 Se/(S+Se) 比例为 0.2 时实现 17.38% 的峰值效率。随着吸收层厚度从 0.5 μm 增加到 1.5 μm，对光能吸收增强，短路电流和效率持续改善。当吸收体的厚度超过 1.5 μm 时，由于厚度过大，载流子难以通过吸收体传输，效率提升困难。串联电阻比并联电阻对效率的影响更大，为获得高效电池，串联电阻应控制在 2 Ω·cm² 以下，并联电阻应控制到 600 Ω·cm² 以上，获得最佳效率 17.91%。

研究叠层电池的电流匹配和性能提升机制。在叠层电池中，当顶电池带隙增加时，叠层电池的 Voc 缓慢增加，Jsc 几乎不变，FF 显著减小，而 PCE 先增加后减小；当底电池禁带宽度增加时，叠层电池的 Voc 增加，Jsc 明显减小，FF 先增加后减小，PCE 先增加后减小；最后叠层电池的效率从 21.67% 增加至 32.71%，冠军电池对应的顶电池和底电池禁带宽度分别为 1.7 eV 和 1.28 eV，对应 Voc 为 2.13 V，Jsc 为 18.87 mA/cm²，FF 为 81.52%。

结论：

为获得高性能单电池，应制备大晶粒尺寸、单一相组成、高吸光性、表面平整的吸收层，应控制串联

电阻小于 $2 \Omega \cdot \text{cm}^2$ 、并联电阻大于 $600 \Omega \cdot \text{cm}^2$ 。在叠层电池中，顶电池的带隙增大和底电池的带隙减小时，需要更大的顶电池厚度来实现电流匹配。而顶电池带隙足够宽，底电池带隙足够窄易可实现电流匹配。当顶电池和底电池带隙分别为 1.7 eV 和 1.28 eV，获得了 32.71% 的最高效率。通过提高子电池性能和子电池间的带隙匹配度制备叠层电池，有望获得突破性电池效率。

参考文献：

1. Y. Wei, X. Meng, et al, J. Mater. Chem. C, 2025, 13: 5129–5139.
2. K. Zhou, M. Zhao, X. Meng, Y. Wei*, et al, Ceram. Inter, 2024, 50: 27120–27126.
3. Y. Wei*, K. Zhou, et al, J. Alloys Compd, 2024, 976: 173123.
4. Y. Wei*, Z. Ma, et al, Mater. Sci. Engi. B 2024, 303: 117296.
5. J. Yin, X. Zhao, M. Zhao, L. Zhang, J. Tian*, Y. Wei*, et al, Mater Today Comm, 2024, 40: 109725.

A04-143

宽带隙钙钛矿太阳电池的界面缺陷钝化与结晶调控研究

陈聪*

四川大学

宽带隙钙钛矿中相分离和离子迁移的抑制以及界面缺陷的钝化，是提高器件开路电压和稳定性的关键。针对钙钛矿前界面的能带失配和引发的非辐射复合损失，我们将新型自组装单分子层（4PADCB）和给受体 p 型材料（2F）应用到宽带隙（1.77 eV）钙钛矿子电池中，获得了更加匹配的能带结构，改善了界面载流子传输速率，同时降低了界面非辐射复合损失，实现了 460 mV 低的开路电压损失，最终 1-cm² 全钙钛矿叠层电池实现了 26.4% 的认证效率。我们采用了四氢噻喃盐酸盐后界面钝化技术，使得 FA0.8Cs0.2Pb(I0.6Br0.4)3（1.77 eV）宽带隙钙钛矿的表界面缺陷和离子迁移等问题得到抑制，从而抑制了相分离，降低了开路电压损失，实现了高效 p-i-n 型单结宽带隙钙钛矿以及四端全钙钛矿叠层电池。我们也通过溶剂工程和添加剂工程调控 1.68-eV 的宽带隙钙钛矿结晶过程，提高钙钛矿薄膜结晶质量，降低缺陷密度，相应单结器件和四端钙钛矿/晶硅叠层电池分别实现 23% 和 31% 以上的效率。

参考文献：

- [1] Rui He, Cong Chen*, Dewei Zhao*, et al. Nature, 2023, 618, 80–86.
- [2] Jingwei Zhu, Cong Chen*, Dewei Zhao*, et al. Nature Energy, 2023, 8, 714–724.
- [3] Zhiyu Gao, Cong Chen*, Dewei Zhao*, et al. Journal of Energy Chemistry, 2024, 96, 120–128.
- [4] Ruohao Wang, Cong Chen*, Dewei Zhao*, et al. Energy & Environmental Science, 2024, 17, 2662–2669.
- [5] Shenghan Wu, Cong Chen*, Dewei Zhao*, et al. Advanced Materials, 2025, 2503269.

A04-144

光伏硅基固废高值转换制备辐射制冷涂料

童仲秋*

昆明理工大学

随着我国光伏硅行业的快速扩张，光伏硅生产过程产生的宏量固废亟需处理，例如 2024 年，硅渣和光伏晶硅切割废料的年产量达 30 万吨和 40 万吨。为实现以上含硅固废的高值回收再利用，研究小组提出将含硅固废转换成辐射制冷涂料的研究方案，初步研究已实现对硅渣、光伏晶硅切割废料、硅灰等含硅固废的应用转化。

A04-145

全钙钛矿叠层太阳能电池界面工程研究

王佳楠*

华中科技大学

构建全钙钛矿叠层电池能够实现对光子的高效利用,大幅减少光生载流子热弛豫损失,是打破 S-Q 效率极限的有效手段。然而,钙钛矿层与相邻电荷传输层的界面处存在大量缺陷,会引起严重的非辐射复合损失,诱导材料分解,严重制约了器件效率与稳定性。针对上述问题,我们开发了宽带隙电池埋底界面分子杂化策略,揭示了竞争吸附机制,构建了高质量自组装分子/钙钛矿异质界面;发展了窄带隙锡铅钙钛矿表面化学抛光与协同钝化策略,减少表面 Sn⁴⁺缺陷,钝化表面空位缺陷;发展了窄带隙锡铅钙钛矿埋底界面巯基功能化纳米支架策略,消除孔洞,钝化界面缺陷,抑制界面反应。基于上述方法有效提升了全钙钛矿叠层太阳能电池效率与稳定性。

A04-146

通用策略稳定宽带隙钙钛矿用于高效串联叠层太阳能电池

李升、王植平*

武汉大学物理科学与技术学院

制备高效稳定的宽带隙钙钛矿太阳能电池对于充分发挥叠层太阳能电池的潜力至关重要。然而,宽带隙电池目前普遍面临着高光电压损耗和相分离等重大挑战,这阻碍了其预期效率和稳定性的实现。此工作揭示了卤素相分离的根本原因,发现其与局部偏析的碘化铅 (PbI₂) 的存在密切相关,特别是存在于钙钛矿与 C60 的界面处的。开尔文探针显微镜 (KPFM) 结果表明,界面处偏析的 PbI₂ 导致晶粒的表面和边界之间产生电势差,从而驱动了卤素相分离的产生。本工作通过将表面残留的 PbI₂ 与乙二胺二氢碘化物 (EDAHI₂) 在适当温度下进行反应,可以实现钙钛矿薄膜表面电势的均一化,并在不同的宽带隙 (1.67-1.78 eV) 钙钛矿中均有效抑制了相分离现象。

同时,本工作通过在宽带隙倒置电池中应用这种表面反应策略,在不同带隙的电池 (1.67-1.78 eV) 上均实现了光电压约 100 mV 的显著提升。其中带隙 1.67 eV 的电池实现了 23.1% 的记录效率 (经认证为 22.95%),带隙 1.75 eV 的电池实现了 19.7% (认证为 18.81%) 的高效率。并在此技术的基础上制备的全钙钛矿叠层电池,实现了 26.1% 的高效率。

此论文揭示了宽带隙钙钛矿中的卤素相分离的根本原因,提供了宽带隙钙钛矿电池的性能和稳定性提升的有效途径,并开辟了其在光伏领域广泛应用的可能性。

A04-147

集光伏转换和能量存储于一体的高效光充电池

吴季怀*

华侨大学

太阳能是取之不尽、用之不竭的绿色能源,然而太阳辐射的间歇性、波动性和不稳定限制其连续和稳定利用。集太阳能转换和存储功能于一体的光伏储能集成器 (光充电池) 有利于不同场景太阳能捕获和利用效率提升,符合现代能源器件小型化、集成化、多功能化的发展趋势,成为新能源开发的前沿领域和研究热点。然而,由于多个组元、多维结构和多种功能于一体,特别是组元模块间的不匹配,光充电池整体效率较低,严重限制其发展。为此我们开展如下研究:

围绕核心科学问题,我们厘清光伏转换和能量存储过程中各种效率之间的关系,首次定义焦耳效率 (η_{Joule}) 为器件的放电/充电能量比。我们以钙钛矿太阳能电池作为光伏模块,对称型超级电容器作为储能模块,组装三节点光充电池。通过协调光伏模块和储能模块的能量匹配,寻求最大功率点重合和最大效率点同步,光充电池整体效率超过 18% [1]。我们设计工作电压可调的杂化超级电容器 (VAHSC) 作为储能模块 [2],串联硅电池作为光伏模块,组装三节点光充电池。VAHSC 有效地协调光伏和储能模块的电流、电压、功率和能量匹配。光充电池获得 15% 整体效率和 86% 焦耳效率,以及优异的充电/放电循环稳定性。我们设计一个多功能调制器嵌入砷化镓光伏模块和钠离子储能模块之间,协调两模块的性能匹配,获得高达 30% 里程碑整体效率以及优异的充/放电循环稳定性 [3]。

参考文献

- [1] Z. Song, J. Wu, L. Sun, et al, Nano Energy 2022, 100, 107501.
- [2] Z. Song, J. Wu, Y. Tu, et al, Energy Environ. Sci. 2022, 15, 4247-4258.

[3] L. Sun, J. Wu, W. Pan, et al, J. Power Sources 2024, 624, 235517.

A04-148

高效钙钛矿光伏电池界面材料化学

李忠安*

华中科技大学

近年来，以钙钛矿和有机太阳能电池为代表的可溶液加工新型光伏技术在效率方面取得了显著突破，但与商业化晶硅电池相比，其发展和应用仍面临着高效率与高稳定性难以兼顾的挑战。新型光伏器件普遍采用多层“三明治”的结构设计，其界面特性是决定器件性能与寿命的关键因素。得益于分子结构易剪裁的优势，有机半导体材料能够通过分子设计精准调控界面能级排列和电荷传输能力，从而为新型光伏器件的性能突破提供了重要推动力。然而，在材料本征特性、环境应力、界面相互作用以及制备工艺等因素的共同作用下，有机半导体材料的界面稳定性面临着重大挑战，其失稳机制仍不明晰。本课题组系统开展了有机半导体材料“合成创制”与“功能提升”的贯通研究，提出了“环固定共轭烯桥”、“共振两性离子”等结构设计新思路，发展了“自组装单分子层（SAM）扭曲构型分子”、“富勒烯-非富勒烯二元体”等聚集态结构增稳新策略，有效增强了有机半导体光伏界面的稳定性，实现了高效、稳定新型光伏器件的创制。

A04-149

钙钛矿太阳能电池中关键材料与器件结构研究

余桢华*

武汉大学物理科学与技术学院

钙钛矿太阳能电池（PSC）以其突出的效率、灵活的应用场景和巨大的成本潜力而成为新一代光伏技术的焦点。PSC 中的复合材料起着决定界面电荷传输、缺陷钝化、调控钙钛矿生长等重要作用，是实现高性能 PSC 的关键。因此，我们针对 PSC 的结晶取向、空间均匀二维/三维钙钛矿异质结构及埋底界面等方面进行了深入研究，成功实现认证效率 26.4%，组件效率 23.5%，及 ISOS-L-2 条件下 T98>2100 小时的优异稳定性。在全钙钛矿叠层电池（APTSC）方面，我们首次实现了双 N 型中间层结构，为 APTSC 结构设计提供了新思路；通过对锡-铅窄禁带钙钛矿空间梯度掺杂显著提升了其载流子扩散长度，通过 SnOCl 三元合金空穴传输材料的设计，同时减小了其埋底界面的电学和光学损失，最终使窄带电池效率>23%；通过宽禁带电池中复合自组装分子层设计和协同钝化等策略实现了 1.37V 开路电压、87%填充因子及>20%的认证效率。

A04-150

结晶调控和缺陷钝化制备高效钙钛矿太阳能电池

刘治科*

陕西师范大学

钙钛矿太阳能电池（PSCs）是一种利用钙钛矿型金属卤化物半导体作为吸光材料的太阳能电池，属于第三代太阳能电池。钙钛矿电池具有高光电转换效率、低成本、低能耗和广泛的应用场景等优势，被认为是未来太阳能电池的重要发展方向之一。采用溶液法制备的钙钛矿薄膜，不可避免地会产生大量的晶体缺陷，这些缺陷会造成非辐射复合，造成电荷和能量损失，从而限制了 PSCs 性能的进一步提高。同时，缺陷产生和移动是目前钙钛矿稳定性差的根本原因。因此，有必要制定策略来减少缺陷的形成和钝化形成的缺陷。报告人多年来一直聚焦于钙钛矿晶体生长调控和缺陷钝化策略，实现了 PSCs 效率和稳定性的提高。基于离子液体表面钝化和体相维度工程实现了 CsPbI₂Br PSCs 效率和稳定性的同步提升，获得了效率超过 17.5% 的 CsPbI₂Br PSCs。利用硅基乙烷体相钝化无机 CsPbI₃ 钙钛矿层，获得了效率超过 22.0% 的 CsPbI₃ PSCs，器件的室内光伏效率超过 44.0%。开发了两种新型硫脲异构体钝化材料，使无 MA 基 FACsPbI₃ PSCs 效率超过 26.0%，并实现了 3000 小时无衰减运行。开发了一种新型自组装单分子膜（SAM）材料，实现了效率为 26.4% 的倒置钙钛矿电池。

A04-151

通过界面调控提升钙钛矿太阳能电池器件性能

崔义

中国科学院苏州纳米所, 苏州工业园区若水路 398 号, 215123

表界面科学研究方法多数是基于超高真空技术实现的, 通过真空互联管道将多种表界面科学分析设备互联起来, 可以对同一样品在不暴露空气的条件下进行多谱学综合表征。在苏州建成的纳米真空互联实验站 (Nano-X) 是集材料生长、器件加工、测试分析为一体的综合用户装置。除去常规的真空互联表征仪器, 苏州纳米所 Nano-X 大科学装置平台还将手套箱、近常压 XPS、近常压 STM 进行了气氛可控的互联。通过将注入不同气氛, 实现了钙钛矿单晶及薄膜的相转变研究及元素降解的快速一站式表界面准原位研究。

在此, 我们将介绍一种通过原位混合自组装单分子层 (SAM) 增强反式钙钛矿太阳能电池空穴选择层 (HSL) 空穴提取[1]。利用 X 射线光电子能谱 (XPS)、原子力显微镜红外光谱 (AFM-IR)、飞行时间二次离子质谱 (TOF-SIMS) 等多种谱学技术对 SAM 分子在钙钛矿底界面分布进行了研究; 利用扫描电子显微镜 (SEM)、广角掠入射 X 射线衍射 (GIWAXS)、时间分辨荧光光谱 (TRPL) 研究了钙钛矿内部结晶及载流子动力学等[2]。还可通过近常压 X 射线光电子能谱 (NAP-XPS) 研究钙钛矿在不同气氛条件下 (水、氧、辐照) 的动态演变行为与机制, 及 TOF-SIMS 研究原位加热条件下钙钛矿内部离子迁移情况。

借助于超高真空设备和手套箱的互联, 可以研究钙钛矿薄膜、界面层在不同气氛下的元素降解 (迁移) 或进行原位表征。通过对薄膜的机理性分析和稳定性研究从而对钙钛矿太阳电池器件提供一定的借鉴意义。

关键词: 真空互联; 钙钛矿; 界面科学; 离子迁移

参考文献

1. X. He, Y. Cui*, et. al, J. Energy Chem. <https://doi.org/10.1016/j.jechem.2025.05.025>.
2. X. He, Y. Cui*, et. al, ACS Appl. Energy Mater. 2024, 7, 7838.

A04-152

埋底界面调控制备高性能钙钛矿太阳电池

周忠敏*

青岛科技大学

钙钛矿太阳电池因其高效率、低成本和易于制备等优势, 成为光伏领域的研究热点。然而, 器件的长期稳定性与效率的进一步提升仍是产业化的主要瓶颈。钙钛矿层与下方电子传输层之间的界面, 即埋底界面, 在电荷提取/注入、晶粒生长、缺陷态密度以及离子迁移等方面扮演着极其关键的角色。不良的埋底界面会导致严重的界面复合、能级失配、电荷提取效率低下以及加速钙钛矿层降解。因此, 对埋底界面进行精细调控是优化器件性能和稳定性的核心策略之一。

基于此, 我们提出了一种将 (3-氨基-3-羧基丙基) 二甲基氯化磺 (VU) 加入到 SnO₂ 胶体溶液中的协同策略, 以实现阳离子固定和阴离子扩散。VU 的阳离子端 (-COOH, -NH₂) 有效抑制 SnO₂ 粒子聚集, 通过化学相互作用促进电子的提取和传递。同时, 阴离子末端 (Cl⁻) 会消除 SnO₂ 表面的羟基, 占据氧空位。最重要的是, 我们采用了一种新颖的直流极化测试来阐明 Cl⁻ 迁移机制, 揭示了 Cl⁻ 在 SnO₂ 中的迁移原理, 氯离子可以穿透到钙钛矿层的底部, 形成一个宽带隙的薄层, 有助于能级排列和调节电荷转移行为。最终, 基于 VU 修饰的 SnO₂ 器件获得了 25.27% 的冠军效率。此外, 在连续光照 1110 小时后仍能保持其初始效率的 88%。

A04-153

面向临近空间应用的钙钛矿光伏技术

涂用广*、韩瑞林、赵雯颖、王沙沙

西北工业大学

金属卤化物钙钛矿半导体凭借其低成本、高性能等优势, 近年来在光伏领域受到广泛关注。钙钛矿太阳电池具有较高的光电转换效率、可期的长期稳定性、可柔性制备以及良好的耐辐射性能, 逐步成为新一代空间/临近空间光伏技术。[1] 以下介绍我们课题组在临近空间钙钛矿光伏技术方向的研究进展:

1. 临近空间应用探索: 在我国内蒙古地区进行了钙钛矿太阳能电池高空科学气球标定试验。将钙钛矿光伏器件负载在高空气球上, 研究其在距地面 35 公里的临近空间极端环境下的稳定性情况。最终获得临近空间实际工作环境下器件维持其初始效率 95% 以上的稳定性数据。[2]

2. 钙钛矿杨氏模量调控：采用具有动态化学键、可实现应力消散和机械损伤修复的聚硫辛酸 (PLACS) 的弹性体掺杂钙钛矿薄膜，以调节钙钛矿薄膜的模量，并提出了聚合物在钙钛矿薄膜中运行的机制。当应力施加到薄膜上时，PLACS 首先吸收应力，随后通过 S-S 交换过程促进应力释放。定量纳米力学原子力显微镜和纳米压痕测试证明 PLACS 的加入降低了钙钛矿薄膜的模量，较低的模量有效抵抗器件由机械应力和温度变化引起的变形，从而降低变形过程中裂纹和缺陷的形成。[3]

3. 钙钛矿低温相变研究：通过对两步法钙钛矿薄膜的纵向尺度相非均匀性进行研究，发现薄膜顶底之间存在明显的相均匀性差异，通过 4-MPCl 后处理，有效调整了两步法钙钛矿薄膜的相均匀性，消除了 PbI₂ 的影响，并针对顶表面缺陷来实现成分、形态和半导体性质的空间平衡。通过温度依赖稳态光致发光光谱测试，发现两步法中 FA_xMA_{1-x} 基钙钛矿薄膜在 80K-300K 的降温过程中会发生明显的相变过程，其中相变温度点受 x 值影响，对照组薄膜的顶部和底部的相变温度出现较大的区别，这也更加证实了两步法薄膜在纵向尺度上的非均匀性，而在实验组薄膜中顶部的相变温度点和薄膜底部的保持一致，有效改善了薄膜的均一性。同时在低温下，实验组薄膜光致发光强度相比对照组高出一个数量级，这证明了经过 4-MPCl 钝化了缺陷，更加显著降低了薄膜中非辐射复合。[4]

参考文献

- [1] Tu Y., Wu J., Xu G., et al., Adv. Mater. 2021, 2006545.
- [2] Tu Y., Xu G., Yang X., et al., Sci. China-Phys. Mech. Astron. 2019, 62, 974221.
- [3] Wang, C., Zheng, Z., Wang, Z., et al., Adv. Funct. Mater. 2024, 34: 2410621.
- [4] Qu, D., Shang, C., Yang, X., et al., Energy Environ. Sci. 2025, 18: 1310-1319.

