

分会场九：纳米菁青分会

基于适度有序超表面的智能偏振成像技术研究

侯宜栋*

四川大学

全偏振检测与成像技术在遥感、军事、工业检测等领域具有重要应用价值。传统的基于偏振片和玻片的检测方案已经无法满足科技飞速发展对实时、小型化、高性能检测的需求。近年来，微纳光学的快速进步为实现全偏振检测与成像提供全新的技术方案。精确设计的微纳结构阵列可以同时扮演偏振片和玻片的角色，先进的微纳加工技术可以将微结构阵列与感光像素单元精确匹配，进而实现全偏振检测与成像。然而，微结构的精确设计与加工依然是个挑战，特别是工作在可见和紫外等短波段的亚波长微纳结构。在此项研究中，我们敏锐发现Bottom-Up技术中的长程无序性恰为感知空间偏振信息提供了天然基础，进而利用深度学习算法来构建Stokes参数与光感知强度矩阵之间的映射关系（即），即可实现偏振检测与成像。实验研究表明，基于自组装微球阵列和角度沉积技术的壳状微结构具有优异的光学手性和各向异性，可有效感知入射光中的各向异性分量和自旋分量；深度学习算法可有效建立映射关系，并有效提升检测精度。在760nm处的S1，S2，和S3参数检测方差分别小于0.11%，0.11%和0.37%，而在400nm到840nm的宽波段范围内的平均检测方差分别小于0.82%，1.01%和3.23%。检测精度优于所有已知的类似技术方案。同时，我们还深入分析了偏振检测的影响因素，建立高精度偏振检测模型；开展了偏振成像芯片与器件研究，实现了径向光束和角向光束的偏振成像检测。由于微球自组装技术和角度沉积技术具有大面积、低成本的特点，此项研究有望在偏振检测、偏振成像等领域获得潜在应用价值。

关键词偏振检测；偏振成像；微球光刻技术；手性球壳；长程无序

钙钛矿类直接型 X 射线探测器离子迁移研究

李云龙*

中国科学院深圳先进技术研究院

金属卤化物钙钛矿类（MHPs）材料因其优异的X射线衰减系数、高载流子迁移率-寿命（ $\mu\tau$ ）积、卓越的成像检测效率以及可溶液加工的可扩展性，在X射线探测领域受到了广泛关注。这些特性使MHPs成为新一代高性能辐射探测半导体材料的有力竞争者。然而，MHPs内部不可控的离子迁移会导致器件响应的不稳定性 and 可靠性受限，严重制约其在成像应用中的实际应用，尤其是在三维钙钛矿体系中。在我们的研究中，首先探讨了离子迁移导致X射线辐射非线性响应行为的物理机制，并针对该问题，重点讨论利用维度控制及异质结结构设计的手段进行优化的策略，以实现高性能、高稳定性的钙钛矿类直接型X射线探测器，推动其实用化进程。

关键词 金属卤化物；半导体；钙钛矿类；直接型X射线探测器；离子迁移

报告人简介：

李云龙，副研究员，博士研究生导师，长期致力于新型光电子半导体材料及器件的研究。2012年本科毕业于苏州大学，2017年博士毕业于北京大学（师从中国科学院院士黄春辉教授），2018-2021年在加拿大萨省大学从事博士后研究，于2021年4月加入中国科学院深圳先进技术研究院。在校期间先后获得苏州大学优秀本科毕业生、北京大学优秀博士毕业生、北京大学创新奖等荣誉，工作以来先后入选中国科学院、中国科协青年人才托举工程、广东省青年拔尖人才。在Energy Environ. Sci.、J. Am. Chem. Soc.、Adv. Mater.、Adv. Energy Mater.等国际高水平期刊发表论文40余篇，Google Scholar总被引4300余次，h指数25，获国家发明专利1项，主持及参与省部级以上项目7项，并兼任《无机盐工业》杂志青年编委，受邀担任Science China-Technological Sciences、Frontiers in Chemistry等期刊客座编辑，并担任国际学术会议分会主席一次，并多次获邀在国内外学术会议作邀请报告。

柔性高效固态热管理系统

马儒军*

南开大学

柔性低能耗热管理技术既是未来高新技术发展的重要保障又符合我国“双碳”的战略目标。然而，传统的热管理系统通常耗电量大、不环保、体积大等。这里，为了降低能耗，我们开展了柔性节能高效固态热管理系统研究，从低能耗的电卡效应到零能耗的辐射效应的热管理系统，再到自持续的可穿戴固态热管理系统。利用电卡效应制备的低能耗热管理系统，不仅具备环保、高效、小型化且结构简单，还可以对电子器件进行时空精准控温。利用辐射效应制备的零能耗热管理系统，不仅解决了传统辐射热管理系统在应对动态温度变化时的局限性，更实现了保温与制冷双模式的零能耗切换效果，显著提升了热管理系统的能效和灵活性。另外，通过光伏模块与电卡-静电力模块集成的自持续全天候可穿戴热管理衣物，从根本上解决了电卡效应热管理系统的供能难题，可根据人体制冷/加热需求实现了快速体温调节，并扩大了人体热舒适区范围。这种节能的固态热管理系统为我国“双碳”目标的顺利实现提供了理论和技术支撑。

关键词热管理，节能，固态，电卡效应，辐射效应

报告人简介：



马儒军，南开大学材料科学与工程学院教授、博导，国家四青人才，科技部国家重点研发计划“变革性技术”重点专项课题负责人，主持国家自然科学基金面上项目（2）与国际交流项目、天津市自然科学基金重点项目等。2013年2月博士毕业于韩国成均馆大学纳米科技学院（导师：SeunghyunBaik教授），随后在该校能源科学与基础科学研究院从事博士后研究员的工作，并于2015年4月加入美国加州大学洛杉矶分校（UCLA）裴启兵教授课题组继续从事博士后研究员的工作。2018年9月加入南开大学材料科学与工程学院。

主要研究方向为节能高效热管理系统。近年来以通讯或第一作者发表的期刊有Science(2), PNAS, Nature Communications, Joule, Chemical Society Reviews, Energy&Environmental Science, Advanced Materials(4), Advanced Energy Materials, Nano Letters(7), ACS nano(2)等；授权美国、中国、韩国专利10余项，申请国际专利2项。

单原子催化的精细化学品流动合成

陈仲欣*

香港中文大学（深圳）

多相催化的连续合成是推动绿色制药、医药行业制造升级的关键性技术，特别是发展具有与均相催化剂类似结构特征的单原子催化连续合成技术，有望实现医药衍生物的普适性高效制备。报告人将从催化剂设计、反应器工程等层面汇报在单原子催化流动合成高值化学品的近期进展。通过在原子层面调控催化剂的配位环境与金属-金属间距，开发具有独特双（多）位点协同机制的催化体系，解决传统单原子催化剂在复杂多步、多组分有机反应中的活性不足问题，并开展在液相有机催化中连续流动合成的方法学研究，实现从基础化学品出发定向合成高价值医药衍生物。在反应器工程层面，搭建可用于光、电、热驱动的多相催化流动反应器，并结合流体动力学模拟等手段理解反应器内部多尺度物理变化，如传质、传热过程对反应器性能的影响，对反应器优化升级，实现精细化学品的克级连续生产。