A04-154

钙钛矿单晶载流子寿命的表征新方法

邓业浩*

重庆大学物理学院

钙钛矿单晶在光电器件和射线探测等领域拥有广阔应用前景，准确表征其载流子迁移率和寿命等参数是开发高性能探测器的基础。然而，由瞬态荧光光谱、瞬态光电压等技术给出的载流子寿命往往相差若干数量级，使单晶质量的准确表征成为一个难题。我们这里提出一种光学泵浦-电学探测的方法来表征单晶内部的载流子寿命，成功分离了载流子复合和扩散等多种因素对受激后载流子浓度衰减速率的影响，解释了不同表征方法存在巨大差异的原因。我们还利用这一方法进一步观察到了寿命接近秒级的载流子，这些长寿命载流子的存在将影响单晶探测器件的响应一致性。

A04-155

软晶格钙钛矿材料制造与力学的交叉研究

王凯、李向哲、钱劲*

浙江大学/浣江实验室

围绕软晶格钙钛矿材料的结构演化与功能构建，提出基于力-光-电-热多物理场耦合原理的制造与调控方法。通过构建新型溶胶体系与非平衡结晶路径，结合应力诱导结晶、热场调控晶界以及电场/化学势协同调控，实现对晶核形成、晶粒取向与缺陷演化的精准控制。同时，引入剪切与压应力场辅助晶体生长，构建了结晶热力学与力学响应之间的内在耦合关系，提升了材料的结构有序性与机械稳定性。进一步，构建了多物理场驱动下的结晶-力学-性能映射模型，为高性能软晶格光电器件的可控制造提供理论支撑与工艺路径。本研究为突破传统制备方法在可控结晶与力学稳定性上的瓶颈，探索了软晶格材料在极端环境下的制造新范式，亦为多场协同设计新材料提供实验基础与理论模型。

A04-156

基于功能层调控策略的高效钙钛矿太阳能电池研究

李鑫*

华中科技大学

钙钛矿太阳能电池 (PSC) 效率的显著提高使其成为下一代光伏技术的领先候选者。影响其性能的一

个关键因素是功能层,包括电子传输层、空穴传输层、钙钛矿层等,它在电荷提取和传输中起着关键作用,最终影响 PSC 的整体效率和稳定性。为了提高 PSC 的效率和稳定性,我们开展了几项以功能层为重点的关键研究计划。我们的工作包括以下方面:

1. 新型电荷传输层的开发:我们探索了新型 ETL 的可行性,例如硒化锌 (ZnSe)、二氧化钒 (VO₂)、硫化锰 (MnS) 和氧化锰 (Mn₃O₄)。这些创新材料为提高 PSC 的性能和稳定性提供了良好的前景。例如,我们报告了一种新的界面改性策略,该策略利用二氧化钒 (VO₂) 独特的金属-绝缘体转变 (MIT) 特性,将二氧化钒作为电子提取层 (EEL) 插入 p-i-n 平面 PSC 中。受益于 VO₂ 合适的中间能级,优化后的器件显示出高达 22.11% 的功率转换效率 (PCE),且几乎不存在磁滞,而室温下的基准值为 20.96%。有趣的是,基于 VO₂ 的 PSC 的 PCE 在 85° C 时增加到 23% 以上,为当时反式电池效率最高值之一。这可以归因于 VO₂ 的 MIT 在其临界相变温度之外引起的电性能的显著变化和更好的电子提取。此外,封装的 VO₂-PSC 在 1 太阳照射下于 85° C 下表现出 1000 小时的优异热稳定性,保持了初始 PCE 的 90% 以上。这项工作开创了插入热致相变材料作为 EEL 来实现高效、耐用的钙钛矿光伏电池的先进概念。

2. 新型光吸收层的开发:首次采用连续蒸发技术制备了相对致密的单相 NaBiS₂ 薄膜,选择合适的电荷传输层并优化 NaBiS₂ 薄膜厚度,制备的 NaBiS₂ 基太阳能电池 PCE 达到 2.91%,为目前该类型电池最高效率,并且在空气中储存 1000h 后,保持了原效率的 95.1%。

3. 新型钝化材料的开发:设计合成了一种双铵配体 PMEAI,用于钙钛矿/C60 界面的钝化。PMEAI 在钙钛矿表面呈平行吸附构型,其增强与 Pb-I 八面体的结合能力和低空间位阻特性有助于抑制缺陷形成并促进界面电荷传输。PMEAI 的水平取向有助于构建氢键网络结构,抑制 Ag⁺向钙钛矿层的迁移扩散,提升器件的稳定性。此外,PMEAI 能够诱导界面内建电场反转,有效抑制非辐射复合,经过修饰的 CsFAMA 基 PSCs 实现了 26.7%的效率(认证效率 25.84%)。

4. 其他功能层调控策略:添加剂工程以及界面工程等,如:引入产科硬膜外镇痛药物衍生物 ACBA 分子,其多官能团可与钙钛矿结构中的缺陷位点协同作用,形成稳定的“三位点互锁”钝化结构,有效抑制了 Pb²⁺空位形成与 I⁻迁移行为,实现了对深能级陷阱态及本征体相缺陷的精准钝化与修复。ACBA 能够引入空间位阻效应,促进钙钛矿晶格松弛与内部应力释放,从根源上改善钙钛矿结构的力学稳定性。经 ACBA 调控后,器件的光电转换效率提升至 26%以上,并在热老化和湿度环境中表现出优异的环境耐久性。

A04-157

金属卤化物钙钛矿:稳定性策略与多功能应用

潘军*

浙江工业大学能源与碳中和科教融合学院

金属卤化物钙钛矿具有独特的缺陷容忍度和优异的载流子迁移率,在太阳能电池、发光二极管、光催化等领域有着广阔的应用前景。卤化物钙钛矿由于本征离子型化合物特性和表面长碳链配体的动力学特性,相比块体材料更加不稳定。同时,在卤化物钙钛矿纳米晶在合成过程中广泛采用的长碳链表面配体存在导电性差的问题,严重阻碍了载流子迁移和复合。如何优化合成路径和调控表面缺陷,以提升其稳定性和导电性是当前光电器件中所面临的重大挑战。此次报告将重点介绍钝化钙钛矿缺陷的一些有效策略,并围绕高效稳定的光电器件的构建,分别从功能材料设计、缺陷调控和器件结构设计等角度进行讨论。

A04-158

基于氧化锡的正式钙钛矿太阳电池

姜月*、高进伟

华南师范大学

有机-无机杂化的金属卤化物钙钛矿太阳能电池 (PSCs) 因其优异的光电性能和低成本的制造工艺,是高效太阳能电池的明日之星。其中, n-i-p 型 PSC 结构广泛采用二氧化锡 (SnO₂) 等 n 型半导体材料作为电子传输层 (ETL), 并已实现单结器件认证效率高达 26.21%。其中, SnO₂前驱液的制备工艺、性能调控及其薄膜的界面缺陷对钙钛矿太阳电池的性能产生重要影响,基于 SnO₂的柔性钙钛矿太阳电池也需解决前驱体酸性过强,腐蚀柔性导电衬底; SnO₂加工温度过高,破坏柔性基底; 及界面处结合力较弱,柔性电池易分层的问题。

基于以上关键问题,本课题组展开了系统的研究。具体包括利用溶剂工程调控电子传输层结晶性,获得高电子迁移率的 SnO₂ 薄膜,并在此基础上引入微波合成工艺,将 SnO₂ 薄膜的制备温度降到室温,且显著降低前驱液酸性,匹配柔性 ITO 衬底。并在此基础上,调控其与上层钙钛矿薄膜间的界面应力,获得高界面结合力、低缺陷态密度的 SnO₂ 上表面,助力高效且高机械稳定性的柔性钙钛矿太阳能电池[1-6]。

[1] Solvent assisted low temperature crystallization of SnO₂ electron transfer layer for high-efficiency planar perovskite solar cells. *Advanced Functional Materials*, 2019, 29, 1900557.

[2] Low-temperature-processed WO_x as electron transfer layer for planar perovskite solar cells exceeding 20% efficiency. *Solar RRL*, 2020, 4, 1900499.

[3] Rapid microwave-assisted synthesis of SnO₂ quantum dots for efficient planar perovskite solar cells. *ACS Applied Energy Materials*, 2021, 4, 1887.

[4] Thermal-annealing-free SnO₂ for fully room-temperature processed perovskite solar cells. *ACS Applied Energy Materials*, 2022, 14, 41037.

[5] Ameliorating the interfacial mismatch of SnO₂ and perovskite enabling high mechanical stability for flexible perovskite solar cells. 2023, 8, 2300925.

[6] NbSe₂ nanosheets improved the buried interface for perovskite solar cells. 2024, 100029.

A04-159

反式结构钙钛矿光伏器件的异质结界面功函数调控研究

张杰*

中国科学院深圳先进技术研究院

反式结构钙钛矿光伏器件因具有更优稳定性、易制备于柔性衬底和适配于叠层电池等优点而在柔性电子器件与低成本叠层太阳能电池等方面具有广阔的应用前景。然而相比于正式器件,反式器件在光电转换过程中会产生更多的能量损失而显著降低其光电转换效率。在这里,我们通过稳态和瞬态量子效率谱学方法表征分析了反式钙钛矿器件中界面复合行为与器件性能间的关联,证实界面非辐射复合是反式钙钛矿光伏器件光电能量转换损失的主要来源,进而通过钙钛矿自生长策略与新型路易斯碱小分子钝化策略有效调控器件异质结界面功函数,进而抑制反式钙钛矿光伏器件中上下界面处的非辐射复合损失,提升器件开路电压与光电转换效率。

A04-160

稳定全无机卤化物钙钛矿材料制备及水中光催化应用

陈智*、吴健豪、贾荣荣、王筱卓、李兰、金成超

中国计量大学

近年来,全无机卤化物钙钛矿材料由于其独特的光电性能在太阳能电池等领域有广泛的应用,然而,由于其水中不稳定,金属卤化物钙钛矿材料在光催化领域的应用才起步。本文根据近年水中抗生素污染物光催化治理所取得进展,提出了光催化降解抗生素污染物的改性策略。首先,开发了一系列卤化铅铋钙钛矿材料,并成功应用于乙醇/水中抗生素污染物高效光催化去除。其次,开发了一系列无铅金属卤化物钙钛矿光催化剂新材料,并应用于水中抗生素污染物的多相光催化高效去除,深入研究了其界面作用机制以及反应机理。进一步,研究了光催化降解抗生素污染物及无牺牲试剂协同光催化产双氧水。此外,还开发了一系列纯水中产双氧水的光催化剂新材料。本文揭示了全无机无铅卤化物钙钛矿材料在光催化环境新污染治理领域的独特作用,也为纯水中高纯双氧水的高效生产提供一个有效途径。

参考文献

1. Yang X., Chen Z*, Zhao W, et al., *Chemical Engineering Journal*, 2021, 405, 126806.
2. Wu J. Chen Z*, et al., *Applied Catalysis A: General*, 2025, 689, 120009.
3. Wu J., Chen Z*, et al., *Journal of Environmental Sciences*, 2025, 152, 577 -

583

4. Gao J., Chen Z*, et al., Journal of Cleaner Production, 2024, 441, 141000.
5. Xia S., Chen Z*, et al., Journal of Catalysis, 2024, 433, 115488.
6. Zhao W., Chen Z*, Yang X, t al., Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2020, 132, 110040.

A04-161**富勒烯基钙钛矿光伏器件研究**

田成波*

华侨大学

以 C60 为典型代表的富勒烯材料具有低电子亲和势、高电子传输能力和可精准修饰等优点, 被广泛应用于钙钛矿光伏领域。C60 和 PCBM 等第一代富勒烯材料由于结构单一且在光热作用下易于团聚, 限制了其在高性能钙钛矿太阳能电池中的应用。因此, 设计合成具有不同功能基团的新型富勒烯材料并推动其在光伏领域中的应用非常重要。我们针对锡基钙钛矿材料及器件存在的问题, 设计合成出了一系列不同功能基团的富勒烯分子, 实现了锡基钙钛矿电池中界面能级和体相缺陷的有效调控, 获得了一系列高性能的锡基钙钛矿电池。这些工作可以为富勒烯等碳团簇材料的设计合成及光伏应用提供一定的理论指导。

A04-162**X-射线散射技术在溶液加工薄膜太阳能中的应用研究**

胡汉林*

深圳职业技术大学 霍夫曼先进材料研究院

掠入射广角 X-射线散射 (GIWAXS) 作为溶液加工薄膜太阳能电池结构表征的重要手段, 已广泛应用于活性层薄膜结晶度、取向行为及相分离过程的分析, 为优化器件光伏性能提供了关键结构依据。近年来, 界面工程在薄膜太阳能电池性能提升中日益受到关注, 尤其是自组装单分子层 (SAMs) 在界面能级调控、薄膜成核及载流子输运调节中的重要作用亟需系统表征。本工作以 GIWAXS 为核心表征手段, 结合 KPFM 及 IR-AFM 技术, 对有机太阳能电池中不同结构 SAMs 的分子取向、有序性及界面层厚度进行详细分析。结果表明, SAMs 的末端基团及掺杂工程能显著影响其有序排列方式、分子倾斜角及界面偶极矩, 从而调控活性层的结晶行为与相分布。通过原位 GIWAXS 测试, 实时追踪活性层在不同 SAMs 修饰基底上的成膜与结晶取向演变过程, 揭示 SAMs 界面层通过调控结晶成核及垂直相分布, 有效改善器件光伏性能及稳定性。本研究证明, GIWAXS 不仅可用于活性层微结构分析, 更可高精度解析自组装单分子层界面结构特性及其对器件性能的调控作用, 为薄膜光伏器件界面分子工程设计及优化提供可靠表征手段与理论依据。

A04-163**无机钙钛矿太阳能电池的界面调控**

向万春*

陕西师范大学

具有优异热稳定性的全无机钙钛矿薄膜有望构建稳定的钙钛矿太阳能电池, 但是窄带隙无机钙钛矿的组成、薄膜结晶质量以及界面电荷的非辐射复合限制了高效稳定无机钙钛矿太阳能电池的发展。通过对钙钛矿的晶格掺杂和结晶过程中间相的调控能够显著改善薄膜的质量, 提升结晶效果, 优化材料的稳定性。此外, 钙钛矿表面由于其暴露晶面的差异性会形成不同类型的缺陷, 成为进一步提升器件效率和稳定性的关键因素。近年课题组发展了多种钝化策略来高效钝化无机钙钛矿表面, 包括多位点锚定、螯合、原位化学反应、低维异质结构建、界面电场增强等, 显著降低界面缺陷态密度和非辐射复合, 并同时发展了锂离子配位和钙钛矿表面协同作用、以及原位交联构建超疏水层的方法, 同时提升无机钙钛矿太阳能电池的转换效率和器件稳定性。上述方法使得反式无机钙钛矿太阳能电池的转换效率达到创纪录的 21.7%, 并表现出优异的器件的工作稳定性。

A04-164**稳定高效准二维钙钛矿光伏器件研究**

周惠琼*

国家纳米科学中心, 北京中关村北一条 11 号, 100190

效率、稳定性和可拓展的大面积器件制备技术是钙钛矿太阳能电池实际应用的三个关键。相比于三维钙钛矿太阳能电池, 二维钙钛矿中的 R-P 型和 D-J 型太阳能电池因具有优异的稳定性和器件性能, 近年来引起广泛的关注。然而, 由于 D-J 型钙钛矿生成能较高, 结晶质量难于控制, 其太阳能电池的光电转化效率性能提升的研究仍相对不足。如何合理开发性能优异稳定的 D-J 型钙钛矿材料, 并且实现高效、稳定性及其可拓展大面积的器件工艺成极具挑战。我们利用柔性的 1,4-环己烷二甲胺合成设计了一系列新型的轻微层间位移型 D-J 钙钛矿材料。对材料的稳定性研究, 发现这类材料具有优异的湿度、热及其光照稳定性。研究人员进一步采用刮涂工艺制备了系列 D-J 型钙钛矿太阳能电池, 并且在 $n=5$ 的钙钛矿组分中获得最高的转换效率。未封装电池在~90%相对湿度老化条件下 4000 小时后可保持其初始效率的 92%。更重要的是, 这些电池还表现出显著的热稳定性 (85°C) 和运行稳定性, 在经过超过 5000 小时的热处理后, 或在 100 mW cm^{-2} 连续光照下在 45°C 下以最大功率点运行超过 6000 小时后, 效率损失可忽略不计。该工作在效率和稳定性上的突破, 为高效稳定的准二维钙钛矿电池制备及产业化提供了借鉴。

A04-165**卟啉/酞菁配合物基钙钛矿太阳能电池**

曹靖*

兰州大学化学化工学院, 兰州, 730000

我们研究思路就是通过卟啉/酞菁配合物结构设计实现高效稳定大面积钙钛矿太阳能电池组装。具体为: (1) 新型卟啉/酞菁配合物空穴传输材料设计; (2) 卟啉/酞菁配合物调控大面积钙钛矿薄膜制备, 已经实现了孔径面积为 12 cm^2 的电池器件效率超过 24% 的突破 (图 1)。

A04-166**Suppressing Open-Circuit Voltage Loss in Perovskite Solar Cells via multiple-dimensions Crystallization Dynamics Regulation Strategy**Chunfu zhang^{1, a *}, Hang Dong^{1, b} and Dazheng Chen^{1, c}¹School of Integrated Circuits, Xidian University, Xi'an 710071, People's Republic of China

acfzhang@xidian.edu.cn, bdonghangxd@163.com, cdzchen@xidian.edu.cn

Despite the dazzling progress since the emergence of perovskite solar cells (PSCs), a significant ideal-reality discrepancy with respect to the open-circuit voltage (VOC) remains the primarily factor, restricting the power conversion efficiency (PCE) relative to its Shockley-Queisser theoretical limit. Eliminating the detrimental non-radiative recombination centers enriched at the surface/grain boundaries of perovskite films is therefore regarded as the key approach to bridge this gap. Herein, a perovskite crystallization dynamic regulation template is conducted to ensure the realization of controllable nucleation and crystal growth process through synchronous incorporation of precursor solvent with high boiling point (1-Methyl-2-Pyrrolidone (NMP)), large-radius cation (guanidinium (GA⁺) and dimethylammonium (DMA⁺)) and volatility cation containing additives (NH₄SCN). Our findings indicated that the GA⁺/DMA⁺ doping strategy is toward to inhibits the formation of α -phase perovskite crystals owing to its larger ionic radius, thereby promoting the formation of perovskite films with enlarged grain size. Simultaneously, the NMP-doping strategy has assisted controllable crystallization dynamics in as-cast films by optimizing nucleation density and crystal growth rate through a delayed supersaturated environment induced re-dissolution function. Notable, we demonstrated that the volatile NH₄⁺ ligands are likely to accelerate the nucleation process of perovskite by coupling with the Pb-I framework, and then escaped immediately upon transferring the pre-cast films to a hotplate, the subsequent crystal growth behavior was inhibited by impeded interaction between FA⁺ and Pb-I framework, deriving from the stronger adsorption energies (E_{ads}) between the SCN⁻ and FA⁺ cations. In conjunction with above strategies, perovskite films with enlarged grain size, superior crystallinity, ordered surface texture and compensated residual strain is final fabricated. Thereby, mitigatory defect density and suppressed non-radiative carrier recombination are acquired in

relevant films, leading to impressive power conversion efficiencies of 26.13% with one of the lowest VOC losses among all reported p-i-n structure PSCs, reaching 96.13% of their theoretical VOC limit.

Keywords: Perovskite solar cell; Nucleation density; Crystal growth rate; Non-radiative recombination; Open-Circuit Voltage Loss.