关键词 单原子催化；有机合成；药物分子；高值化学品

缺陷型UIO66的荧光淬灭/恢复性能研究

孙璇*、徐奥、邵路瑶

湖北中医药大学

UIO66作为一种特殊的金属有机骨架(MOF)材料,可容纳高达12个配体,而传统MOF通常只能容纳4-6个。因此,我们推测缺陷型UIO66(DU, defectiveUIO66)能够在保持结构稳定的前提下,具有更为显著的DNA单链吸附/双链解吸特性,从而实现荧光基团的淬灭/恢复。通过添加不同浓度的二氯乙酸作为补偿配体,高度多孔和分散良好的DU1、DU2被成功合成。将上述材料与荧光探针孵育后测定并计算得到DU1的淬灭率为92.66%、恢复率为1256.75%,效果最为显著。我们推测适当的结构塌陷提高了DU1的比表面积,导致金属离子暴露的正电荷增多,有利于更多带负电荷单链DNA的吸附。采用FTIR分析其中的化学键变化,在吸附过程中:(1) 3408cm⁻¹峰强度减弱,表明DNA中的氨基与DU1中的Zr形成配位,减少了自由氨基和羟基的数量;(2) 1656cm⁻¹峰消失,表明DNA与DU1中的羧基形成配位或氢键,影响了C=O基团的振动。在解吸过程中:(1) 3408cm⁻¹峰强度增强,表明更多的羟基和氨基基团自由,这些基团之前可能与单链DNA配位;(2) 1591cm⁻¹峰强度减弱,表明双链DNA形成后C=N基团的配位作用减少,这是DNA从DU1表面解吸的直接证据。采用XPS分析其中的反应机理,发现在吸附过程中Zr3d3/2和Zr3d5/2的结合能增加,是由于DU1中的Zr与DNA结合产生的电子转移所致;而解吸过程中结合能降低,表明Zr与DNA的结合减弱,说明DU1与新形成的双链DNA的距离变远,并趋向于恢复到初始状态,说明DU1中Zr的光致电子转移效应在荧光淬灭和恢复过程中起着重要作用。

关键词缺陷型UIO66; 荧光淬灭; 荧光恢复

中红外极化激元材料和结构研究

杨晓霞*

国家纳米科学中心

中红外波段覆盖了众多分子的特征指纹峰，在生物、环境监测以及纳米光子学等领域具有重要的应用价值。然而，由于中红外光波长（微米级）与分子尺寸（纳米级）之间存在3个数量级的尺度差异，导致光与物质的相互作用效率极低。为解决这一关键科学问题，我们聚焦于发展能够实现中红外光波长高效压缩的极化激元材料和结构。具体包括极化激元的电学激发方法[1]，原子级平整的纳米共振结构设计[2]，实现纳米尺度分子的直接红外光谱探测[3]等。本研究为发展高性能片上红外光学器件和纳米光谱技术奠定了重要基础。

关键词 石墨烯、氮化硼、极化激元、纳米结构、增强红外光谱

石墨烯薄膜材料的制备与应用研究

张金灿*

苏州大学

石墨烯具有优异的电学、光学、热学和力学特性，是主导未来高科技产业竞争的关键战略材料之一。高质量石墨烯薄膜的大面积可控制备是石墨烯材料发挥优异性能和真正实现应用的前提。该报告将围绕高质量石墨烯薄膜的化学气相沉积生长、批量制备和应用研究展开。研究亮点如下：（1）揭示并解决了石墨烯高温生长过程中普遍存在的污染问题及其成因，并在此基础上提出了多种超洁净石墨烯薄膜的可控制备策略；（2）解决了高质量石墨烯薄膜批量制备均匀性差和生长速度慢的难题，分别实现了单晶石墨烯薄膜和双层石墨烯薄膜的大尺寸快速合成；（3）发展了无胶洁净转移法，将悬空石墨烯单晶薄膜成功应用于亚纳米分辨率的液相中金纳米颗粒原位生长动力学反应的研究和多种类型生物大分子的高分辨冷冻电镜成像；（4）基于大尺寸高质量石墨烯薄膜，构筑了高迁移率的石墨烯电子学器件阵列和高响应度、高灵敏度的石墨烯基异质结柔性光电探测器件。上述工作有力地推动石墨烯制备科学和器件应用的发展，为未来实现高质量石墨烯薄膜的实用化奠定了前期基础。