A04-167

组分设计与缺陷钝化策略制备宽带隙钙钛矿太阳电池

方志敏¹、严楠²、聂婷²、刘生忠*²、丁建宁¹

1. 扬州大学

2. 陕西师范大学

钙钛矿/硅叠层电池具有突破单结太阳电池理论效率的巨大潜力，受到研究人员的广泛关注。作为顶电池的宽带隙钙钛矿材料，通常需要利用溴取代部分碘以实现合适的带隙（1.68 eV）。然而，宽带隙钙钛矿太阳电池面临两大关键挑战：一是较大的 V_{oc} 损失，二是光致相分离。这两个问题极大地限制了器件光电转换效率和持续光照输出稳定性的提升。本论文结合组分设计和缺陷钝化策略，有效降低了宽带隙钙钛矿的 V_{oc} 损失，并提高了光稳定性。主要工作有：

1. 利用氟化物梯度钝化策略，钝化宽带隙钙钛矿的负电性深能级反占位缺陷，抑制非辐射复合，降低 V_{oc} 损失；
2. 利用氨基酸型胺盐添加剂同时钝化深能级反占位缺陷和浅能级卤素空位缺陷，抑制非辐射复合和卤素离子迁移；
3. 通过 A 位和 X 位调控，制备相同带隙但不同组分的宽带隙钙钛矿太阳电池，解析薄膜结晶动力学及光电性质与组分的依赖关系；
4. 开发无反溶剂方法制备高效光稳定的纯碘宽带隙（1.68 eV）钙钛矿太阳电池，并结合界面优化，进一步提升器件性能。与相同带隙混合卤素钙钛矿相比，纯碘钙钛矿展现出更加优异的光稳定性。

A04-168

钙钛矿太阳能电池的表界面研究

谢立强*

华侨大学

钙钛矿太阳能电池是极具前景的下一代光伏技术，如何在保持其高效率的前提下提升器件的工况寿命是亟待解决的关键问题。钙钛矿太阳能电池中各层的表面、层与层之间的界面将决定器件中的光生载流子传输和非辐射复合，进而显著影响器件的效率和稳定性。本报告将介绍课题组近年来在钙钛矿薄膜内部晶界控制、表面缺陷钝化和界面重构方面的研究进展。首先我们通过晶种辅助钙钛矿结晶和水汽促进钙钛矿薄膜生长的方法控制钙钛矿薄膜的内部晶界，得到高质量的钙钛矿薄膜。然后采用离子扩散辅助和气氛扩散辅助的方法实现了钝化剂在钙钛矿薄膜中的高效迁移，发展了一步后处理同时钝化钙钛矿太阳能电池多个界面的新方法。其次，为了提升钙钛矿/传输层界面的质量，我们通过纳米抛光的方法去除钙钛矿薄膜的表面缺陷层，再通过分子钝化新暴露的表面，实现了钙钛矿太阳能电池的表面重构。最后，我们通过引入电荷导通/离子阻挡的超薄隔膜实现了高效率器件稳定性的显著提升。我们的研究获得了认证效率达 26.1% 的钙钛矿单结太阳能电池和认证效率达 33.1% 的钙钛矿/晶硅叠层太阳能电池。

A04-169

钙钛矿光伏器件的表界面调控研究

张鸿*

复旦大学

面向国家发展新能源的战略需求及培育新型光伏产业的紧迫性，报告人聚焦于钙钛矿光伏材料与器件的研究。针对钙钛矿半导体薄膜大面积均匀性和稳定性等瓶颈问题开展系统研究，提出了原位构筑埋底界面混合维度钙钛矿异质结策略，实现了无甲铵反式结构钙钛矿太阳电池领域最高效率 25.1%；发展了超分子复合钝化策略，实现了高效率（>22%）稳定（75℃光照下运行 1000 小时保持>91%初始效率）反式结构钙钛矿太阳电池；提出了共溶剂调控钙钛矿溶胶的团簇结构及稳定性的思路，显著提升了大面积钙钛矿薄

膜的均一性。最后，报告人将简要介绍课题组最近在半透明宽带隙钙钛矿电池及叠层器件方面的初步研究结果。

A04-170

基于碘化铅调控的钙钛矿太阳电池研究

郭俊雪、李灿、于为*

大连化学物理研究所

碘化铅 (PbI₂) 是制备铅基卤化物钙钛矿太阳电池必不可少的原材料之一，且通常需适当过量。过量 PbI₂ 具有钝化晶界和界面处缺陷，减少载流子复合损失等作用，但残留 PbI₂ 在光照下分解生成 Pb 和 I₂，诱发钙钛矿薄膜降解，导致器件稳定性降低，而器件稳定性又是钙钛矿太阳电池产业化面临的重大问题与挑战。因此，调控残留 PbI₂，平衡过量 PbI₂ 的利弊，保证高效率钙钛矿太阳电池同时具有高稳定性，是促进钙钛矿太阳电池产业化进程的必经之路，对其长远发展有着非常重要的指导意义。

围绕残留 PbI₂ 在提升器件效率和降低稳定性之间的矛盾，我们使用多功能交联剂调控钙钛矿结晶过程中产生的应力，并钝化残余 PbI₂，获得了 50mV 开压的提升，进而利用离子液体与 PbI₂ 反应，形成自组装的超分子络合物，并进一步精准连续转化晶界处残留的 PbI₂，进而协同调控残留 PbI₂ 在钙钛矿上下界面的分布，解决残留 PbI₂ 随机分布和界面差异性问题，对钙钛矿薄膜中已存在的残留 PbI₂ 调控实现从单一界面到多界面协同；此外，对于残留 PbI₂ 来源的控制，我们通过添加剂工程稳定 α -FAPbI₃ 初始相抑制钙钛矿热退火分解生成残留 PbI₂，并利用多级界面体系动态调控钙钛矿工况下分解产生的 PbI₂，解决残留 PbI₂ 引起不稳定的关键科学问题，实现了器件效率和稳定性的双重提升。

参考文献:

- [1] Hengkai Zhang, Wei Yu, Gang Li*, et al., Excess PbI₂ Management via Multimode Supramolecular Complex Engineering Enables High-Performance Perovskite Solar Cells, *Adv. Energy Mater.* 2022, 2201663.
- [2] Hengkai Zhang, Wei Yu*, Gang Li*, et al., Multifunctional Crosslinking-Enabled Strain-Regulating Crystallization for Stable, Efficient α -FAPbI₃-Based Perovskite Solar Cells, *Adv. Mater.* 2021, 33, 2008487.
- [3] Junxue Guo, Wei Yu*, Can Li*, et al., Enhancing perovskite solar cells performance via sewing up the grain boundary, *Nano Energy*, 2023, 115, 108740.
- [4] Junxue Guo, Wei Yu*, Can Li*, et al., Stabilizing initial phase for efficient and stable FAPbI₃ perovskite solar cells, *Chem. Eng. J.* 2024, 500 156803.

A04-171

Synergistic Cooperation between Photovoltaic and Thermoelectric Effects in Solar Cells

Ping Fu, Can Li*

Dalian Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences

Efficient utilization of thermal energy generated from infrared light has long been a focal point in the development of high-efficiency photovoltaic (PV) devices. Theoretically, the thermal energy can be converted to electricity through the thermoelectric (TE) effect. However, integrating PV and TE effects in a PV device for solar-to-electricity conversion has remained largely unexplored. Herein, we investigated the concurrent utilization of PV and TE effects under a temperature gradient (ΔT) across perovskite solar cells (PSCs). A record power conversion efficiency (PCE) of 27.17% (26.87%, average) was achieved for FAPbI₃-based PSCs at $\Delta T = 10$ °C, compared to the control cases with PCE of 25.65% (25.28%, average). The exemplary PCE is attributed to full spectrum utilization of solar energy and directional regulation of charge carrier transport induced by built-in temperature gradients, which facilitates their efficient collection. Our findings reveal the TE effect in the PV process and demonstrate the synergistic

cooperation between PV and TE effects for enhancing the performance of PSCs.

A04-172

羟基锚定转化策略构筑自组装复合结构实现高效稳定钙钛矿太阳能电池

杨霞^{*1}、杨艳¹、胡笑添²

1. 江西科技师范大学
2. 南昌大学

自组装单分子层 (SAMs) 作为钙钛矿太阳能电池中的空穴传输层 (HTL), 其在氧化铟锡 (ITO) 基底上的不稳定性 (易受溶剂影响而被冲洗或脱落) 给实际应用带来了挑战, 阻碍了致密均匀 SAM 的形成。通过探究自组装单分子层在 ITO 上的吸附动力学以及不稳定锚定的原因, 我们设计了一种新型的胍改性聚氨酯硅氧烷弹性体锚定分子 (Z1), 与 [2-(3,6-二甲氧基-9H-吡啶-9-基)乙基]磷酸 (MeO-2PACz) 共同构建自组装复合结构 (SACS)。首先, Z1 分子结构的胍基与 MeO-2PACz 磷酸基团间的强相互作用及其内聚链段产生的范德华力, 增强了 SAMs 在界面上的吸附能力和锚定作用, 将弱键合的 MeO-2PACz 转化为强键合形式, 有效抑制了旋涂过程中 MeO-2PACz 在 ITO 表面的迁移和在后续工艺中因溶剂洗涤导致的脱落, 促进了致密均匀 SAM 的形成。其次, SACS-SAM 显著提高了电荷收集能力并抑制了界面非辐射复合。同时, Z1 分子末端的胺基能够与钙钛矿晶格中的 Pb^{2+} 和 I 相互作用, 优化钙钛矿的成核与结晶过程, 提升薄膜质量并降低了界面缺陷密度。基于 SACS-SAM 的 PSC 实现了 26.37% 的高效率和长期稳定性。SACS 策略为提升钙钛矿太阳能电池性能与稳定性提供了有效的解决方案, 为高效钙钛矿光伏制备技术提供了重要支持。

A04-173

Surface Diffusion Engineering of Phase-Pure 2D Perovskite Layer for Efficient Perovskite Photovoltaics

Kun Zhang, Yang Wang*, Yanlin Song

Institute of Chemistry Chinese Academy of Sciences

Passivation molecules with highly reactive molecular ligands can easily penetrate into the bulk 3D perovskite film, resulting in a mixed-dimensional phase of 2D perovskite through a progressive diffusion process. Here, we utilize the noninvasive surface reaction (NSR) strategy to trigger the interfacial solid reactions between passivation molecules and 3D perovskite via precisely regulating the cation surface diffusion under the temperature and applied pressure, solving the problem of the mixed dimensionalities of 2D perovskite on the 3D perovskite surface and achieving a pure-phase 2D perovskite contact layer with a well-defined dimension. This universal NSR approach, compatible with most Ruddlesden-Popper molecules, effectively prevents the progressive phase transitions typically observed in solution-based processes. It reveals the formation mechanism of pure-phase 2D perovskite and well-defined dimension by the interaction force and reaction path. The as-prepared champion device (n-i-p type) delivers a PCE of 26.13% (certified efficiency of 25.66%, 0.085 cm^2) without efficiency loss after 1200 h of operational stability tests (ISOS-L-1) and T87 of 1145 h (ISOS-L-2). The mini-module (n-i-p type) achieves an efficiency of 23.03% (certified quasi-steady-state PCE of 22.32%, aperture area 13.94 cm^2) with a T80 of 1200 hours.

A04-174

Molecular engineering self-assembled monolayers for perovskite solar cells

Weihua Tang*

Xiamen University

Perovskite and organic solar cells have emerged as the most promising new generation of photovoltaic technologies for commercialization. They are advantageous for solution processing large-area devices with high power conversion efficiency (PCE). The lab efficiency record of 27% and 29% has been broken for sing-junction perovskite solar cells (PSCs) and all-perovskite

tandem solar cells in ~ 0.05 cm² device area. The charge transport layers between light-absorbing layers and electrodes play a crucial role for device efficiency and stability. In the pursuit of high-performance PSCs, there are some challenges facing in use of traditional hole transport layer (HTL) materials (ca. PEDOT:PSS, PTAA and Spiro-OMeTAD) and electron transport layer (ETL) materials (ca. C60, PCBM and SnO₂). High-quality film forming of light-absorbing and efficient charge extraction and transport from the charge transport layers have thus attracted great attention from researchers in the photovoltaic community. The approaches are in great demand for suppressing the non-radiative recombination energy loss and promoting efficient charge transport as well as improving the operation stability of the devices.

We report herein our recent progress in the development of new self-assembled charge (both hole and electron) transport materials to achieve high-efficiency and stable solar cells. Their design principles will be discussed for molecular design in modulating molecular energy levels, aggregation/orientation, charge transfer and solution processability. The potential for improving interface quality and suppressing non-radiative recombination energy loss has been explored in various types of solar cells, where record PCEs achieved together with outstanding device stability [1-8]. The rational design of self-assembled charge transport layer materials can thus be beneficial for mass-production of next-generation solar cells for practical applications.

Keywords: Self-assembled monolayers, charge transport materials, perovskite solar cells

References:

1. He, R.; Wang, W.; Yi, Z.; Lang, F.; Chen, C.; Luo, J.; Zhu, J.; Thiesbrummel, J.; Shah, S.; Wei, K.; Luo, Y.; Wang, C.; Lai, H.; Huang, H.; Zhou, J.; Zou, B.; Yin, X.; Ren, S.; Hao, X.; Wu, L.; Zhang, J.; Zhang, J.; Stolterfoht, M.; Fu, F.; Tang, W.; Zhao, D. *Nature* 2023, 618, 80–86.
2. Yi, Z.; Wang, W.; He, R.; Zhu, J.; Luo, Y.; Xu, Y.; Wang, Y.; Zeng, Z.; Wei, K.; Zhang, J.; Tsang, S.-W.; Chen, C.; Tang, W.; Zhao, D. *Energy Environ. Sci.* 2024, 17, 202–209.
3. Li, X.; Wang, W.; Wei, K.; Deng, J.; Huang, P.; Dong, P.; Cai, X.; Yang, L.; Tang, W.; Zhang, J. *Adv. Mater.* 2024, 36, 2308969.
4. Wang, W.; Liu, X.; Wang, J.; Chen, C.; Yu, J.; Zhao, D.; Tang, W. *Adv. Energy Mater.* 2023, 13, 2300694.
5. Wang, W.; Lin, Z.; Gao, S.; Zhu, W.; Song, X.; Tang, W. *Adv. Funct. Mater.* 2023, 33, 2303653.
6. Wang, W.; Li, X.; Huang, P.; Yang, L.; Gao, L.; Jiang, Y.; Hu, J.; Gao, Y.; Che, Y.; Deng, J.; Zhang, J.; Tang, W. *Adv. Mater.* 2024, 36, 2407349.
7. Wang, W.; Li, X.; Gao, L.; Liu, G.; Yang, L.; Zhou, W.; Hu, J.; Gao, Y.; Che, Y.; Ning, Z.; Zhang, J.; Tang, W. *ACS Energy Lett.* 2025, 10, 2550–2558.
8. Kong, Y.; Wang, W.; Guo, X.; Yang, Y.; Chen, T.; Zheng, X.; Yu, W.; Wang, Y.; Wang, M.; Hu, Y.; Xu, C.; Wang, D.; Hong, Z.; Tang, W.; Chen, H.; Zuo, L. *Adv. Mater.* 2025, 37, 2501117.

A04-175

基于抑制离子迁移提高钙钛矿光伏器件本征稳定性的研究

何冬梅

昆明理工大学

钙钛矿太阳能电池具有类似三明治的叠层结构，每一层代表一个功能层，各功能层中都存在游离的离

子, 这些游离的离子能够从原本所在的功能层迁移至其它功能层, 一方面导致原功能层发生结构形变, 甚至坍塌, 另一方面, 也会打破其它功能层的结构平衡, 从而发生降解。另外, 离子之间的交叉迁移, 也会使它们之间发生不可逆的化学反应, 最终导致器件效率快速衰减。鉴于此, 报告人基于亚分子尺度精准调控策略, 设计一系列修饰分子, 通过增强分子与迁移离子之间的化学作用力, 抑制其迁移, 稳定各功能层及相关界面, 从而提升器件的效率和运行稳定性。

A04-176

热稳定的 1D/3D 钙钛矿形成动力学及其稳定高效的光伏电池研究

梁禄生, 高鹏*

中国科学院福建物质结构研究所 福州

厦门稀土材料研究所 厦门

钙钛矿太阳能电池效率的快速发展离不开表界面的缺陷钝化, 特别是低维 (LD) 钙钛矿钝化。然而, 通常的 2D 钙钛矿钝化, 阳离子在热的作用下易于迁移渗透到 3D 钙钛矿内部或者甚至转化为 1D 相, 导致器件不稳定。此外, 使用大体积阳离子形成 LD 钙钛矿钝化层的背后机制, 以及不同维度钙钛矿之间的转化过程仍不明确。鉴于此, 我们对 N-甲基-1-萘甲铵 (M-NMA⁺) 阳离子进行了系统的研究, 对其形成的不同维度结构进行全面比较, 深入研究低维钙钛矿相的形成、结晶和转变。研究发现 M-NMA⁺ 的分子间 $\pi - \pi$ 堆叠及其与产物结构内无机 PbI₆ 八面体的氢键连接 (N-H \cdots I) 控制 LD 钙钛矿的形成。在 DMF 前驱体溶液中, 可以同时获得 1D 和 2D 两种产物。特别地, 由于 M-NMA⁺ 和 DMF 溶剂之间的强相互作用, 与 1D 相相比, 2D 钙钛矿的形成高度依赖异质成核, 这是在 Ruddlesden - Popper 2D 钙钛矿中首次报道。

此外, 使用 M-NMAI 的 IPA 溶液对 3D 钙钛矿薄膜进行后处理, 仅在表面形成热稳定的 1D 相。1D 具有比 2D 更稳定的结构, M-NMA⁺ 分子间具有更有利的 $\pi - \pi$ 相互作用以及与无机 PbI₆ 八面体更强的氢键连接, 同时具有更加牢固的链状 PbI₆ 八面体无机骨架。由此产生的 1D/3D 异质结构, 不但使得钙钛矿太阳能电池获得创纪录的 25.51% 的效率 (1D 钙钛矿钝化), 而且还显提高了未封装器件在 85 ° C 下的热稳定性。

关键词: 热稳定, 低维钙钛矿形成动力学, 异质成核, 钙钛矿太阳能电池

参考文献:

[1] Lusheng Liang, Zi-Ang Nan, Yuheng Li, Yi Zhang, Zhaofu Fei, Naoyuki Shibayama, Zilong Zhang, Zexin Lin, Weizhong Chen, Chi Li, Yong Chen, Zhaoxiong Xie, Paul J. Dyson, Mohammad Khaja Nazeeruddin, and Peng Gao*, Formation Dynamics of Thermally Stable 1D/3D Perovskite Interfaces for High-Performance Photovoltaics, *Advanced Materials*, 2025, 37, 2413841.

A04-177

通过共价有机骨架中的碘限制策略增强钙钛矿太阳能电池的稳定性

马晓婷*

华中科技大学

钙钛矿太阳能电池 (PSC) 在太阳能-电能转换应用中展现出高的能量转换效率。然而, 由于其在实际运行条件下的低稳定性, 这项新兴技术的商业化受到限制。造成这种性能下降的主要原因是碘物种在光照、电场和热应力作用下的形成和逸出。本文提出了一种利用多功能富氮共价有机骨架 (TAPT-BP-COF) 将碘物种限制在钙钛矿层中的新方法。TAPT-BP-COF 的有序孔结构和表面结合基团不仅有利于与碘分子形成电荷转移复合物, 而且还能够与配位不足的铅离子进行多位点螯合, 从而提高钙钛矿薄膜的质量。这种碘限制策略使得所在的 Cs_{0.05}MA_{0.05}FA_{0.9}PbI₃ PSC 器件 (n-i-p) 在一个太阳光照射下实现了 25.58% (0.06 cm⁻²) 的功率转换效率。在 N₂ 气氛中连续 1200 小时的最大功率点跟踪后, 未封装的器件仍保持了其初始效率的 96% 以上。重要的是, 即使在 ISOS-L-2 协议的高温下, 采用 TAPT-BP-COF 的 PSC 也表现出优异的稳定性, 在 85 ° C 下保持 800 小时仍可以保持其峰值效率的 90%。

A04-178

羟基助力铅抑制功能电子传输层及钙钛矿太阳能电池效率提升研究

樊慧超、苏海军*、李兴辉、郭敏

西北工业大学

效率、稳定性、毒性是钙钛矿太阳能电池（PCE）商业化进程最需要解决的三个关键问题。目前大多数研究聚焦于采用铅离子络合分子对钙钛矿吸光层进行优化来提升器件的效率、稳定性以及降低铅的泄露。本研究在上述研究的启发下，将羟基官与二氧化锡胶体络合，减少了二氧化锡胶体团聚，使得电子传输层更加均匀致密。研究表明：羟基优化后的二氧化锡电子传输层，降低了二氧化锡电子传输层的本征缺陷，调节了电子传输层的能级，使其与钙钛矿吸光层能级更加匹配，加快了电子的萃取与传输，优化了整体器件的性能。更重要的是，羟基与金属阳离子的络合能力为电子传输层新增了铅抑制的功能，这种策略并不会影响钙钛矿层，只会在钙钛矿层被破坏时发挥作用。随着钙钛矿太阳能电池商业化不断发展，铅抑制功能注定不会只布局在钙钛矿层，在与钙钛矿太阳能电池相邻的电子传输层及空穴传输层增加铅抑制功能，将会进一步降低钙钛矿中铅的泄露，推动绿色清洁能源稳步前进。

A04-179

面向可印刷光伏的钙钛矿量子点导电墨水

张旭良*、袁建宇

苏州大学

胶体量子点（QDs）因其带隙可调、多激子效应等独特性质在光伏领域引起极大关注；此外，简单可控的合成过程、结晶和成膜过程的去耦、绿色溶剂室温溶液加工等优势使其更兼容于大面积光电器件的高通量印刷制备。然而，合成中长链绝缘配体的引入抑制了量子点之间的电子耦合，在钙钛矿量子点（PQD）薄膜制备中须进行繁琐的逐层沉积和固相配体交换过程，这严重制约了其在大面积印刷光电器件中的实际应用。因此，设计合成稳定的胶体 PQD 导电墨水，在提高量子点间电子耦合的同时简化薄膜制备工艺，是兼容大面积印刷制备光电器件的有效方法。基于此，我们开发了序列“酰化—配位”策略，通过引入功能性胺（二丙胺）与长链油酸酰化反应，在移除油酸配体的同时利用量子点表面动态结合过程诱导油胺配体脱附；在此基础上进一步在体系中添加可非极性溶剂溶解的强亲和 Lewis 碱（三苯基膦）配体与缺陷配位来修复表面并提高量子点的分散稳定性。该策略展现出了针对不同体系 PQD（FAPbI₃、MAPbI₃、CsPbI₃）在制备导电墨水的普适性。基于设计合成的空气稳定的 PQD 导电墨水，该团队开发了一步沉积工艺来制备量子点薄膜，在简化了制备工艺的同时所沉积的薄膜相比于逐层沉积的薄膜展现出更优异的形貌，更高的薄膜电导率，更低的缺陷态密度，有序的取向组装及均一的能量分布。最终，基于窄带隙 FAPbI₃ PQD 导电墨水制备的小面积太阳能电池实现了 16.61%（认证 16.20%）的光电转换效率，1 cm² 器件实现了 14.05% 的效率，以及更优异的稳定性。同时，合成的 PQD 导电墨水可应用于大面积薄膜快速的快速刮涂制备（速度窗口 50 mm/s），为新型高效光伏及其他光电器件的高通量制备提供了新的实验路径。

A04-180

光电转换与存储材料结构设计与器件构建

秦鹏*

中科院上海硅酸盐研究所

以太阳能电池为代表的光电转换器件是太阳能利用最有效的途径，其利用光生伏特效应将光能转换为电能，在便携式电子设备、民用发电、军用电源等领域具有广阔的应用前景。然而目前的光电转换器件仅能实现光电转换，无法实现能量存储，因此无法直接应用于持续性供电。另外，太阳能的间歇性和波动性在一定程度上制约了其实际应用。将太阳能电池与储能电池联用构建分立式体系，成为目前光储结合的一种有效手段。然而通过外部组合的分立式结构体积大、成本高、能量损失高。随着高效、低成本、紧凑轻量化光储一体系统在各个领域的需求不断增加，开发新型高效光储一体集成器件对未来新能源产业的进一步发展具有重要意义。

我们发现金属-有机框架多孔材料自身具有 Li⁺、Na⁺、K⁺离子存储特性，其表面暴露的部分金属位点可通过二次反应原位转化为具有光吸收特性的钙钛矿纳米晶，使材料兼具光响应与离子存储特性。

经过初步筛选, 选取植酸铅作为离子存储单元, 搭配与之能级匹配的 CsPbBr₃ 作为光吸收单元, 二者物理混合体系在 0.2C 电流密度光辅助条件下, 光照对充放电电容量的增长效率分别为 11.4% 和 64.8%。在此基础上, 进一步以植酸铅框架为基底, 在其表面原位生长具有光响应特性的 CsPbBr₃ 纳米晶, 成功制备出系列兼具光响应与离子存储特性的新型双功能材料, 并基于该类材料首次实现了准固态光电转换与存储原型器件制备。器件在 AM 1.5 (100 mW/cm²) 标准太阳光照下, 电压可由 1.0 V 提升至 2.8 V。通过结构功能区构建, 我们获得兼具光电转换与存储双功能的半导体材料, 并实现了其在光电转换与存储一体化器件中的应用。

A04-181

有机-无机杂化钙钛矿薄膜的磁振子输运研究

任丽霞、于华*

大湾区大学(筹)

磁振子学 (Magnonics) 研究旨在以量子化的自旋波取代电子进行信息传递, 促使自旋电子器件实现高效率、低能耗, 已跻身为自旋电子学新兴研究热点之一。近年来在有机-无机杂化钙钛矿 (OIHP) 中发现的强自旋轨道耦合 (Spin-orbit coupling, 简称为 SOC) 及电子自旋输运现象, 使这类材料自旋属性初露锋芒。然而, 由于 OIHP 基异质结设计与制备较复杂严苛, 相关磁振子注入研究受限, 导致对其磁振子性能的系统认识缺失。针对这一科学问题, 我们以钇铁石榴石为磁振子源, 设计非局域的铁磁体/自旋半导体/重金属异质结构, 提出在 OIHP 薄膜中引入以温度梯度为驱动的非平衡磁振子积累策略, 即自旋塞贝克效应 (SpinSeebeck effect, 简称为 SSE), 实现对 OIHP 的磁振子热注入; 基于逆自旋霍尔效应 (Inverse spin Hall effect, 简称为 LSHE), 进行磁振子检测; 在此基础上通过表面形貌工程以及掺杂工程对钙钛矿薄膜的磁振子性质进行了调控。本文的研究成果揭示了 OIHP 的磁振子属性和输运特征, 迎合当下对自旋电子学关键科学问题 寻找长距离自旋扩散、强自旋轨道耦合兼备的抗磁性薄膜的探索, 具有重要的科学意义。

A04-182

光电材料载流子动力学

田文明*

中国科学院大连化学物理研究所

光电转换材料是将光能转变为电能或化学能的一类能量转换功能材料。深入理解材料中光生载流子分离、迁移、复合和界面转移等过程和调控机制是决定能否建立高效光电转化体系的核心因素之一。在二维钙钛矿光电材料中, 由于量子限域效应存在, 普遍认为 2D 钙钛矿中载流子以激子形式存在, 受到激子寿命和迁移率的限制, 其激子迁移距离只有数百纳米。研究首次观测到 2D 钙钛矿单晶中突破激子迁移极限的长距离载流子输运现象, 其迁移距离可达 $2\sim 5\ \mu\text{m}$ 。进一步提出了缺陷态辅助的长距离载流子输运新机理, 认为这种长距离载流子输运是通过缺陷辅助的激子解离形成长寿命和不发光的电子空穴分离态实现的。在三维钙钛矿中, 通过在 MAPbBr₃ 钙钛矿多晶膜中掺杂硒元素 (Sn), 发现金属掺杂引入大量缺陷态从而实现光生电子空穴分离, 将钙钛矿材料中载流子寿命从纳秒延长到微秒时间尺度, 提升载流子提取与利用效率。通过在低温下在 MAPbI₃ 单晶纳米线中引入相变诱导缺陷, 它们能够捕获并“保护”载流子免受辐射复合和非辐射复合的影响, 从而形成一种长寿命的非辐射态。此外, 这些载流子借助相变诱导缺陷可显著提升其自身迁移率。

A04-183

多组分溶剂工程构建空间均匀二维/三维钙钛矿异质结用于太阳能电池

徐英豪、余桢华*

武汉大学

本研究提出了一种多组分溶剂工程策略, 用于构建高质量的二维/三维 (2D/3D) 金属卤化物钙钛矿 (MHP) 异质结构, 有效解决了钙钛矿太阳能电池 (PSCs) 中超薄二维覆盖层存在的垂直不均匀性问题。通过协同溶剂配位作用, 异丙醇在空间上限域二维层在三维钙钛矿表面的形成, 同时二甲亚砜诱导三维基质的受控溶解以实现垂直相扩展。乙腈通过优化溶剂渗透动力学, 在多种阳离子体系中实现了空间分布高度均匀

的二维层。优化后的 PDAI_2 基 2D/3D 结构获得了 25.57% 的认证功率转换效率 (PCE) (最高值 26.14%)，填充因子达 85.62%，这得益于 C60/钙钛矿界面处非辐射复合的抑制所带来的界面电荷传输增强。空间均匀的二维覆盖层赋予器件卓越的运行稳定性：在暗态老化 5,000 小时后仍保持 92% 的初始效率，在连续 1 太阳光照条件下进行最大功率点跟踪 1,700 小时后仍保留 90% 的初始效率。

A04-184

纤维素基钙钛矿太阳能电池材料的制备与性能研究

张子龙²、高鹏²、吴慧*¹

1. 福建农林大学

2. 中国科学院福建物质结构研究所/厦门稀土材料研究中心

作为一种新兴的光伏技术，钙钛矿太阳能电池 (PSCs) 在过去十几年间发展迅猛，被视为最具潜力的下一代光伏技术。然而，钙钛矿材料的离子导体特性以及在器件制备过程中产生的晶界和界面缺陷，会引发严重的离子迁移和非辐射复合问题，显著降低器件的效率与长期稳定性。传统的缺陷钝化策略大多使用有机小分子或聚合物，但这些材料存在成本高、环境毒性大以及自身稳定性差等问题，限制了其实际应用。纤维素作为储量丰富的天然高分子材料，具有低成本、环境友好、稳定性高等优势。其独特的结构和含氧官能团使其成为理想的 PSCs 缺陷钝化材料。本研究开发了一系列有机芳香基团功能化的纤维素基钙钛矿太阳能电池材料。通过界面修饰及添加剂工程策略分别引入多功能纤维素基材料来调控钙钛矿薄膜表面和晶界处缺陷，抑制载流子非辐射复合，促进电荷提取和传输，改善界面性能，显著提升器件的效率和稳定性。

A04-185

钙钛矿太阳能电池界面稳定性研究

刘国震*

大连理工大学

钙钛矿太阳能电池 (PSCs) 凭借其高效率 and 低成本优势，已成为极具前景的第三代光伏技术，但其商业化进程深受稳定性挑战制约，其中界面稳定性尤为关键。界面作为离子迁移和载流子非辐射复合的关键区域，直接决定器件的寿命与性能，值得注意的是，刚性正式 (n-i-p) 器件与超柔反式 (p-i-n) 器件的埋底界面失效机制呈现显著差异。基于上述差异，我们针对性提出了不同优化策略：面向正式器件的埋底界面质子预补偿策略，以及专为超柔器件设计的双边界面锚定策略。在不牺牲器件效率的前提下，这两种策略均显著提升了相应器件的稳定性。

A04-186

High Work Function Large-Area Carbon Black Films as Conductive, Passivated, and Hole-Selective Heterocontact Layer for Highly Efficient Solar Cells

Lu Zhang, Qing Gao, Jianhui Chen*

Hebei University

Carbon black (CB), which can be prepared by environmental pollutants such as waste tires, rice husks, feedstock oil, and coal tar, presents an overcapacity phenomenon. Further increasing the new applications of CB will help alleviate the pressure of environmental pollution. Here, we employed CB to selectively transport photogenerated carriers in silicon solar cells and broaden its application in solar cells. When used as the back field for p-type silicon solar cells, it achieves a power conversion efficiency (PCE) of 22.35%. Similarly, when CB is incorporated as a component of the p-n junction in n-type silicon solar cells, it yields a PCE of 21.70%. Such high numbers in the first study demonstrate the potential of the CB contacted silicon-based solar cells. A CB film with such high work function (6.3 eV) is obtained. And the CB/Si heterojunction can be fabricated using a simple, scalable doctor blade coating at room temperature and pressure. Large-scale new applications of conventional CB materials in the photovoltaic field help to realize the sustainability concept of green chemistry.

A04-187

基于纯有机室温磷光分子制备高性能 OLED 器件

赵祖金

华南理工大学

金属有机配合物磷光材料可以实现 100% 的内量子效率，是一类已经商业化的发光材料，也是目前有机发光二极管（OLED）使用的主要材料。相比于含有铱、铂等贵金属的传统磷光材料，新型纯有机室温磷光（RTP）分子因其低成本和环境友好的优势，目前备受研究者关注。然而，基于纯有机 RTP 分子的 OLED 器件性能目前仍无法令人满意，主要是由于这些材料三线态辐射跃迁过慢、磷光寿命太长导致三线态激子湮灭严重所导致的。近期，我们设计合成了一系列新型纯有机 RTP 分子，并利用其制备了高性能 OLED 器件。首先，我们以占吨酮为核心，构筑了纯有机 RTP 分子 3,2-PIC-XT，实现了高效快速的磷光发射，其纯膜的外量子效率高达 72%，磷光寿命短至 2.9 微秒。以 3,2-PIC-XT 分子制备了高效率的非掺杂器件、非掺杂顶发射器件、非掺杂叠层器件和非掺杂厚膜器件，分别实现了高达 24.91%、24.53%、42.50% 和 17.79% 的最大外量子效率（EQE），是目前报道的基于纯有机 RTP 材料的 OLED 器件的最好性能。进一步，我们在上述分子中引入硫原子，构筑了新型的 RTP 分子 3,2-PIC-TXT，利用重原子效应进一步提高了磷光发射效率。用 3,2-PIC-TXT 来作为敏化材料来敏化多重共振热活化延迟荧光（MR-TADF）材料，制备了 EQE 超过 43% 的绿光窄光谱 OLED 器件，实现了半峰宽低至 30 nm、色坐标接近 BT2020 标准的绿光发射，综合性能优于传统金属有机配合物磷光材料敏化的 MR-TADF 器件，证明了新型纯有机 RTP 分子在高色域 OLED 显示器件的应用潜力。

A04-188

氮化碳基异质结纳米反应器的设计及其光热协同催化机理

王毓德 肖亚威

云南大学材料与能源学院，650504 云南 昆明

太阳能驱动的光热催化是一种可以直接利用太阳能生产燃料、降解有机污染物的绿色技术，而开发高性能的催化剂一直是光热催化面临的核心问题。石墨相氮化碳（g-C₃N₄）具有可见光响应、物理化学性质稳定、廉价易得等优点，是一种极具实际应用潜力的聚合物光催化材料，但光谱利用率低和载流子复合严重仍是限制其性能提升的关键因素。本研究通过光热效应耦合 S 型异质结设计了系列 g-C₃N₄ 基光热纳米反应器，旨在突破 g-C₃N₄ 基光催化剂的光谱利用和电荷分离瓶颈，获得具有广谱利用太阳光和高效载流子分离特性的 g-C₃N₄ 基光热催化材料，揭示了内建电场和光热效应在纳米反应器中的协同作用机制，认为外部温度梯度是造成光热能量损失的主要因素，并一次设计和构筑了具有空心核壳结构的 g-C₃N₄ 基 S 型异质结光热纳米反应器，实现了以纳米限域结构降低温度梯度对光热催化反应的不利影响，提出了构建 g-C₃N₄ 基 S 型异质结的普适性策略，有望降低光热纳米反应器的成本。

A04-189

锡基钙钛矿的缺陷态抑制与 LED 性能研究

常进*¹、黄维^{1,2}、王建浦^{1,3}

1. 南京工业大学
2. 西北工业大学
3. 常州大学

近年来，环境友好型锡基钙钛矿材料在发光二极管（LED）等光电领域发展迅速。然而，由于锡基钙钛矿易氧化、结晶过程难以调控等原因，导致薄膜缺陷密度高、重复性差、器件效率低等问题[1]。针对上述问题，我们利用原位光谱等技术，在揭示锡基钙钛矿薄膜缺陷形成机制的基础上，采取了添加剂工程、原位外延生长等策略，逐步降低了薄膜缺陷，从而实现了锡基钙钛矿近红外 LED 的效率突破。具体而言：1) 我们发现锡基钙钛矿自发结晶过程中，小晶粒的快速聚集是导致缺陷的重要因素之一。因此，我们利用维生素 B1 添加剂和前驱体组分之间的强相互作用，抑制了晶粒聚集和缺陷形成，获得了外量子效率为 8.3% 的锡基钙钛矿近红外 LED[1]。2) 我们通过精准调控传统二维钙钛矿结构中二维（2D）和三维（3D）晶相的结晶动力学，实现了 3D/2D 锡基钙钛矿外延异质结薄膜，降低晶体内部缺陷的同时，

抑制了微观界面缺陷, 将锡基钙钛矿近红外 LED 的外量子效率提升到 11.6%[2]。3) 基于上述工作, 我们近期厘清了传统 PEDOT:PSS 基底对锡基钙钛矿薄膜结晶取向的影响规律。研究发现, 针对发光薄膜所采用的低浓度前驱体溶液, 在不使用辅助结晶手段情况下, PEDOT+阳离子和前驱体溶液中 $[\text{SnI}_3]_{\text{nn}}$ 之间的相互作用, 导致下液面成核速率大于上液面, 诱导自下而上的结晶和颗粒状形貌。当使用柠檬酸盐对 PEDOT:PSS 进行改性, 可以降低 PEDOT+ $[\text{SnI}_3]_{\text{nn}}$ 相互作用, 使得上液面先成核, 诱导自上而下的结晶和平整致密的薄膜, 且缺陷密度更低, 从而获得 EQE 为 12.8% 的锡基近红外钙钛矿 LED, 再次刷新器件效率记录[3]。

参考文献:

- [1] Nat. Photonics, 2023, 17, 755.
- [2] Nat. Nanotechnol., 2024, 19, 632.
- [3] Adv. Mater., 2025, doi: 10.1002/adma.202503007.

A04-190

大面积高效率钙钛矿发光器件

陈文静、肖正国*

中国科学技术大学

金属卤化物钙钛矿 (如 MAPbI_3) 是一类新兴的直接带隙半导体材料, 具有优异的光电性能。与传统有机半导体相比, 钙钛矿发光二极管 (PeLEDs) 在色纯度、发射波长可调性以及高且平衡的载流子迁移率等方面展现出显著优势。得益于近年来在配体工程、缺陷钝化、光提取效率优化和载流子注入平衡等方面的突破, PeLEDs 的外量子效率 (EQE) 已从初期的约 1% 快速提升至 25% 以上。

面向低成本平板照明等实际应用, 实现 PeLEDs 的大面积、低成本可印刷制备至关重要。当前, 刮涂、喷涂与喷墨打印等技术虽具备规模化潜力, 但在大面积薄膜的均匀性和结晶质量控制方面仍面临挑战。本报告将介绍我们在大面积高效 PeLEDs 方面的研究进展, 具体包括:

1) 刮涂法制备大面积高效 PeLEDs^[1,2]: 通过优化前驱体浓度、引入过量卤化有机铵盐, 并结合氮气刀加速溶剂挥发, 提升了钙钛矿薄膜的均匀性与结晶质量。所制红光与天蓝光器件 EQE 分别达 16.1% 与 10.3%, 并实现 28 cm^2 均匀发光。

2) 溶剂流体动力学调控实现大面积白光 PeLEDs^[3]: 采用二元溶剂体系, 精准调控钙钛矿量子点 (PQD) 油墨的流变性与蒸发动力学, 有效提升其刮涂法的普适性并实现溶质的均匀再分布。通过刮涂制备的白光 PeLEDs 在小面积器件 (0.04 cm^2) 上实现了 10.6% 的 EQE, 并将发光均匀性成功拓展至 28 cm^2 的大面积器件。

3) 喷墨打印实现柔性大面积 PeLEDs^[4]: 通过调控基底润湿性, 促进液滴铺展与融合, 从而形成连续致密的钙钛矿薄膜。同时, 采用混合溶剂策略提高前驱体溶液粘度, 有效抑制“咖啡环效应”。基于该策略, 在刚性及柔性基底上均成功制备出发光均匀的大面积器件, 并展示了多色图案化 PeLEDs 的可行性。

参考文献:

- [1] Shenglong Chu, et al. Nat. Commun., 12, 147 (2021).
- [2] Shenglong Chu, et al. Adv. Mater., 34, 2108939 (2022).
- [3] Guangyi Shi, et al. Nat. Commun., 15, 1066 (2024).
- [4] Hui Liu, et al. Adv. Mater., 36, 2309921 (2024).