关键词 石墨烯，化学气相沉积，制备，应用

时空分辨单颗粒光谱与催化

郑昭科*

山东大学

真实的催化转换过程在微纳尺度上具有显著的表界面异质性和复杂的时空动态性，需通过高精度表征手段获取更精准的表界面构效关系信息。单颗粒荧光光谱技术，通过原位监测单个纳米颗粒荧光特征参量，可在单颗粒尺度上研究表界面结构演化、电荷转移和能量传递的具体物理化学过程，可用于精准揭示表界面物性和催化机制。前期，开发了拥有自主知识产权的“空间-分辨”单颗粒荧光光谱技术，并初步实现具有“时间-分辨”特性的单颗粒光谱系统的搭建。基于该技术，在单颗粒水平证实了热电子从吸光中心到催化中心的转移；设计了微流体反应装置，实现了催化条件下单颗粒表面反应的原位研究，揭示了载流子驱动的H₂O分子活化反应机制和非竞争吸附反应机制，发现直接能量转移机制在HCOOH分子活化中的关键作用；首次实现BiVO₄表面缺陷的纳米级成像，为固体材料表面缺陷分布和成像研究提供了一种空间高分辨表征技术，进而揭示了特定活性位构筑缺陷对O₂分子的吸附和活化机制，加快了界面电荷转移，提升了苯胺氧化偶联的催化活性。

关键词单颗粒；光电催化；原位表征

金属纳球序构阵列及其光学特性

刘迪龙*

中国科学院合肥物质科学研究院

将金属纳米单元阵列化，使结构单元间远场或近场等离激元强耦合作用，可产生结构单元无法观察到的新物理效应，进而突现超越天然材料的宏观超常电磁参数，是下一代光/电/磁等器件设计的重要材料基础。而如何在纳米维度上高效、精准地构筑金属序构阵列，并丰富其序构多样性，一直是等离激元序构阵列研究领域的难点所在。本报告围绕这一问题，开展了基于自组装策略的金属等离激元序构阵列的构筑及其光耦合特性，以及在光学传感应用方面的探究工作；将为基于金属等离激元序构阵列的构筑设计及器件研制提供了新方法和新思路。

关键词 金属微纳球、表面等离激元、光学耦合、分子互作传感

报告人简介：



将金属纳米单元阵列化，使结构单元间远场或近场等离激元强耦合作用，可产生结构单元无法观察到的新物理效应，进而突现超越天然材料的宏观超常电磁参数，是下一代光/电/磁等器件设计的重要材料基础。而在纳米维度上高效、精准地构筑金属序构阵列，并丰富其序构多样性，一直是等离激元序构阵列研究领域的难点所在。本方向主要围绕这一问题，开展了基于自组装策略的金属等离激元序构阵列的构筑及其光耦合特性，以及在光学传感应用方面的探究工作；从而为基于金属等离激元序构阵列的构筑设计及器件研制提供了新方法和新思路。

微纳光催化材料的梯度设计

曹少文*

武汉理工大学

将太阳能通过人工光合作用转化为高附加值产物被认为是缓解化石燃料过度消耗这一问题的有效策略。开发低成本、可持续且高活性的光催化剂对提升实际应用中的太阳能-化学能转换效率至关重要。从原子和分子层面调控材料结构，建立有序内建电场以加速光生电子-空穴对的分离，是实现高效光催化体系的关键。本次汇报系统介绍面向不同应用的多类型光催化体系梯度化设计：（1）通过单体调控构建供体-受体聚合物体系，借助内建电场形成定向电荷传输通道，显著提升H₂O₂光合成效率；（2）基于全域空间电荷分离的逻辑框架，精准构筑超晶格界面与S型异质结，在内建电场介导下实现界面协同作用，成功达成超快空间电荷分离与转移，实现高效光催化产氢；（3）通过静电吸附-原位生长策略构建聚合物/量子点二维/零维体系，形成界面电场促进跨界面电荷转移，显著增强光催化产氢性能。