A04-191

有机功能材料调控钙钛矿太阳能电池的载流子动力学研究

华雍*

云南大学

钙钛矿太阳能电池具有高效率、低成本的优点, 其光电转换效率已近 27%, 展现良好的应用前景。决定钙钛矿太阳能电池光电转换效率的关键因素之一为钙钛矿材料中光激发后产生的载流子的传输 (譬如电荷产生、电荷分离、电荷传输、电荷收集等)。因此, 我们利用超快时间分辨光谱技术, 系统研究了有机

功能材料对钙钛矿材料中激发态载流子动力学过程，揭示了钙钛矿材料中载流子迁移、电荷复合等动力学机理。研究工作可为进一步提升钙钛矿太阳能电池的效率提供一定的理论指导。

A04-192

钙钛矿太阳能电池中的界面材料设计与调控

凌旭峰*、邓业浩

重庆大学

基于金属卤化物钙钛矿材料的太阳能电池凭借其简便的溶液法制备工艺、优异的光电学性质及低成本等特性引起了广泛的关注，在过去的十几年内其光电转换效率迅速飞升，如今已高达 27%，成为极具应用前景的光伏技术。然而，钙钛矿太阳能电池的不同层界面处仍存在明显的非复合损失，而且常用的基于有机分子的界面材料对器件的长期稳定性产生制约，从而阻碍其未来户外应用。针对这些问题，我们设计开发了多种无机电荷传输材料及其制备工艺，例如 SnO₂、Sb 掺杂 SnO₂ (ATO)、Sb₂O₃ 等，筛选合理的钝化剂调控其与钙钛矿的界面复合，从而提升钙钛矿太阳能电池的效率和稳定性。

A04-193

氧化亚铜光阴极水分解产氢器件结构优化设计

牛文哲^{*1,2,3}、David Tilley²、Michael Graetzel³

1. 大湾区大学（筹）

2. 苏黎世大学

3. 洛桑联邦理工学院

氧化亚铜 (Cu₂O) 因其窄带隙、丰富的储量及优异的光吸收能力，被认为是极具前景的光电化学水分解光阴极材料。然而，其在实际应用中面临载流子复合严重及稳定性差等问题，限制了光电化学转换效率的进一步提升。针对以上问题，我们采用热氧化法制备高结晶质量的 Cu₂O 光阴极，并从界面层缺陷溯源，光阴极器件结构优化，引入空穴传输层等方面入手，显著提高光阴极光电化学转化效率。取得以下主要结论：1. 通过界面缺陷修复，可以极大的提高光电流的填充因子，在 0 V vs RHE 下光电流密度达到 -8.6 mA/cm²。分析发现，氧化亚铜/氧化镓界面处的 Cu 为主要复合缺陷中心。2. 引入有机空穴传输材料 Spiro-OMeTAD 构建异质结界面，显著改善光生空穴的提取效率和界面电荷转移动力学。该复合光阴极在 0 V vs RHE 下实现了接近 -10 mA/cm² 的稳定光电流密度，且在 0.6 V vs RHE 时获得了 4.2% 的理想阴极太阳能-制氢 (STH) 转化效率。通过稳态光致发光、时间分辨荧光及电化学阻抗谱等手段，揭示了界面修饰在抑制载流子复合和提升界面电荷分离效率方面的关键作用。本研究为构建高效稳定的氧化亚铜光电极体系提供了新路径，并为非贵金属光电化学水分解技术的发展提供了理论与实验支持。

A04-194

钙钛矿结构可控设计及其光伏器件制备

张懿强

郑州大学化学学院，郑州，450001

维度可调的金属卤化物因其优异的环境稳定性及光电性质可调性等优点而受到广泛关注。近年来，报告人以探究低维金属卤化物结构-性能间的关系为主要出发点，围绕低维金属卤化物材料设计、分子尺度下的薄膜可控生长及原子尺度下的晶格动力学调控开展了系统的基础研究。通过引入直链双胺构型配体制备低维钙钛矿单晶，有效减小了层间距，有效抑制了量子限域效应。通过引入氨基酸配体制备低维金属卤化物单晶，基于配体分子较大的偶极矩抑制介电约束效应。通过引入有机添加剂调制低维金属卤化物薄膜结晶动力学，有效抑制低 n 值并提升低维金属卤化物取向性。量子限域及介电约束效应的减弱打破了低维金属卤化物激子态鲁棒性，有效提升了低维金属卤化物材料光电转换性能及稳定性。

参考文献

[1] Y. Zhang*, Y. Song*, et al. Nano Lett. 2025, 25, 7943-7951.

[2] Y. Zhang*, Y. Song*, et al. Matter 2024, 7, 3500-3517.

[3] Y. Zhang*, Y. Song*, et al. Adv. Funct. Mater. 2024, 34, 2311135.

[4] Y. Zhang*, Y. Song*, et al. Adv. Mater. 2023, 35, 2301232.

- [5] Y. Zhang*, Y. Song*, et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2023, 62, e202217910.
- [6] Y. Zhang*, Y. Song*, et al. *Chem* 2022, 8, 2939-2960.
- [7] Y. Zhang*, Y. Song*, et al. *Adv. Funct. Mater.* 2022, 32, 2205289.
- [8] Y. Zhang*, Y. Song*, et al. *Nano Today* 2022, 43, 101394.
- [9] Y. Zhang*, Y. Song*, et al. *Advanced Materials*, 2022, 34, 2106822.
- [10] Y. Zhang*, Y. Song*, et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2020, 59, 6909-6914.

A04-195

高可信高通量实验平台加速新型光伏与光谱仪技术的开发

赵怡程*

电子科技大学

光电材料与器件的高效研发涉及到多变量耦合与多目标兼顾的需求,通常要求材料组分与加工工艺的全局优化,因此亟需建立以高通量实验数据与 AI 模型为核心的研发模式。团队开发了面向电子薄膜材料与器件的高可信高安全性高通量人工智能实验研发平台。该平台通过集成本地云服务器、高通量实验装置、智能调度算法、自主决策算法,构建了覆盖“参数设计-制备执行-数据分析-AI 模型建立”的全链条研发体系。该平台单日配方研制通量可达 10^4 , 薄膜与光电器件加工通量可达 10^3 , 数据分析通量可达 10^4 以上。基于该平台,我们成功实现了高质量且稳定的单结钙钛矿光伏薄膜组分优化、钙钛矿光伏电池性能高精度预测,以及微型光谱仪的高精度重构。相关工作论证了高可信高通量实验驱动的研发模式优越性,尤其是加速新型器件研发方面产生的质变作用。

A04-196

高效率光伏电池材料设计与示范电站探索

霍勇

兰州大学教育部稀有同位素前沿科学中心

核生化灾害防护化学全国重点实验室

与晶硅太阳能电池相比,有机太阳能电池具有质量轻、可柔性印刷制备、颜色可调、质量比功率高等优势,活性层材料的创制是推动有机太阳能电池效率提升的关键,目前器件最高的能量转换效率已经超过了 20%。本报告将主要介绍团队在活性层材料创制、器件优化和示范电站探索方面的工作。通过材料设计构筑高效率的有机太阳能电池,推动有机太阳能电池产业化研究,成功建设小型示范电站并实现了并网发电,打通了材料-装备-示范电站-并网发电的全链条。

A04-197

钙钛矿太阳能电池的界面有机功能材料研究

刘宇航

西安交通大学

不同于传统的单晶硅或 III-V 族光伏材料,溶液加工的钙钛矿太阳能电池通常呈现多晶形貌,其中含有多类型界面和晶界缺陷。这些缺陷会对器件的光电转换效率和稳定性产生不利影响。为了解决这些问题,并进一步提升钙钛矿光伏器件的性能和稳定性,本研究聚焦于适用于 n-i-p 和 p-i-n 结构的钙钛矿光伏器件的有机功能材料设计和改性。通过分子工程方法,我们对界面和晶界分子的聚集性质、吸附特性以及界面亲和性进行调控,旨在增强钙钛矿光活性层和传输层的运行稳定性和热稳定性,同时提高界面层的电荷萃取效率。这种改性策略不仅有效地改善了钙钛矿光伏器件的材料结构特性,还显著提升了其光电性能,为钙钛矿太阳能电池的长期稳定性和效率提升提供了新的解决思路。

A04-198

介孔中钙钛矿薄膜结晶调控与介观电池底界面修饰研究

王栋杰*, 王金江, 张杨, 陈怡文, 张坚*

桂林电子科技大学材料科学与工程学院, 电子信息材料与器件教育部工程研究中心, 广西电子信息材料构效关系重点实验室, 金鸡路 1 号, 桂林, 541004

采用碳电极和印刷技术制备的介观钙钛矿太阳能电池(MPSCs)具有稳定性高、制备工艺简单、成本低等诸多优势,展现出广阔的应用前景。[1]然而,MPSCs的三层介孔结构对介孔中钙钛矿薄膜的高质量结晶带来一定挑战,同时钙钛矿薄膜/介孔电子传输层底界面之间的能级匹配不佳等也会导致额外的能量损失,导致MPSCs的能量转换效率(PCE)有待进一步提升。本团队围绕介孔中钙钛矿薄膜结晶调控与MPSCs底界面修饰展开。在介孔中钙钛矿薄膜结晶调控方面,本团队引入盐酸丙胺(PACl)调控 $\text{Cs}_{0.1}\text{FA}_{0.9}\text{PbI}_3$ 钙钛矿的结晶,使钙钛矿成核密度增加、结晶速率延缓,实现介孔中钙钛矿薄膜的致密填充与择优取向生长,同时PACl还可以钝化未配位 Pb^{2+} 等缺陷。最终经PACl调控的MPSCs的PCE达18.06%。[2]进一步优选含多功能团的双氰胺小分子(DCDA)到钙钛矿中,DCDA与钙钛矿能产生强相互作用,起到平衡结晶成核与晶体生长作用,同时钝化晶体缺陷,最终经DCDA修饰的MPSCs实现19.12%的最佳PCE。[3]针对MPSCs底界面处因多重缺陷诱导的额外能量损失这一关键科学问题,本团队提出一种底界面双面缺陷钝化策略,采用硫酸胍(GUA_2SO_4)作为底界面修饰剂,通过 SO_4^{2-} 与Pb相关缺陷反应生成铅氧盐配合物, GUA^+ 诱导低维钙钛矿的形成,抑制底界面的陷阱态、优化能级排列,使平均VOC增加了70 mV,最终有效提升MPSCs的PCE。[4]上述研究为提升MPSCs性能提供了可参考的方法和新的研究思路。

关键词: 介观钙钛矿太阳能电池, 结晶调控, 底界面, 碳电极, 印刷

参考文献:

- [1] J. Liu#, X. Chen#, K. Chen#, W. Tian#, Y. Sheng, B. She, Y. Jiang, D. Zhang, Y. Liu, J. Qi, K. Chen, Y. Ma, Z. Qiu, C. Wang, Y. Yin, S. Zhao, J. Leng, S. Jin, W. Zhao, Y. Qin, Y. Su, X. Li, X. Li, Y. Zhou, Y. Zhou, F. Ling*, A. Mei*, H. Han*, Science 2024, 383, 1198.
- [2] J. Wang, D. Wang*, Y. Zhang, Y. Chen, T. Huang, W. Zhu, Z. Zhang, Y. Huang, J. Xiong, D. Xiang, J. Zhang*, J. Mater. Chem. A 2024, 12, 17203.
- [3] J. Wang, D. Wang, D. Xu, Y. Zhang, T. Huang, D. Zhang, Z. Zhang, J. Xiong, Y. Huang, J. Zhang*, J. Mater. Chem. A 2024, 12, 33595.
- [4] D. Xu, D. Wang, J. Liu, J. Qi, K. Chen, W. Zhu, Y. Tao, Z. Zhang, A. Mei*, J. Zhang*, Small 2024, 20, 2311755.

A04-199

钙钛矿半导体材料及多功能光电器件研究

常晶晶*

西安电子科技大学, 陕西省西安市雁塔区太白南路2号, 710071

近年来基于卤化物钙钛矿半导体材料凭借光吸收系数高、带隙可调、扩散长度长、载流子迁移率高、可溶液加工等优异的物理化学性质在太阳电池、发光二极管、光电探测器、射线探测器等光电器件领域中展现出了巨大的潜力,并已经成为国内外研究热点。尽管卤化物钙钛矿太阳能电池器件具有优异的能量转化效率,但是器件的长期稳定性问题(不仅包括水分、氧气和热不稳定性,还包括光和电场的不稳定性)仍然制约着其商业化的发展。该报告围绕高性能卤化物钙钛矿半导体材料的理论设计、薄膜制备、性能调控及多功能光电器件应用等相关研究,设计开发高性能、高稳定钙钛矿材料及薄膜的性能调控技术,开展钙钛矿器件的多功能光电应用研究,探索新型钙钛矿在光伏电池、光电探测传感及光电忆阻器等领域的应用。

参考文献(5篇以内)

- [1] Yumeng Xu, Xing Guo, Zhenhua Lin, Qingrui Wang, Jie Su, Jincheng Zhang, Yue Hao, Keke Yang* and Jingjing Chang*, Perovskite Films Regulation via Hydrogen-Bonded Polymer Network for Efficient and Stable Perovskite Solar Cells, Angewandte Chemie International Edition, 2023, 62, e202306229.
- [2] Boyao Zhang, Zhaosheng Hu*, Jie Su, Zhen Gong, Xing Guo, Xiaoqing Chen, Yingguo Yang, Zhenhua Lin, Liming Ding, Yue Hao, Jingjing Chang*, Inhibiting Ion Migration and Stabilizing Crystal - Phase in Halide Perovskite via Directly Incorporated Fluoride Anion, Angewandte Chemie International Edition, 2024, e202413550.
- [3] Yumeng Xu, Zhenhua Lin, Jincheng Zhang, Yue Hao, Jianyong Ouyang, Shengzhong Liu, Jingjing Chang*, Flexible Perovskite Solar Cells: Material Selection and Structure Design, Applied Physics Reviews, 2022,

9(2):021307.

[4] Yumeng Xu, Siyu Zhang, Haidong Yuan, Yong Jiao, Xing Guo, Zhaosheng Hu, Xian-gang Hu, Zhenhua Lin,* Yue Hao, Liming Ding, Jingjing Chang*, Mechanically Resilient and Highly Efficient Flexible Perovskite Solar Cells with Octylammonium Acetate for Surface Adhesion and Stress Relief, ACS Nano, 2025, 19, 4867.

[5] Yong Jiao, Zhenhua Lin*, Yumeng Xu, Boyao Zhang, Xing Guo, Zhaosheng Hu, Xue Zhao, Yue Hao, Jingjing Chang*, Dynamic p-n junction direct current-generating triboelectric nanogenerators based on lead-free perovskite, Nano Energy, 2025, 138, 110857.

A04-200

提升钙钛矿太阳能电池稳定性的界面工程策略

韩奇峰*、唐宏才、沈志超、闫格、沈杨梓、韩礼元

上海交通大学

本报告将深入探讨提升正式和反式钙钛矿太阳能电池稳定性的界面工程策略。在正式钙钛矿太阳能电池中，通过控制钙钛矿薄膜表面和体内形成不同的 PN 导电型，实现了耗尽层向钙钛矿薄膜深层的有效迁移。这种对耗尽区的精准调控不仅促进了对载流子的高效提取，还明显抑制了碘离子的迁移，从而提高了电池的稳定性。在反式钙钛矿太阳能电池方面，我们采用了原子层沉积技术制备了表面全共价羟基覆盖的锡掺杂氧化铟层，用于自组装空穴分子的稳定锚定。这种全共价吸附羟基覆盖的基底表面相比于普通的含氢键吸附羟基覆盖的基底表面，能够更加牢固地锚定自组装空穴传输分子，确保了器件在光热条件下的长期稳定运行。此外，我们还成功合成了一种新型空穴传输分子——DC-TMPS，该分子通过甲氧基硅烷自组装基团与基底形成三齿键合，显著增加了分子与基底间的锚定位点数量进一步增强了器件的稳定性。针对 3D 钙钛矿上界面的 2D 钙钛矿覆盖层，我们利用机器学习的方法探索出了有机胺配体的结构特征对 2D 钙钛矿载流子传输能垒的影响权重，并采用基于强化学习算法的人工智能模型成功开发了具有低载流子传输能垒的新型有机胺配体——PTPAI，极大提高了相应 2D 钙钛矿薄膜的载流子输运性能，为高效钙钛矿太阳能电池的长期应用提供了坚实的基础。

A04-201

反式结构钙钛矿太阳能电池表界面科学及器件物理研究

罗德映*

北京航空航天大学

摘要：卤化物钙钛矿代表了一类用于下一代光电器件的极具前景的新材料 (1)，涵盖了从太阳能电池到发光二极管的广泛应用。然而，实现器件的高效率和高稳定性面临着巨大挑战，这主要是由于界面接触的不理想。因此，开发用于钙钛矿光电器件界面工程的合理策略，在提升整体性能方面发挥着关键作用。我们对卤化物钙钛矿半导体表面钝化过程中涉及的化学反应动力学进行了研究，并阐明了决定钙钛矿/有机界面能带对齐的基本物理原理 (2, 3)。在深入理解钙钛矿光电器件的界面物理之后，我们设计了有效的方法来解决阻碍器件性能提升的界面相关问题，从而提高了器件性能，并实现了全集成钙钛矿器件 (4)。最后，我们引入了一层非晶态稀土金属氧化物缓冲层 (5)，显著提高了钙钛矿太阳能电池的效率和稳定性。

参考文献：

[1] D. Luo et al., Enhanced photovoltage for inverted planar heterojunction perovskite solar cells. Science 360, 1442-1446 (2018).

[2] J. Hu et al., Anchoring of halogen-cleaved organic ligands on perovskite surfaces. Energy & Environmental Science 15, 5340-5349 (2022).

[3] N. Chen et al., Universal band alignment rule for perovskite/organic heterojunction interfaces. ACS Energy Letters 8, 1313-1321 (2023).

[4] P. Chen et al., Refining perovskite heterojunctions for effective light-emitting solar cells. Advanced Materials 35, 2208178 (2023).

[5] P. Chen et al., Multifunctional ytterbium oxide buffer for perovskite solar cells. Nature

625, 516-522 (2024).

A04-202**窄带隙铅锡混合钙钛矿结晶调控提升光伏器件性能研究**

冉晨鑫*

柔性电子前沿科学中心, 柔性电子研究院 (IFE), 西北工业大学, 西安, 陕西, 710072

单结钙钛矿光伏器件性能提升受到理论效率限制, 而基于宽、窄带隙钙钛矿结合的全钙钛矿叠层光伏器件光谱匹配、低成本、理论效率高的优势。然而, 由于含有亚锡离子, 窄带隙锡铅钙钛矿存在结晶速率过快和易氧化问题, 因而成膜质量较差, 限制了高效稳定叠层器件的获得。针对上述问题, 设计配位锚定分子对结晶动力学、薄膜残余应力和界面能级进行优化, 实现效率 22.7% 的铅锡钙钛矿太阳能电池, 构筑的 4 端全钙钛矿叠层太阳能电池效率达到 27.68%。此外, 首次报道以 MAAC 离子液体溶剂一步热旋涂制备高质量锡铅钙钛矿薄膜, 揭示了质子型 MAAC 溶剂与锡铅钙钛矿之间的宏量氢键相互作用对钙钛矿结构的保护机制, 能够有效抑制水、氧对锡铅钙钛矿的侵袭, 首次实现了在空气中制备高质量锡铅钙钛矿薄膜, 所制备锡铅钙钛矿光伏器件效率达到~18%, 且器件空气中存储 4000 小时后效率几乎无衰减。我们在窄带隙锡铅钙钛矿光伏器件方面的研究作为后续全钙钛矿叠层器件开发奠定基础。

关键词: 铅锡钙钛矿; 窄带隙; 结晶调控; 太阳能电池; 稳定性

参考文献:

1. J. Yang, C. Ran*, et al., Energy Environ. Sci., 2025, 18, 2883.
2. G. Xing, C. Ran*, et al., Adv. Mater., 2024, 36, 2404185.
3. W. Gao, C. Ran*, et al., Chem. Soc. Rev., 2025, 54, 1384.
4. X. Zhao, C. Ran*, et al., J. Energy Chem., 2025, 108, 808.

A04-203**便携式柔性 X 射线探测系统**

沈国震*、李莹

北京理工大学

柔性 X 射线探测器与成像技术在医学诊断、工业探伤、安全检查和太空探索等方面具有巨大的应用潜力。根据其工作原理, X 射线探测器分为间接型和直接型探测。但是目前而言, 对于高性能柔性 X 射线探测器的研究仍是具有挑战。针对该问题, 我们制备了一种用于辐射检测的便携式柔性 X 射线探测系统, 实现了在环境光下对低剂量 X 射线的有效监测, 所制备的柔性 X 射线探测器具有高灵敏度, 低检测极限和低虚警率, 促进了 X 射线探测系统向柔性化、小型化方向发展。除此之外, 我们研发了一种具有优异光、热、X 射线辐照、水下稳定性和低检测限的柔性闪烁体屏, 所制备的具有独特二聚体结构的有机-无机杂化卤化物闪烁体具有优异光产额和低检测极限, 远低于医学诊断所需的最低检测限, 并且实现了在多次弯曲和拉伸后对不规则物体的清晰非平面 X 射线成像, 解决了使用刚性闪烁体屏的失真和晕影问题。

A04-204**新型金属卤化物材料的理性设计与探测应用研究**

杨双*

华东理工大学

金属卤化物是一类光电性质优异、可溶液制备、成本低廉的新型半导体材料, 在太阳能电池、发光二极管和辐射探测器等领域有重要应用。这类材料的结构丰富、可设计性强, 但也面临着稳定性、难以集成、离子迁移等关键问题。本报告主要介绍我们在新型单晶卤化物材料结构设计研究方面的相关进展, 分析材料物理性质及化学稳定性与材料原子尺度结构的构效关系; 其次, 结合原位谱学表征及多尺度理论模拟方法, 阐明钙钛矿单晶材料生长涉及到成核、传质等相关原理, 提出胶体溶液体系中溶剂、配体分子等对晶体生长过程的作用及调控机制, 进而发展了单晶薄膜的普适性生长方法; 最后, 介绍了钙钛矿器件在 X 射线探测、多波段选择性探测等领域的应用, 阐述了器件工作机制及结构设计思路, 实现高性能光电探测器件的多功能集成。

A04-205

高性能钙钛矿半导体材料设计及 X 射线探测器刮涂制备

郑霄家*

中国工程物理研究院化工材料研究所

X 射线探测广泛应用于医学影像、工业无损检测和安全检查等领域。钙钛矿半导体探测器的低剂量成像特征有望大幅减少医学成像和安检等领域的 X 射线使用剂量，受到了广泛关注。不过，由于钙钛矿材料的离子化合物特性，材料内部普遍存在离子迁移问题，导致钙钛矿 X 射线探测器暗电流较大，损害了器件的信噪比且不利于器件的长期工作稳定性。此外，满足临床使用需求的大面积 X 射线探测器有待开发。

我们通过材料的结构设计及先进制备工艺开发，获得了兼具高灵敏和高稳定的准二维钙钛矿材料体系，进而实现了高灵敏、高稳定 X 射线探测器的制作。提出了一种热膨胀调节策略，将钙钛矿的热膨胀系数减少一半，从而将 300 微米厚钙钛矿层中的残余热应力从 98.6 MPa 降低到 32.4 MPa，确保了钙钛矿自身的机械稳定性及其与 TFT 基底之间的结合牢固度。采用全溶液刮涂方法直接将钙钛矿与 TFT 背板集成在一起，成功实现了高性能、高机械稳定性的成像面板，并获取了清晰的 X 射线成像。本报告将介绍我们通过维度调控及应力调控获取高稳定钙钛矿材料，并在此基础上进一步研制高性能、高稳定阵列化 X 射线成像器件等方面的研究进展。

参考文献：

- [1] Fan, Z.; Zhou, B.; Lu, X.; Tie, S.; Yuan, R.; Dong, S.; Zhang, A.; Zheng, X., Device 2025, 3, 100617.
- [2] D. Xin, M. Zhang, Z. Fan, Y. Yang, S. Dong, L. Lei, W. Zhao, Q. Lin, X. Zheng, Adv. Funct. Mater. 2024, 34, 2402480.
- [3] Dong, S.; Fan, Z.; Wei, W.; Tie, S.; Yuan, R.; Zhou, B.; Yang, N.; Zheng, X.; Shen, L., Light: Science & Applications 2024, 13, 174.
- [4] M. Zhang, D. Xin, S. Dong, W. Zhao, S. Tie, B. Cai, Q. Ma, Q. Chen, W.-H. Zhang, X. Zheng, Adv. Opt. Mater. 2022, 10, 2201548.
- [5] D. Xin, M. Zhang, Z. Fan, N. Yang, R. Yuan, B. Cai, P. Yu, J. Zhu, X. Zheng, J. Phys. Chem. Lett. 2022, 13, 11928.

A04-206

超低离子迁移 (Br-EA)₂PbBr₄ 钙钛矿单晶中强偶极矩诱导的 X 射线响应特性

赵一英*

中国工程物理研究院材料研究所

由量子阱结构组成的二维杂化钙钛矿材料因其独特的环境稳定性，在光电领域展现出巨大的潜力。然而，通过调控量子阱尺寸改善其电学性能往往会导致离子迁移加剧和化学稳定性下降。本研究提出了一种新颖的策略，通过分子设计调控钙钛矿中的电场分布，从而避免了电学性能与稳定性之间的权衡。具体而言，我们用 2-溴乙胺 (Br-EA) 阳离子取代乙胺 (EA) 阳离子，制备了纯二维钙钛矿 (Br-EA)₂PbBr₄ 单晶。Br-EA 阳离子的分子偶极矩及其诱导的电场为 X 射线响应带来了多种新特性，包括铁电响应电流、电流反转现象以及高达 95 V 的超高开路电压。基于此制备的 X 射线探测器实现了 540.7 $\mu\text{C Gy}^{-1}\text{cm}^{-2}$ 的灵敏度，其中 38.1% 的增益来自增强的偶极子；同时，探测器的检测限低至 9.8 nGyair s⁻¹，并在 -100 V 下表现出 3.69×10^{-8} nA cm⁻¹ s⁻¹ V⁻¹ 的超低暗电流漂移。本研究不仅揭示了 A 位阳离子偶极矩对钙钛矿材料性能的重要影响，并促进了对其在潜在应用的进一步探索。

A04-207

非晶态金属卤化物 X 射线探测材料

靳志文

兰州大学物理科学与技术学院，兰州，30000

X 射线探测技术在科学研究、国防安全、医疗诊断、工业探伤等诸多领域有着重要应用，其探测精度、技术现状和发展趋势极大程度上影响着相关应用领域内的行业水平和产业布局。然而，由于 X 射线能量高、

穿透能力强、与物质的相互作用复杂且很难被聚焦，这些本征问题增加了探测技术的难度。特别在一些强辐射、高工作电压、极端温度等环境或低剂量、高分辨、快速动态探测等特殊需求的应用领域，给 X 射线探测技术的发展带来了进一步的挑战。近五年，报告人的研究围绕该领域所面临的关键科学问题，充分利用金属卤化物半导体及其衍生物在 X 射线能量转换的固有优势，有效的提高了其光电性能与工作稳定性，并深入探寻影响其性能变化的光电物理和器件物理机制。希望开发出具有自主知识产权的低剂量、高分辨、大面积的 X 射线探测成像技术。

关键词：非晶态；X 射线探测；铋基金属卤化物；分辨率；

参考文献：

1. Y. Xu, Z. Li, C. Shi, Y. Li, Y. Lei, G. Peng, T. Yu, H. Ren, H. Wang, H. Fan, Y. Zhang, Z. Ci, Q. Wang, Z. Jin, Adv. Mater. 2024, 36, 2406128.
2. H. Chen, Z. Li, S. Wang, G. Peng, W. Lan, H. Wang, Z. Jin, Adv. Mater. 2024, 36, 2308872.

A04-208

大尺寸钙钛矿单晶生长设计及高性能 X 射线探测器

刘渝城

陕西省西安市长安区陕西师范大学

开发高质量工业级大尺寸钙钛矿单晶生长技术是实现高性能大面积 X 射线探测器集成与成像的重要基础。三维结构金属卤化物钙钛矿单晶具有高的载流子迁移率-寿命乘积，是实现高灵敏 X 射线直接探测的优异材料；低维结构金属卤化物钙钛矿单晶具有可调的量子阱结构和大的激子结合能，因而具有优异的闪烁发光性能，在 X 射线间接探测方面具有较大的应用潜力。本报告将从钙钛矿单晶生长中的成核热力学和生长动力学方面详细介绍超大尺寸钙钛矿单晶低温溶液生长及策略设计。基于团队在钙钛矿单晶探测器方面研究的结果，分别介绍不同结构维度的大尺寸钙钛矿单晶在直接和间接 X 射线探测成像的最新研究进展。

关键词：钙钛矿单晶，生长设计，X 射线探测器，X 射线成像

参考文献：

1. D. Chu, N. Liu, S. Xie, Y. Li, J. Chen, M. Wei, Z. Feng, L. Zhao, B. Jia, Y. Jiang, J. Pi, R. Shi, S. Yue, Y. Liu, S. Liu, Adv. Mater. 2025, 37, 2500101.
2. J. Yu, Y. Luo, N. Tian, Y. Liu, Z. Yang, J. Pi, L. Li, R. Zheng, C. Wang, S. Liu, Adv. Mater. 2025, 37, 2413709.
3. Y. Zhang, J. Hao, Z. Zhao, J. Pi, R. Shi, X. Li, N. Yuan, J. Ding, S. Liu, Y. Liu, Adv. Mater. 2024, 36, 2310831.
4. D. Chu, B. Jia, N. Liu, Y. Zhang, X. Li, J. Feng, J. Pi, Z. Yang, G. Zhao, Y. Liu, S. Liu, N.-G. Park, Sci. Adv. 2023, 9, eadh2255.
5. X. Zhang, D. Chu, B. Jia, Z. Zhao, J. Pi, Z. Yang, Y. Li, J. Hao, R. Shi, X. Dong, Y. Liang, J. Feng, A. Najjar, Y. Liu, S. Liu, Adv. Mater. 2024, 36, 2305513.
6. M. Chen, X. Dong, D. Chu, B. Jia, X. Zhang, Z. Zhao, J. Hao, Y. Zhang, J. Feng, X. Ren, Y. Liang, R. Shi, A. Najjar, Y. Liu, S. F. Liu, Adv. Mater. 2023, 35, 2211977.

A04-209

基于钙钛矿半导体的软 X 射线探测器结构优化和性能提升

胡芹*、谭鹏举、刘天宇、程隆

中国科学技术大学

随着我国深空探测技术和同步辐射大科学装置的不断发展迭代，对高可靠性、高性能的软 X 射线探测器提出了更高要求。钙钛矿半导体具有 X 射线吸收系数大、载流子寿命积高、制备成本低等突出优势，在软 X 射线探测方面具有巨大潜力。但目前关于钙钛矿软 X 射线探测器的研究还相对较少，且其在量子效率等关键性能参数距离理论值还有较大差距。针对上述问题，本工作首先针对软 X 射线特点，结合光场分布模拟，优化了钙钛矿 PIN 垂直型光电二极管结构，最大化增加钙钛矿活性层的光吸收。特别地，采用纳米网络电极，使软 X 射线可以通过多尺度电极网络被活性层吸收，减轻了上电极遮挡的同时不降低载流子的提取和传输。其次，构筑了多维钙钛矿异质结，降低钙钛矿半导体薄膜缺陷，减小载流子复合的同时降低

器件暗电流，提高光电响应。最终该器件在室温下达到目前已知报道的钙钛矿软 X 射线探测器中的最高量子效率。各项性能参数接近硅基商业化器件水平，且在基于同步辐射站的高通量软 X 射线辐照下依然保持良好的稳定性。最后，针对空间探测等极端环境应用需求，本工作验证了钙钛矿器件在 10-383 K 极限温度范围内的工作稳定性。以上研究证明了钙钛矿半导体光电器件在新一代适应复杂光学系统的柔性软 X 射线成像探测系统中的应用潜力。

A04-210

低维金属卤化物闪烁体的制备及其 X 射线/ γ 射线探测研究

肖家文*

北京工业大学

本研究探讨了一类低维过渡金属卤化物/稀土卤化物闪烁体的制备及其 X 射线成像、 γ 射线能谱探测应用潜力。所合成的金属卤化物具有高发光量子产率 (>90%)、大的 Stokes 位移等优点，其在 X 射线激发下产生明亮的可见光发射，光产额高达 ~ 88000 光子/MeV。重点关注了其高能射线激发与紫外光激发的异同，试图理解其光物理过程。将该类金属/稀土卤化物闪烁体薄膜应用于 X 射线成像，可得到分辨率达 20 lp/mm 的高清晰度成像结果。此外，本文还将分享最新的关于近红外闪烁体的初步研究进展。

A04-211

面向低剂量高对比度成像的钙钛矿基 X 射线探测器

赵晶晶*

西南大学

金属卤化物钙钛矿因其强的射线吸收、长的载流子扩散长度、高的缺陷容忍度以及低成本可大面积制备等优点，在射线探测领域展现了巨大的应用前景。但钙钛矿探测器漏电流大，虽然灵敏度高，但低剂量下数字化影像依然模糊。本论文聚焦于讨论实现低剂量下高对比度的射线影像探测成像的关键指标，并提出实现钙钛矿射线探测器低剂量下高对比度成像的方法，为钙钛矿射线探测器商业化奠定基础。

A04-212

钙钛矿单晶生长与单晶阵列探测器制备

李维俊*

吉林大学

卤化物钙钛矿单晶为研究这类新兴半导体材料的光电特性提供了独特平台，而温度诱导晶体生长方法往往存在溶质沉积速率难以控制，导致晶体生长速率波动大。在此，我们开发了溶剂挥发限制生长 (SVG) 策略调控晶体生长速率，以实现溶液法高质量晶体的生长。采用 SVG 方法生长的卤化物钙钛矿单晶表现出创纪录的低缺陷密度 ($2.8 \times 10^8 \text{ cm}^{-3}$) 和高电荷载流子迁移率-寿命乘积 ($\mu\tau$ 乘积, $0.021 \text{ cm}^2/\text{V}$)。

除了单像素单晶的制备，多像素阵列成像是未来 X 射线探测应用的趋势。在此，我们报道了溴化铅 (CsPbBr_3) 单晶阵列在柔性聚二甲基硅氧烷 (PDMS) 基底上的定向排列。通过将结晶过程精确限制在空间限定的前驱体液滴内，我们利用 CsPbBr_3 微立方体的自发旋转实现了取向良好的晶体排列。这种方法可通过改变生长温度精确控制微立方体的形貌。我们将 CsPbBr_3 微立方体与电极阵列无缝集成，设计出柔性 X 射线探测器阵列。经表面钝化处理后，该柔性 X 射线探测器可实现 $1.97 \times 10^5 \mu\text{C} \cdot \text{Gy}_{\text{air}}^{-1} \cdot \text{cm}^2$ 的高灵敏度和 $89 \text{ nGy}_{\text{air}} \cdot \text{s}^{-1}$ 的低检测限。传统钙钛矿材料尽管在 X 射线检测中表现出色，却因其固有水解敏感性而受到显著限制，阻碍了其在水下环境中的有效应用。为此，我们成功制备了厚度达 400 μm 厚层的钙钛矿单晶阵列，对其进行了有效的封装，并将其集成至稳定的水下 X 射线探测器阵列中。该单晶阵列在排列取向和尺寸上均表现出显著的均匀性，在持续浸没于水中超 60 天后，探测器阵列仍保持初始 X 射线检测性能，证明了其对水下环境的稳定适应性。

A04-213

Effects of 1-(2-Amino-5-bromophenyl)ethenone modification on CsPbI_2Br films and perovskite

solar cells

Min Zhong*, Ruzhe Gong, Lei He

College of Materials and Chemistry, China Jiliang University, Hangzhou 310018, P.R.China.

Despite the remarkable thermal stability of inorganic CsPbI₂Br perovskites solar cells, their practical deployment is plagued by severe interfacial non-radiative recombination and black phase instability at room temperature. To address these challenges, we designed a novel multifunctional interfacial modifier 1-(2-Amino-5-bromophenyl)ethenone(2A5B). In this study, the interface of CsPbI₂Br perovskite/Spiro-OMeTAD hole transport layer was modified by 2A5B. The effects of 2A5B modification on the morphology, structure, optical absorption properties, defect density, carrier lifetime, hydrophobicity and energy level of CsPbI₂Br perovskite film, optoelectronic performance of the devices, and their mechanism were systematically studied, which were rarely reported. The oxygen atoms in the C=O groups of 2A5B form coordination bonds with uncoordinated Cs⁺ ions, while the nitrogen atoms in the -NH₂ groups coordinate with Pb²⁺ ions on the surface of CsPbI₂Br, passivating interface defects, modulating interface energy levels matching, and thus inhibiting interface non-radiative recombination. Simultaneously, the hydrogen atoms in the -NH₂ groups interact with surface free I⁻/Br⁻ ions of CsPbI₂Br via hydrogen bonding, suppressing halide migration and stabilizing the perovskite structure. The efficiency of the device modified with 4 mg/mL of 2A5B prepared in an air environment with relative humidity of 50% increased by 51.08% compared with that of the unmodified device. And 4 mg/mL 2A5B modified device could maintain an initial efficiency of 70% after 40 days of storage at RH 50%, whereas the unmodified device only keeps 20% of the initial efficiency. This study provides valuable insights of designing interfacial modifiers between the perovskite layer and the hole transport layer, and the photovoltaic conversion efficiency and stability of the all-inorganic perovskite solar cells were improved in a highly humid air environment.

Keywords: 1-(2-Amino-5-bromophenyl)ethenone; Interface engineering; CsPbI₂Br films; CsPbI₂Br solar cells; Non-radiative recombination; Ion migration

A04-214**钙钛矿太阳能电池中接触界面调制研究**

任志伟 REN Zhiwei

香港理工大学 The Hong Kong Polytechnic University, Hong Kong

The interface contact in perovskite and organic solar cells is a critical factor that significantly influences both the performance and stability of these devices. It serves as a conduit for charge transfer between different layers, which is essential for minimizing recombination losses and thereby enhancing the overall efficiency of the solar cells. A well-engineered interface ensures that there is optimal energy level alignment, which is crucial for improving charge extraction and transport across the device. This not only boosts efficiency but also contributes to the operational stability of the solar cells. Moreover, the interface plays a vital role in the longevity of the device by preventing various degradation pathways that can occur over time. Degradation can severely impact the performance and operational lifetime of solar cells, so a robust interface is key to maintaining long-term functionality. Therefore, a deep understanding of these interfaces and their optimization is essential for advancing solar cell technology and achieving higher power conversion efficiencies. In this talk, we will focus on discussing various contact modulation strategies employed in perovskite solar cells, organic solar cells, and their tandem applications. These strategies are designed to enhance interface properties, thereby improving device performance and stability. By exploring these approaches, we aim to shed light on the latest advancements and future directions in solar cell technology.

Reference

1. Y. Han#, J. Fu#, Z. Ren#*, ...Y. Yang*, and G. Li* et al. Nat. Energ., 2025, 10, 513–525.
2. Dongyang Li, Ruijie Ma*, ...Jun Yin, Zhiwei Ren*, Gang Li* and Chun Cheng*, Nat. Commun., 2024, 15, 7605.

3. Z. Ren, K. Liu, H. Hu*, and G. Li* et al. Light: Sci. & Appl., 2021, 10, 239.
4. G. Yang#, Z. Ren#, Y. Yang*, and G. Li* et al. Nat. Photon., 2021, 15, 681-689.

A04-215

FAPbI₃ 钙钛矿构效关系

邢楚武, 鲍勤辉, 王多发*

湖北大学材料科学与工程学院

近年来钙钛矿太阳能电池发展非常迅速, 当前单节太阳能电池效率已超过 27%, 但稳定性问题仍然是阻碍钙钛矿太阳能电池发展的瓶颈, 研究钙钛矿构效关系有利于理解相变物理机制和开发增强稳定性新方法。本文采用 HRTEM 和 X 射线精修方法研究 FAPbI₃ 钙钛矿老化过程中微机构变化, 揭示 FAPbI₃ 钙钛矿宏观稳定性与微观结构的关联。通过 X 射线精修分析了 FAPbI₃ 钙钛矿老化过程中 α 相和 δ 相含量及应力的变化, 发现 α 相和 δ 相受到的应力随 δ 相含量呈相同的变化规律, 在 δ 相含量为 50% 时, 应力达到最大值。在 FAPbI₃ 钙钛矿掺入一定含量的 Cs 后, 应力呈现相同的变化规律, 但应力显著减小。进一步用 HRTEM 和 X 射线精修分析了 FAPbI₃ 钙钛矿微结构, 发现 α 相 (111) 面和 δ (001) 面之间存在晶格失配, 且适配度 < 5%, 在薄膜内形成 (111) α / (001) δ 界面, 并在界面处产生应力, 应力加速 α 相到 δ 相转变。在 FAPbI₃ 钙钛矿掺入一定含量的 Cs+ 或引入二维钙钛矿, 应力减小, FAPbI₃ 钙钛矿稳定性增强。在 FAPbI₃ 钙钛矿制备过程中引入添加剂, 有效阻断 (111) α / (001) δ 界面形成, 稳定性显著增强。

参考文献:

1. C. W. Xing, Q. H. Bao, S. J. Liu, X. Chu, F. Lu, L. Zhang, L. K. Yu, T. J. Zhang, and D. F. Wang, Solar RRL, 2023, 2300434.