关键词光催化材料；结构调控；界面设计；电荷转移

仿生光电催化水氧化

叶盛*

安徽农业大学

化石能源的消耗及其带来的环境污染问题迫使人们不断地开发新型可再生的清洁能源。光电催化分解水制氢凭借其高能源储量、低制氢成本、绿色高效可持续制氢能力成为当前最有前景的太阳能利用技术之一。我们通过模拟光系统II（PSII）的功能组装光电催化体系，采用钒酸铋半导体作为捕光材料，开发新型界面电荷传输媒介，促进光生电荷的分离与传输。该体系在光电催化水分解反应中展示了优异的催化活性和稳定性。该研究为合理设计和组装高效的人工光合体系用于太阳燃料的转化提供了新的思路和方法

关键词 光电催化；仿生体系；钒酸铋；水氧化

基于多序参量耦合的铁电材料光电功能调控

和建刚*

北京科技大学

利用外部刺激调控材料性能对于开发多功能智能材料至关重要。单相材料内部多个序参量之间的强耦合为实现精确的性能调控奠定了坚实基础。然而，在大多数单一材料中，这种交叉耦合作用相当微弱。借助第一性原理计算，我们证明层状混合阴离子化合物 MoBr_2O_2 具有电场可切换的自发极化特性，并且其极性畸变与电子结构及光学性质之间存在超强耦合。通过对单畴样品施加外部电场、加热或强光照射，该材料为实现可调谐的Rashba自旋劈裂、电致变色、热致变色、光致变色以及非线性光学效应提供了可行途径。此外，它还表现出异常巨大的光致伸缩效应。这些发现不仅展示了在单一材料中实现多序参量耦合的可行性，同时也为基于性能调控的综合应用（如能量收集、信息处理和超快控制）拓展了道路。

关键词铁电材料、序参量耦合、光电性质、第一性原理

低维金属卤化物闪烁体的制备及高能射线探测与成像研究

肖家文*

北京工业大学

近年来低维金属卤化物由于其优异的光电性质备受研究者的关注。金属卤化物除了在光伏、发光与显示、光电探测、激光等领域的应用前景突出，在高能射线探测与成像领域也逐渐引起人们的关注¹⁻²。本研究探讨了一类低维过渡金属卤化物闪烁体的制备及其X射线成像应用潜力。研究发现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/MeV³。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⁴。将该类金属卤化物闪烁体薄膜应用于X射线成像，可得到分辨率达20lp/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。

关键词 金属卤化物；闪烁体；X射线成像

无机材料调控重水为氘源的氘代电合成

刘翠波*

天津大学

氘(D)是氢的一种同位素,由于碳氘键比碳氢键稳定,氘代在改善药物代谢活性、探究有机反应机理和提升材料分子性能等方面有着重要应用。例如,2017年美国食品和药物管理局批准了第一例上市氘代药-安泰坦,可实现少剂量、低毒副作用有效治疗罕见的亨廷顿舞蹈症;2021年我国自主研发的全球首个氘代肿瘤药-多纳非尼获批上市。目前,氘代化合物的可控合成已成为合成化学前沿研究领域。因此,发展基于廉价、安全氘源的温和、高效的合成方法,实现氘代分子的高效构建具有重要意义。

官能化氘代烯烃是合成氘代药物的重要合成子,然而,易还原基团取代的炔烃的化学选择性半还原氘代合成官能化氘代烯烃仍面临很大的挑战。基于此,我们设计并合成了具有孤立钨位点的非晶硫化钨纳米囊泡,通过X射线吸收光谱等多种表征手段确定了钨以孤立位点的形式存在。以硫化钨为工作电极和D₂O为氘源,实现了多种易还原基团(C-Br, C=O等)修饰的氘代烯烃的高选择性合成,并构建了多个氘代药物分子。原位拉曼光谱和CO毒化实验证实了炔烃通过σ-炔基而非平躺方式吸附在材料表面,并结合高分辨质谱和电子顺磁共振波谱等确定了关键反应中间体,并提出了D*参与的氘代反应机制。

关键词无机材料结构; 氘代电合成; 氘代烯烃; 重水为氘源; 官能团兼容性

基于微纳氮化物半导体的高性能光电器件研究

吴远鹏*

北京大学深圳研究生院

近年来, III-族氮化物半导体因其可调的禁带宽度、优异的激子结合能以及与传统硅基工艺的兼容性, 成为实现下一代高性能光电器件的重要材料体系。本文围绕微纳尺度氮化物结构的设计、外延及器件实现开展系统研究, 探索其在高效发光、量子调控和新型光电应用中的潜力。

在微发光二极管 (Micro-LED) 方向, 我们通过应变调控和载流子输运设计, 在硅衬底上实现了亚微米级 InGa_N 微LED 的单片外延。引入 InGa_N/AlGa_N 极化掺杂结构, 有效削弱了量子限制斯塔克效应, 实现了发光波长在宽电流范围内的稳定输出。特别是在红光波段, 短周期 InGa_N/Ga_N 超晶格和厚 n-Ga_N 插层的协同作用显著抑制了寄生发射, 使器件在 660nm 波长下仍保持超过 3% 的外量子效率, 为全彩化微显示技术奠定基础。

在深紫外与量子光电方向, 我们实现了 Ga_N/Al_N 异质结的原子级界面调控。通过调节半极性面生长, 显著抑制界面阳离子置换, 获得了无明显扩散的超薄 Ga_N 量子阱, 其内部量子效率高达 75%, 并成功制备出近乎无 QCSE 的深紫外发光器件。此外, 针对超宽禁带 Al_N 纳米结构, 采用 N 丰富条件下的外延工艺显著提高了 Mg 掺杂效率, 降低了补偿缺陷的形成能, 实现了以隧穿为主导的高效电流输运, 突破了传统平面 Al_N 难以实现 p 型导电的瓶颈。

在纳米光子与量子调控方面, 利用范德华外延技术, 我们首次在六方氮化硼上实现了无湿 ting 层的 Ga_N 量子点生长。这类量子点表现出超过传统 Ga_N 自组装量子点六倍的光致发光强度, 且无闪烁现象, 可剥离转移, 为高性能量子光源及集成光子学提供了新路径。同时, 基于氮化物纳米线和单层异质结构的激子强耦合效应, 也为新型光电与光催化器件带来了重要启示。

综合来看, 微纳尺度氮化物半导体通过材料、界面及应变的协同设计, 实现了高效光发射、宽电流稳定性、深紫外高内量子效率和超窄线宽发射等一系列突破。这些成果为面向显示、量子通信、精密传感和深紫外光电的下一代高性能器件提供了坚实的材料与器件基础。

关键词 氮化物半导体; 外延生长; 发光器件; 微纳材料

微米厚钙钛矿晶片生长与光电性能研究

陈召来*

山东大学

有机-无机卤化物钙钛矿单晶具有广阔的光电应用前景，但其高表面陷阱密度和相关离子迁移阻碍了器件的性能和稳定性。本文设计并提出了一种一维(1D)钙钛矿作为晶体/电极界面的阻挡层，以减轻表面问题。作为一个模型系统，Cs_{0.05}FA_{0.95}PbI₃单晶钙钛矿太阳能电池的界面离子迁移被明显抑制，导致T₉₀寿命从260小时增加到1000小时，比之前报道的结果提升5倍。此外，表面碘离子空位的减少抑制了非辐射复合，从而将效率从22.1%提高到23.8%，这是单晶光电转换效率的最高值之一。由于晶体表面缺陷是一个普遍而开放的问题，我们的策略对优化各种单晶钙钛矿器件具有指导意义。