A04-216

人工智能和理论计算加速筛选钙钛矿光电器件中的关键材料

宋丹丹*¹、卫东²、郭娇¹、石一茗¹

1. 北京交通大学

2. 福建师范大学

高效、稳定的钙钛矿器件离不开关键界面材料的合理设计与筛选。针对传统实验与理论计算筛选效率低下的瓶颈, 我们构建了融合人工智能 (AI) 与理论计算的材料筛选范式, 实现了钙钛矿光电器件关键材料的高效识别与优化。首先, 利用机器学习方法构建了器件性能预测模型, 实现了对界面材料的高通量虚拟筛选, 并实验验证了模型预测的准确性。结合密度泛函理论 (DFT) 计算, 识别并量化了影响界面钝化效果的关键描述符——界面材料与钙钛矿之间的结合能, 并进一步开发了结合能的机器学习预测模型。以结合能的重要作用为启发, 我们筛选出与钙钛矿前驱体结合强的底界面修饰材料, 调控钙钛矿的结晶行为, 实现了双向结晶模式, 有效提升了器件的效率与稳定性。目前, 我们还基于 AI 分子生成、机器学习预测和 DFT 计算, 开展了自组装单分子层 (SAM) 材料的逆向设计, 为关键材料的创新设计提供新的思路。

A04-217

利用异构与树枝化策略设计高效光伏材料

贾涛*

广东技术师范大学光电工程学院

在有机光伏材料设计中, 分子结构的精细调控对光电性能的提升具有关键意义。异构化通过改变分子的结构连接方式或空间构型, 可有效调控有机光伏材料的能级分布、光吸收范围、分子堆积行为和电荷传输性能。不同异构体在共轭程度、极性分布及立体位阻等方面存在差异, 进而影响薄膜形貌与器件性能。合理设计异构结构, 有助于提升材料的光电转换效率、薄膜成膜质量及器件的长期稳定性。树枝状结构通过引入多支链分支, 显著改善有机光伏材料的溶解性和加工性能, 促进均匀薄膜形成。其空间阻隔效应有助于调控分子堆积和结晶行为, 防止过度聚集, 优化相分离结构。树枝状结构还增强了载流子迁移路径的连续性, 提高电荷传输效率, 进而提升器件的光电转换效率和热稳定性, 为高性能有机光伏器件设计提供有效手段。综合利用异构化与树枝状结构的优势, 为光伏材料的设计提供了全新的思路, 有望实现材料性能的显著突破。

A04-218**Highly stable perovskite solar cells with 0.30 voltage deficit enabled by a multi-functional asynchronous cross-linking**

LIU Kuan

The Hong Kong Polytechnic University

The primary challenge in commercializing perovskite solar cells (PSCs) mainly stems from fragile and moisture-sensitive nature of halide perovskite materials. In this study, we propose an asynchronous cross-linking strategy. A multifunctional cross-linking initiator, divinyl sulfone (DVS), is firstly pre-embedded into perovskite precursor solutions. DVS, also as a special co-solvent, facilitates intermediate-dominated perovskite crystallization manipulation, favouring formamidine-DVS based solvate transition. Subsequently, DVS-embedded perovskite as-cast films are post-treated with a nucleophilic reagent, glycerin, to trigger controllably three-dimensional co-polymerization. The resulting cross-linking scaffold provides enhanced water-resistance, releases residual tensile strain, and suppresses deep-level defects. We achieve a maximum efficiency over 25% (certified 24.6%) and a maximum VOC of 1.229 V, corresponding to mere 0.30 V deficit, reaching 97.5% of the theoretical limit, which is the highest reported in all perovskite systems. This strategy is generally applicable with enhanced efficiencies approaching 26%. All-around protection significantly improves PSC's operational longevity and thermal endurance. g inverse engineering problems for electromagnetic waves, thus allowing various related techniques to be achieved.

A04-219**硅脂低温封装通过 Pb⁰缺陷钝化提高钙钛矿太阳能电池的效率和稳定性**

吴炯桦*, 兰骏兴, 王仁杰

福州大学 物理与信息工程学院

钙钛矿太阳能电池 (PSC) 因其高吸收系数、带隙可调、长载流子寿命等优点而备受关注。目前, PSC 的光电转换效率 (PCE) 已从 2009 年的 3.8% 提高到目前的认证效率 26.1%, 但其高效率器件的制备通常伴随缺陷和环境而引发稳定性的问题。为了应对这些挑战, 我们采用硅脂对钙钛矿太阳能电池进行封装, 该封装材料可以在低温下对器件进行封装并且拆卸方便。其中, 硅脂的主要成分是 PDMS, 将其作为添加剂加入钙钛矿内, 不仅可以屏蔽钙钛矿器件的水分和氧气, 而且可以显著提高其功率转换效率, 从 23.91% 提高到 25.34%。进一步的研究表明, 这种改善可归因于钙钛矿结构中 PDMS 中的氧原子与铅之间形成的配位键。这一机制提高了效率, 抑制了 Pb⁰ 缺陷的形成, 显著降低了效率损失和不稳定性。

关键词: 钙钛矿太阳能电池, 钝化缺陷, 封装, 稳定性

参考文献:

[1] J. Wu, J. Lan, R. Wang, C. Cheng, W. Wang, H. Deng, Q. Zheng, M. Wei, Y. Li, S. Cheng, Low-Temperature Encapsulation with Silicone Grease Enhances Efficiency and Stability of Perovskite Solar Cells via Pb⁰ Defect Passivation. *Adv. Funct. Mater.* 2025, 2425979

A04-220**光电半导体表面调控分子的理论设计**徐健*¹, Edward H. Sargent²

1. 北京理工大学

2. 加拿大多伦多大学

提高光伏器件的光电转换效率, 关键在于提升开路电压。然而, 开路电压通常受到由表面/界面缺陷引起的载流子非辐射复合的限制。此外, 窄带隙 (Sn-Pb 混合) 钙钛矿电池普遍存在高缺陷密度与易氧化降解的问题, 进一步制约了器件的效率与长期稳定性。为应对上述挑战, 我们构建了一个结合高通量密度泛函理论 (DFT) 计算与机器学习的高效筛选流程, 从包含 500 万分子的数据库中筛选出 15 种有望应用于反式钙钛矿太阳能电池的阴离子型钝化分子, 系统揭示了其结构 - 性能 - 器件效率之间的内在关联关系。我们进一步构建了一个具备物理可解释性的模型, 用于量化分子结构特征与钙钛矿表面吸附能之间的关系,

识别影响缺陷钝化效果的关键分子因素。在此基础上，提出了多维度的筛选策略与合理的分子设计规则，有效加速了新型钝化剂的开发进程，并指引实验实现了反式钙钛矿太阳能电池效率的纪录。另一方面，我们通过自洽电势修正方法揭示了表面带电缺陷相较于体相缺陷所表现出的独特物理特性，并结合分子动力学模拟，深入研究了多种老化条件下表面缺陷的动态演化过程。据此，提出了基于“环境运行条件下的动态吸附率”优化钝化分子结构的新方法，以有效抑制钙钛矿材料的表界面降解。

A04-221

Graphene oxide doping for highly efficient carbon-based perovskite solar cells

Yudi Wang*

Dalian University of Technology

Carbon-based perovskite solar cells (C-PSCs) processed at low temperature are gaining attention due to their enhanced stability and cost-effectiveness. However, these benefits are typically offset by inferior device performance stemming primarily from inadequate charge transfer between the hole transport layer (HTL) and the carbon electrode. Herein, we introduce a novel approach utilizing graphene oxide functionalized with carboxyl groups (GO-COOH) to efficiently dope the Spiro-OMeTAD, simultaneously facilitating interfacial charge transfer and immobilizing the Li⁺ ions, thereby improving device performance and stability. Mechanistic study elucidates the valence electron transfer between GO-COOH and Spiro-OMeTAD, as well as the delocalized electron of GO-COOH enables the p-doping without oxygen exposure and establishes a strong $\pi-\pi$ conjugated HTL/carbon interface. The formation of Li-C bonds allows the fixation of mobile Li⁺ ions for enhanced device stability. The resulting C-PSCs achieve a record power conversion efficiency (PCE) of up to 23.7% (certified: 23.08%) with exceptional operational stability. This work remarks a significant breakthrough in improving the performance of C-PSCs processed at fully low temperature to catch up with PSCs with metal electrodes.

A04-222

钙钛矿太阳能电池的界面设计及稳定性研究

黄军意、王鸣魁*

华中科技大学

溶液处理的钙钛矿太阳能电池具有大规模生产的巨大潜力，但在大面积上生产高结晶度的钙钛矿薄膜仍然是一个主要挑战。在这里，我们展示了一个含氟的超支化聚合物，用于细致地控制钙钛矿薄膜的结晶。官能团氟与钙钛矿的协同配位约束了复杂的中间相，有利于形成具有高结晶度和高相纯度的空间取向钙钛矿薄膜。同时，退火过程中的热自由基聚合产生交联的疏水网络，增强了对水分的抵抗力。在模拟 AM 1.5G 阳光 (100 mW cm⁻²) 下，小型器件 (有源面积 0.04 cm²) 和大型器件 (有源面积 16.1 cm²) 的功率转换效率分别为 26.05% 和 22.43%。此外，未封装的器件表现出出色的工作稳定性，在 50-55 °C 的连续照明 (一个阳光强度) 下，97% 的初始效率保持在最大功率点跟踪 1500 小时。

A04-223

Modulated dual photo/electro luminescence via molecular engineering of D^S-A-D^W type TADF materials

Ganesan Paramaguru, Gao Peng*

Xiamen Institute of Rare Earth Materials

Organic molecular materials capable of dual photoluminescence across the entire visible spectrum offer exciting prospects for lighting and display technologies. However, designing such systems and applying them to dual electroluminescence organic light-emitting diodes (OLEDs) remains a significant challenge. In this study, we introduce a series of D^S-A-D^W type thermally activated delayed fluorescence (TADF) materials, incorporating carbazole-based weak donor (DW) units into a phenothiazine (PT)-based strong donor (D^S)-acceptor (A) framework. This approach

yields four distinct molecular structures: *p*-CZTRPT, *p*-OMeCZTRPT, *o*-CZTRPT, and *o*-OMeCZTRPT. By leveraging substituent and isomeric engineering, we systematically investigate how D^W units influence photo- and electroluminescence properties. Key findings include: The short wavelength (SW) emission band (400 - 500 nm) predominantly originates from mixed $\pi \rightarrow \pi$ transitions* on PT-phenyl and D^W units under low concentration conditions, rather than from the previously suggested quasi-axial PT conformer (QA_{PT}). OLED devices incorporating 0.7 - 1 wt% of *p*-CZTRPT and *p*-OMeCZTRPT as emissive layers exhibit dual electroluminescence, achieving some of the highest reported EQE values for PT-based materials: 7.60%/17.35% and 11.59%/19.74%, respectively. The role of QA_{PT} in governing SW emission is limited, whereas strategic substitution and isomer engineering of DW units effectively modulates both photoluminescence and electroluminescence at the molecular and device levels. This work highlights the potential of precise molecular engineering in tailoring emission characteristics and optimizing white light generation for OLED applications.

墙报

A04-P01

高结晶有机小分子实现高效钙钛矿太阳能电池的界面缺陷钝化和电荷载流子管理

华雍*、赵荣梅

云南大学

最大限度地减少界面缺陷和提高电荷传输层的电荷转移能力已成为提高钙钛矿太阳能电池效率和稳定性的最重要策略。然而，目前用于减轻界面缺陷的大多数分子钝化剂在界面处会产生导电性差的聚集体，阻碍了电荷载流子的提取。本文报道了一种采用高度结晶小分子 2,7-二辛基 [1] 苯并噻吩并 [3,2-b] [1] 苯并噻吩 (C8-BTBT) 的整体界面工程策略。我们揭示了 C8-BTBT 将钙钛矿薄膜桥接到空穴传输层，减少了界面缺陷并改善了载流子管理。此外，这种采用空气稳定的 C8-BTBT 进行的界面改性，通过减少聚集体的出现改善和巩固了 Spiro-OMeTAD 的薄膜形态。因此，C8-BTBT 处理的器件对器件的所有光伏性能特征都表现出极大的增强，绝对效率提高了 2% 以上。C8-BTBT 改性的 Spiro-OMeTAD 具有良好的热耐受性，这为提高基于 Spiro-OMeTAD 的钙钛矿器件的性能铺平了道路。

A04-P02

多功能磺胺添加剂调节反式钙钛矿太阳能电池的结晶动力学，并提高效率及稳定性

叶书鸣、王莞、张文华*

云南大学

在钙钛矿薄膜的一步溶液制备过程中，不受控制的快速结晶过程往往会导致晶体质量较差从而降低薄膜的光电性能，这对于实现高性能钙钛矿太阳能电池而言是一个重大挑战。为了解决这一问题，我们引入了一种多功能添加剂策略，利用具有双 π 共轭环的磺酰基分子磺胺林 (SL) 来精确调节结晶动力学，从而产生高质量的钙钛矿晶体薄膜。实验结果表明，SL 中富电子氧原子与欠配位的 Pb^{2+} 形成强健的配位键，有效调节结晶动力学并延长结晶过程，从而制备出晶粒尺寸大、内应力低的钙钛矿膜。此外， π 共轭结构通过提高费米能级显著优化了能带对准，并增强了表面接触势。最终，基于 SL 添加剂制备的反式钙钛矿太阳能电池实现了 24.91% 的光电转换效率 (对照组为 23.85%)，并在氮气、60° 及空气湿度条件下具有出色的稳定性。这项工作不仅阐明了 π 共轭磺酰基添加剂在结晶调制和能级定制中的双重作用，而且为设计多功能分子以推进钙钛矿光电子学建立了一个范例。

A04-P03

混合 / -CsPbI₃ 相提升半透明钙钛矿太阳能电池的效率与稳定性

陈香港、蔡墨朗*

华北电力大学

光伏建筑一体化 (BIPV) 作为利用可再生能源的创新解决方案而获得认可。在构建集成光伏领域, CsPbI₃ 因其理想的带隙与热稳定性而成为极具前景的半透明钙钛矿太阳能电池材料。然而, 其相变不稳定性限制了器件性能。本研究提出一种简单有效的方法: 通过引入 HBr 促进低温下 δ -CsPbI₃ 的形成, 并在 100° C 退火后部分转变为 γ -CsPbI₃, 形成稳定的混合相薄膜。同步辐射 GIWAXS 与原位 XRD 分析表明, 该混合相结构可有效缓解热膨胀不匹配引起的应变, 同时改善膜层致密性并降低缺陷密度, 显著提升了抗湿性 (在 \approx 85% 相对湿度下)。最终, 基于混合 δ/γ -CsPbI₃ 相半透明钙钛矿器件实现了 19.89% 的光电转换效率, 并在连续照射 500 小时后保持了 90.89% 的初始效率, 显示出优异的性能与稳定性。基于混合 δ/γ -CsPbI₃ 相半透明钙钛矿器件的平均可见光透射率为 16.05%, LUE 为 3.19%, 证明了这些半透明器件的高性能及其在 BIPV 中的应用潜力。

A04-P04**通过三维共价有机框架实现高效钙钛矿太阳能电池: 精准界面工程提升效率**吴晓伟¹、韦飞跃²、潘伟春²、刘佳、谢奕明²、卢灿忠¹

1. 厦门稀土材料研究所

2. 华侨大学

共价有机框架 (COFs) 是一类具有可调二维或三维结构的多孔聚合物, 因其在各种应用中的卓越多功能性而引起了广泛关注。最近, 将 COFs 整合到钙钛矿太阳能电池 (PSC) 中已成为应对关键挑战 (如不稳定性、界面复合损失和铅相关环境风险) 的一种有前途的策略。增强的电荷传输通道、缺陷钝化和可定制的分子结构是 COFs 的优势。在这项研究中, 作者使用 Schiff 碱反应创建了两个具有 8+2 连接的供体-受体 (D-A) 型 COFs 材料, 它们被整合到 PSC 自组装 (SAM) 层中。根据表征和理论计算, COFs 不仅有效优化了 ITO/SAM 衬底的能级, 还能钝化钙钛矿缺陷并抑制 PSC 器件中的缺陷辅助复合。这些修改显著增强了载流子传输和提取, 导致光电转换效率 (PCE) 从 22.57% 提高到 25.20% (DP-BE) 和 24.21% (DP-DBE)。这项工作强调了 COFs 作为 PSC 界面工程多功能改性剂的潜力, 为提高器件性能和稳定性提供了一条有前途的途径。

A04-P05**双场钝化策略制备高性能宽带隙钙钛矿太阳能电池**

冯旭铮、蔡墨朗*

华北电力大学

由于在叠层光伏中的理想应用, 宽带隙钙钛矿太阳能电池 (WBG PSCs) 已受到越来越多的关注。然而, 宽带隙钙钛矿倾向于形成高密度陷阱态, 导致严重的非辐射复合和相分离, 这对宽带隙钙钛矿太阳能电池的效率和稳定性不利。在这项工作中, 引入了由氢碘酸异丙胺 (i-PAI) 促成的双场钝化策略, 该策略同时展现出分子偶极场钝化和界面电场钝化作用, 实现对离子迁移的抑制。实验数据和模拟结果分析表明, 该策略降低了宽带隙钙钛矿的电荷陷阱密度, 并抑制了相分离。此外, 双功能钝化将宽带隙 (1.65 eV) 钙钛矿太阳能电池的开路电压 (VOC) 损失降低至 0.39 V, 并将效率提高到具有竞争力的 22.21%。该器件还表现出优异的光稳定性, 在 1 个太阳光照强度的白光 LED 下照射 1080 小时后, 仍保持初始效率的 84.2%。这项工作展示了一种关键的缺陷钝化途径, 可显著提高宽带隙钙钛矿太阳能电池的效率和稳定性。

A04-P06**Mitigating Perovskite Precursor Solution Degradation and Enhancing Device Performance via Anion- π Interactions**

Tianyu Sun*

Huazhong University of Science and Technology

The commercialization of perovskite solar cells (PSCs) faces challenges stemming from the

poor chemical stability of precursor solutions and device operational instability caused by material degradation. The fundamental cause of precursor solution aging is the deprotonation of organic cations within the perovskite, leading to chemical degradation and deviation from the stoichiometric solute ratio in the solution. This work introduces 1,3,5-tris(trifluoromethyl)benzene (TTB) as an additive into the precursor solution. TTB functions by anchoring various anions via anion- π interactions, effectively suppressing the MA⁺ deprotonation process. This mechanism inhibits solution aging and concurrently improves the quality of the solution-processed perovskite crystalline films. Devices fabricated in an n-i-p structure using a freshly prepared solution achieved PCE of 25.21%. Remarkably, devices made from solutions aged under industry-standard accelerated conditions (24 hours) or ambient storage (6 months) retained PCEs reaching 97% and 94%, respectively, of the efficiency obtained with the fresh solution.

A04-P07

基于真空闪蒸工艺的反式钙钛矿太阳能电池研究

刘挺丰*

云南大学

大部分的高性能反式小面积钙钛矿薄膜制备工艺需要滴加反溶剂的方法辅助,实现快速结晶,不适合扩展到大面积薄膜制备。采用真空闪蒸方法(VASP)制备钙钛矿薄膜,能快速去除前驱体溶液中的溶剂,因此可以代替滴加反溶剂实现钙钛矿的快速结晶。寻找具有酰胺、羰基等官能团的添加剂分子,对真空闪蒸工艺中钙钛矿的结晶过程进行调控,减少薄膜表面缺陷。目前,通过在钙钛矿层添加了N-甲基丁二酰亚胺分子,五元环结构的酰胺分子中的具有两个碳氧双键,能够与钙钛矿中未配位的铅离子结合,有效钝化缺陷,同时抑制离子迁移,提高钙钛矿电池的性能和稳定性。最终获得高性能、高稳定性的钙钛矿电池器件,以及可扩展到大面积均匀成膜的钙钛矿制备工艺。

A04-P08

协同添加剂工程提升 Spiro-OMeTAD 空穴传输性能: 锂盐与氧化剂的优化策略

冉伟林*

云南大学

目前,获得钙钛矿薄膜的常用策略、刮涂法、气淬法、一步、两步旋涂法。其中对比一步法和两步法,其中一步法旋涂法,将钙钛矿前体材料碘化铅和甲基碘化铵以化学计量比混合并溶解在N,N-二甲基甲酰胺(DMF)溶剂中。然而,由PbI₂和MAI之间的强离子反应引起的快速结晶使得很难产生具有完全表面覆盖的均匀钙钛矿膜,这导致器件光伏性能较差的体现。

对于正式两步法钙钛矿电池来说,由于在空穴传输层使用了Spiro-OMeTAD,且本征空穴传输层(HTL)低电导率的原因,以至于需要使用掺杂剂(例如锂离子, Li⁺)来增强器件性能。而对于这种不可控的掺杂剂经常导致器件中严重的稳定性问题,比如说 Li⁺在光照或偏压下的迁移会加速钙钛矿的降解,而且Li-TFSI在大气条件下Spiro-OMeTAD的缓慢氧化会导致器件的重复性差和不稳定性,而且由于空穴传输层中加入TBP来提升锂盐在Spiro-OMeTAD中的溶解性,但是由于其挥发会导致其薄膜表面形成针孔状,影响其器件效率。故在Spiro-OMeTAD中引入四氟间苯二甲酰胺,氟原子的强吸电子效应使酰胺基的羰基氧更富电子,增强氢键形成能力,进而来锚定TBP挥发,还有C-F键键能高(赋予化合物优异的耐热性、抗氧化性和化学惰性,并且C=O键可以抑制Spiro-OMeTAD中锂离子迁移。最终实现高稳定、高效率的正式两步法钙钛矿太阳能电池。

A04-P09

基于一歩法反式钙钛矿太阳能电池的结晶调控及光伏性能研究

吴雨娟、张文华*、王莞

云南大学材料与能源学院

有机-无机卤化物钙钛矿太阳能电池已迅速成为光伏应用最有前途的候选电池之一，引入适当官能团和几何构型的有机小分子对于实现高效和稳定的钙钛矿太阳能电池至关重要。本研究引入三个异构体，2-磺酰胺基苯甲酸、3-磺酰胺基苯甲酸和 4-磺酰胺基苯甲酸，都具有磺胺和羧基官能团，排列在不同的位置。通过一步法旋涂对比试验，计算和表征结果表明，间位取代的 3-磺酰胺基苯甲酸电子云密度更高，具有较优的钝化性能，减少了界面缺陷，从而优化了载流子动力学。

A04-P10**基于 CdS 复合水凝胶光热-光催化双引擎驱动高效太阳能净水**

李璇*

山东科技大学

兼具光热转换与催化功能的窄带隙硫化物金属半导体材料，其高导电性可以加速电子传输，显著增强了光催化动力学，同时避免了在强酸性和碱性条件下长期水蒸发循环中的结构不稳定性问题，更符合复杂废水处理需求。通过 SEM 对材料的形貌结构表征表明，水凝胶具有丰富的多孔结构，这种独特的结构特征促进了光的反射与漫射，有利于光吸收。复合材料展现出优异的光热-光催化协同性能，作为窄带隙半导体的硫化物具有出色的可见光捕获能力，对于全光谱太阳光吸收率超过 95%，实现高效的光热转换的同时，通过构建 S 型异质结，显著提高了光生载流子的分离效率并加速光催化反应动力学。水蒸发性能测试结果表明，该蒸发器在 1 个太阳光照强度的模拟太阳光照射下实现了 2.41 的高蒸发速率和 98.81% 的光热转换效率，同时对多种污染物表现出超过 95% 的优异去除效率。本课题为开发高效、多功能的水处理材料提供了新的思路，为设计新型环境功能材料提供了理论指导和技术支持。

A04-P11**定制无卤素芳香胺后处理实现超过 20%效率的印刷介观钙钛矿太阳能电池**

张杨、刘文峰、陈怡文、王栋杰、张坚*

桂林电子科技大学

基于介孔氧化钛/介孔氧化锆/多孔碳电极的无空穴传导印刷介观钙钛矿太阳能电池 (p-MPSCs) 在解决生产大面积模组和长期稳定性等方面具有优势^[1, 2]。然而，钙钛矿与碳电极之间的能级失配以及钙钛矿晶界处的缺陷不可避免地导致严重的非辐射复合和较大的开路电压损失^[3]。在此，本团队报道了一种在室温下使用无卤素芳香胺后处理的方法，以有效钝化钙钛矿晶界缺陷、优化钙钛矿/碳电极能带排列并改善器件界面的接触性能。无卤芳香胺通过与欠配位的 Pb^{2+} 相互作用，抑制钙钛矿薄膜中碘空位缺陷的形成，显著降低钙钛矿薄膜的陷阱态密度。同时，无卤素芳香胺在钙钛矿膜/碳电极界面诱导形成具有 II 型能带排列的低维钙钛矿，抑制了界面的非辐射复合并显著降低了器件的开路电压损失。结果，经脲分子后处理的 p-MPSCs 实现了 20.27% 的能量转换效率和 1.045 V 的开路电压。此外，未封装的 p-MPSCs 在空气中储存 3000 小时后仍保持初始效率的 95% 以上。无卤素芳香胺室温后处理策略为制备高效、稳定的 p-MPSCs 提供了一种简单、绿色的方法。

参考文献:

- [1] W. Liu, Y. Zhang, C. Chen, W. Xu, Q. Zeng, W. Yang, Y. Chen, Z. Zhang, D. Wang, J. Zhang, *Small* 2025, 2503174.
- [2] Y. Zhang, Y. Chen, Y. Liu, Y. Cai, Y. Liu, C. Wu, J. Wang, Z. Zhang, D. Wang, J. Zhang, *Small* 2025, 21, 2410856.
- [3] W. Xu, Y. Zhang, Y. Huang, Y. Tao, J. Wang, W. Liu, D. Wang, Z. Zhang, J. Xiong, J. Zhang, *Small* 2025, 21, 2407063.

A04-P12**揭示环境大气如何影响高效稳定的钙钛矿太阳能电池的空穴选择性自组装单层**

陈思凡、余桢华*

武汉大学物理学院

Self-assembled monolayers (SAMs) have been widely employed in high-performance inverted perovskite solar cells (PSCs) due to their excellent hole-selecting capabilities. However, most researchers suffer from the periodical non-reproducibility of the SAMs based PSCs even in a nitrogen filled glovebox for the complex and changing chemical atmosphere. But rare researches reveal how the ambient vapors affect the SAMs for efficient PSCs. In this work, we systematically investigated how varied vapors in a lab atmosphere affect the SAMs, exhibiting that most common vapors such as water, acetone or isopropanol do not hinder the SAMs performing in PSCs, except volatile acids or bases. Moreover, the dimethyl sulfoxide (DMSO) vapor is found to be able to dissociate the SAM micelles and form a dense SAM layer on substrates, due to the strong bonding between DMSO and the methoxy groups of SAMs. The DMSO vapor modified SAMs lead to more compact buried interface and notably suppressed charge recombination, which increases the efficiency of PSCs from 24.17% to 25.18%, compared to SAMs fabricated in N₂. The DMSO modified SAMs based device also shows enhanced operation stability under one-sun illumination, maintaining 90% of the initial efficiency after 800 h of maximum power point tracking.

A04-P13

双稀释策略动态-静态无序制备高效稳定的厚膜有机光伏器件

付振、郝晓涛*

山东大学

近年来我国提出了“双碳”战略目标，旨在推动能源结构的转型，实现可持续发展。这一战略要求加快构建清洁低碳、安全高效的能源体系，是我国能源革命的主攻方向。有机光伏作为可再生能源技术之一，利用有机半导体材料将光能转换为电能，具有重要的应用前景。但是其产业化应用受到了效率偏低、稳定性较差、难以生产均匀且无缺陷的薄膜等问题的制约，特别是对内在分子间相互作用、能量无序的来源以及对光物理过程的影响缺乏理解是限制器件性能提高的关键科学问题。

基于该背景，我们提出了一种新颖的双稀释策略，将 PMMA 加入至活性层和传输层氧化锌之间。PMMA 的加入可以有效抑制氧化锌的氧空位缺陷，同时由于其表面能与受体相近，可以有效调控给受体分布，抑制活性层激子和载流子缺陷，延长激子扩散距离，实现活性层-传输层双稀释。双稀释处理后的薄膜显示出优化的空穴转移，离域激子态寿命降低。表明电子-空穴对的离域增强，电荷解离得到改善；激子寿命以及扩散距离明显延长，意味着激子可以更有效地扩散至给受体界面进行解离。动态无序主要来源于分子热运动（如电声耦合），静态无序则主要来源于分子堆积，该策略的引入可以有效抑制电声耦合，增强分子间相互作用，调控活性层分子堆积，进而降低动态-静态无序，有助于制备稳定高效的厚膜有机光伏器件。此方法通过在高效率厚膜与稳定性之间实现关键性的协同作用，为有机光伏器件的商业化应用提供了新策略，同时确保了成本效益。

A04-P14

基于原位交联 SAMs 构建高效倒置器件

高亮*

厦门大学

在 p-i-n PSCs 中，HTL 是重要的组成部分，不仅起着选择性提取和传输空穴的作用，同时还作为生长基底影响钙钛矿膜的质量，因而对器件的效率及稳定性影响显著。目前，p-i-n PSCs 中应用广泛的 HTL 是聚[双(4-苯基)(2,4,6-三甲基苯基)胺] (PTAA) 与聚(3,4-乙烯二氧噻吩)-聚苯乙烯磺酸 (PEDOT:PSS)。PTAA 价格昂贵 (>2000 元/克) 且表面润湿性差，不利于大规模应用；而 PEDOT:PSS 则存在酸性和腐蚀性的问题，损害器件的长期稳定性。这些问题制约着 p-i-n PSCs 的进一步发展，开发廉价、高效、稳定的新型 HTLs 显得尤为重要。在众多类型的新型 HTLs 中，具有锚定基团的自组装单层 (SAM) 材料显示出商业化应

用的潜力。该类材料具备合成简单、批次重复性好、钝化效果明显等独特优势，不仅可自发锚定在金属氧化物表面以调节界面能级排列，同时还具有高的光透过率，因而可显著提升器件的开路电压（VOC）短路电流（JSC）。但是，小分子 SAMs 仍存在光、热等压力下稳定较差的问题。为此，我们设计了一种在退火过程中可热交联的 SAMs 来提升分子的稳定性，进而改善器件的长期稳定性。

仅发表论文

A04-PO01

生长动力学调控及深能级缺陷钝化实现高效率硒化锑太阳能电池

莫安明、李志强*

河北大学物理科学与技术学院

Sb₂Se₃ 光伏器件效率受限于异质结界面与体相内严重的载流子复合，根源在于材料本身的低缺陷形成能及准一维结构导致的高密度深能级缺陷（如硒空位 V_{Se}、锑硒反位 Sb_{Se}）。如何通过界面工程与缺陷钝化提升器件性能，是该领域的核心挑战。

针对背接触界面特性，我们应用原位硒化工艺对钼（Mo）及钨（W）背电极表面进行了处理，诱导形成 MoSe₂ 或 WSe₂ 界面层。这一处理促使后续生长的 Sb₂Se₃ 从[hk0]取向薄膜转变为[hk1]方向生长的纳米棒阵列结构，不仅消除了背电极与吸收层间的肖特基势垒，增加背接触界面欧姆接触，提升载流子收集效率，还通过纳米棒阵列的粗糙表面增强光散射，降低器件反射率，实现准全向光吸收。此外，在吸收层与缓冲层间引入原子层沉积的超薄 TiO₂ 层，有效抑制了 Sb₂Se₃ 在 CdS 缓冲层制备过程中的溶解，并减少界面漏电通道。器件填充因子达 70.3%，短路电流密度 32.58 mA/cm²，光电转换效率（PCE）提升至 9.2%[1]。

为解决 Sb₂Se₃ 传统制备工艺中缺陷控制的难题，我们开发了射流气相沉积（IVD）技术。该技术通过衬底精准控温实现 Sb₂Se₃ 沿（001）方向的择优生长，形成(Sb₄Se₆)_n 链状结构垂直于衬底堆叠的高质量薄膜。与共蒸发、近空间升华法相比，IVD 制备的薄膜界面缺陷与体缺陷显著减少，载流子输运效率提升。制备出高质量沿（001）方向择优生长的 Sb₂Se₃ 薄膜，获得了创纪录 10.12% 的光电转换效率[2]。

针对高纯度源材料的成本瓶颈，我们系统研究了不同纯度源（3N-6N）中非故意掺杂的影响。通过电感耦合等离子体质谱（ICP-MS）与第一性原理计算发现，杂质主要通过增加缺陷密度与俘获截面而非引入新的缺陷能级影响器件性能。通过在制备过程中引入硒（Se）补偿策略，成功抑制了本征反位缺陷 Sb_{Se} 及硅相关缺陷复合物（E3），载流子寿命从 0.37 ps 显著提升至 3.4 ps。这一策略使使用低纯度源材料的器件 PCE 达到 10.41%[3]，为低成本高效器件制备提供了关键技术突破。

针对界面与体缺陷的协同钝化，我们提出光退火处理策略。该工艺通过光热协同作用促进 Cd 从 CdS 缓冲层向 Sb₂Se₃ 体相扩散，诱导异质结界面原子重排，改善晶格匹配并降低界面缺陷密度。同时，Cd 元素替代有效钝化了体相深能级陷阱，形成浅缺陷（CdSb）。器件并联电导降低，载流子分离与收集效率显著提高。最终，光退火处理的器件实现 10.58% 的光电转换效率，经独立实验室认证为 10.18%[4]，刷新了 Sb₂Se₃ 基太阳能电池的效率纪录。

本研究通过生长动力学调控与缺陷钝化的协同创新，系统提升了 Sb₂Se₃ 太阳能电池的效率，揭示了缺陷形成与钝化的微观机制，为低成本、柔性光伏器件的发展提供了可扩展的技术路径。未来研究将聚焦于新型界面缓冲层开发、柔性衬底低温沉积技术，推动 Sb₂Se₃ 太阳能电池在商业化应用中的潜力。

参考文献：

- [1] Z. Li, X. Liang, G. Li, H. Liu, H. Zhang, J. Guo, J. Chen, K. Shen, X. San, W. Yu, R. E. I. Schropp, Y. Mai, Nature Communications, 2019, 10(1): 125.
- [2] Z. Duan, X. Liang, Y. Feng, H. Ma, B. Liang, Y. Wang, S. Luo, S. Wang, R. E. I. Schropp, Y. Mai, Z. Li, Advanced Materials, 2022, 34(30): 2202969.
- [3] A. Mo, Y. Feng, B. Yang, W. Dang, X. Liang, W. Cao, Y. Guo, T. Chen, Z. Li, Advanced Functional Materials, 2024, 34(29): 2316292.
- [4] X. Liang, X. Wang, Q. Chang, B. Yang, W. Dang, Z. Zhang, Y. Guo, L. Yang, Z. Li, Energy

A04-PO02**热交联的自组装单层提升倒置钙钛矿电池的稳定性**王万海^{*1}、李晓锋¹、高亮¹、刘高奇²

1. 厦门大学

2. 上海科技大学

含有自组装单层 (SAM) 空穴传输层 (HTLs) 的倒置钙钛矿太阳能电池 (PSCs) 面临着界面亲和力不足和固有不稳定性的挑战。本文报道了一种热交联 SAM 设计策略, 可以同时提高其对钙钛矿前驱体溶液的表面润湿性和热稳定性。分子工程 SAM 形成原位交联 SAM 网络, 赋予 HTLs 更好的表面润湿性、界面功能化和耐溶剂性, 从而同步改善钙钛矿埋藏界面的形貌和电荷输运。基于 1.56 eV 的可交联 SAM 的带隙 PSCs 的冠军效率为 24.17%, 优于传统的咪唑 SAM (22.02%)。值得注意的是, 稳定性得到了显著提高, 在 100° C 下暴露 1000 小时后, 保持初始效率的 90% 以上。在 1.25 eV 窄带隙 PSCs 中, 还探索了交联 HTLs 的通用性, 以实现 22.05% 的令人印象深刻的效率。该研究为开发高效且固有稳定的 SAMs 提供了宝贵的见解, 从而促进了单结 p-i-n psc 和串联器件的商业化。

A04-PO03**基于孔道工程和霍夫迈斯特效应制备具有可定制热质平衡特征的高稳定性 Janus 水凝胶蒸发器**

朱政洁、宋增沛、田恩旭、尹太超、王鑫*

齐鲁工业大学

太阳能蒸发器能够利用清洁可再生的太阳能实现淡水生产, 在缓解淡水短缺方面展现出广阔的应用前景。其中, 生物基水凝胶太阳能蒸发器因其卓越的水传输能力、低蒸发焓、灵活的加工适应性以及丰富的生物质原料来源而受到广泛关注。然而, 开发先进的生物基水凝胶太阳能蒸发器仍面临热-质不平衡、溶胀失稳、表面盐析、微生物侵蚀等挑战。本研究以制革工业废弃物提取的明胶为原料, 通过孔道工程和霍夫迈斯特效应, 成功构建了具有热质平衡特性的高稳定性 Janus 型生物基水凝胶太阳能蒸发器, 实现了高效多任务界面蒸发。通过调整水相碳酸钙牺牲模板的堆积参数, 可精确独立地定制蒸发器的孔道结构, 克服传统蒸发器内部水传输和热传导之间的权衡效应, 实现了热质平衡, 在一个太阳光照下可达到 $4.61 \text{ kg m}^{-2} \text{ h}^{-1}$ 的高蒸发速率。采用霍夫迈斯特效应辅助交联技术, 构建了具有抗溶胀特的强韧水凝胶基材, 使蒸发器在水下环境中保持长期结构稳定性。通过不对称光接枝二苯甲酮功能化的聚二甲基硅氧烷, 所开发的 Janus 蒸发器表现出持久的抗盐性能以及增强的热局域化效应, 并且在高盐环境 (20 wt% NaCl) 中可以稳定运行。此外, 通过吡咯和多巴胺杂化共聚及原位还原银纳米颗粒所制备的多功能黑体纳米填料赋予该水凝胶太阳能蒸发器综合应用优势, 包括高效光热转换、广谱抗菌性能及有机污染物催化降解能力。本研究为先进水凝胶界面蒸发器的设计提供了深刻见解。

A04-PO04**可常压干燥多功能集成的仿木气凝胶材料**

索子厚、朱政洁、赵海平、王鑫*

齐鲁工业大学

得益于独特的各向异性管道结构、优异的轴向强度和低密度等特点, 天然木材及其衍生的木基功能材料。然而, 受限于较长的再生周期、显著的个体差异性以及易燃性等固有缺点, 木基材料在现代工业中的实际应用受到较大限制。近年来, 随着对天然木材多尺度研究的深入, 基于自下而上策略设计、构建能克服天然木材固有缺陷的仿木材料受到了广泛的关注。然而, 当前仿木材料的构建严重依赖不可回收的交联固化处理和高成本、高能耗的冷冻干燥工艺, 极大地限制了其可持续回收和工业化应用。本研究通过多巴胺化学和原位还原, 合成了具有石墨基材、聚多巴胺涂层和银纳米颗粒三重结构的构筑基元, 进而通过冷冻铸造驱动的自下而上策略构建兼具可闭环回收、常压干燥的仿木气凝胶材料。通过冷冻铸造工序调控功能性构筑基元的组装参数, 从而在管壁界面外共组装形成高机械强度的“外骨骼”物理结构, 进而赋

予了仿木气凝胶材料常压干燥能力（实现 95.3% 的体积保留率）、高轴向强度（轴向载荷达 4.5 MPa）以及抗微生物侵蚀能力。此外，基于动态离子交联的仿木气凝胶可以轻松实现闭环回收和非降级重塑。不仅如此，通过不对称润湿性修饰与孔道扭曲度调控对仿木气凝胶进行优化，进而赋予了仿木气凝胶材料优异的热质平衡能力、出色的蒸发性能、长期耐盐性、以及染料降解能力。最后，通过引入阻燃性聚磷酸铵与功能性构筑基元进行共混组装，可进一步提升外骨骼结构抵抗热通量能力，从而赋予了仿木气凝胶材料出色的阻燃隔热能力（峰值热释放量仅为 9.6 kW/m²）。本工作构建了兼具常压干燥、闭环回收、海水淡化、阻燃隔热、高轴向强度、抗微生物侵蚀、污染物降解的平台型材料，为多功能仿木气凝胶材料的设计提供了创新性的指导意义。