关键词 钙钛矿单晶，太阳能电池，辐射探测

物理和化学稳定的钼基复合电极及其在p-i-n型钙钛矿太阳能电池的应用

范润东、周欢萍*

北京大学

金属卤化物钙钛矿太阳能电池（Perovskite Solar Cells, PSCs）近年来受到了广泛关注。尽管采用传统金属电极的PSCs已取得显著进展，但其在稳定性和高成本等方面仍面临挑战，因此亟需开发创新型电极设计以推动其产业化应用。在此，我们开发出一种物理和化学稳定性兼备的钼（Mo）电极，从根本上应对由电极引发的不稳定因素。通过空间分辨元素分析和理论研究，验证了Mo离子在器件中的高扩散能垒。同时，结构与形貌表征表明，当Mo与钙钛矿（PVSK）接触时，在老化过程中几乎没有发生塑性变形和卤素-金属反应。为进一步增强Mo薄膜的均匀性和附着性，在电极/底层界面处引入了一层超薄的钛（Ti）种子层以实现界面稳定。基于所构建的p-i-n型PSC器件结构（ITO/PTAA/PVSK/C₆₀/SnO₂/ITO/Ti/Mo），其最佳器件实现了22.25%的效率，在基于Mo电极的PSCs中处于领先水平。与此同时，该器件在连续运行2000小时后性能几乎无衰减，在50 - 60 ° C环境下稳定运行1300小时后仍保持初始效率的91%。总之，该多层结构的钼电极为实现高性能PSCs中的全面稳定电极设计开辟了一条有效路径。

关键词 钙钛矿；钼电极；太阳能电池；稳定性

碘嵌入反应制备非合金化 α 相甲脒铅碘钙钛矿太阳能电池

陈彦润、周欢萍*

北京大学

钙钛矿太阳能电池（PSCs）因其高光电转换效率（PCE）和低制造成本而备受关注，然而较差的长期稳定性严重制约其产业化进程。尽管添加剂工程、界面工程和传输层优化等手段已使PSCs的运行寿命提升至数千小时，但钙钛矿吸光层的本征稳定性问题仍是实现大规模商业应用的关键瓶颈。其中，甲脒铅碘（FAPbI₃）作为单结PSCs中最具潜力的光吸收材料，面临着复杂的结晶动力学过程及热力学亚稳定性等挑战，制备高晶体质量的非合金化 α -FAPbI₃薄膜是关键难题。针对以上问题，本研究提出了一种基于碘嵌入-脱嵌策略的薄膜制备方法。同源挥发性添加剂碘分子（I₂）与钙钛矿前驱体中的碘离子反应生成多碘离子（如I₃⁻），并形成钙钛矿-碘复合中间体，改变了传统反应路径。形成的新型中间体为 α -FAPbI₃钙钛矿的形成提供了角共享Pb-I骨架结构单元，同时显著降低了反应势垒。在后续退火过程中，碘添加剂可完全挥发，最终获得兼具高均匀性与高晶体质量的薄膜。基于此方法制备的非合金化 α -FAPbI₃太阳能电池实现了超过24%的PCE。更为重要的是，相应器件展现出出色的运行稳定性，在85℃、100mWcm⁻²光照条件下连续运行1180小时后，仍能保持初始PCE的99%。本研究不仅证实了发展非合金化FAPbI₃（不含MA⁺、Cs⁺、Br⁻或SCN⁻等掺杂离子）对提升钙钛矿材料本征稳定性的重要作用，同时揭示了碘化学调控亚稳态钙钛矿及其他具有软离子晶格特性的光电材料的反应动力学路径的关键机制。这一发现为开发高效稳定的钙钛矿光电器件提供了新的理论指导和技术路径。

关键词 甲脒铅碘；非合金化；太阳能电池；碘分子

报告人简介：

北京大学材料科学与工程学院2022级博士生

人工光合氘化策略与机制研究

苏陈良*

深圳大学沧海校区致臻楼A-231, 深圳大学, 深圳市, 中国, 510860

*Email: chmsuc@szu.edu.cn (通讯作者电子邮件地址)

摘要正文: 由于氘同位素动力学效应, 代谢位点的氢被氘替代的药物往往能在保留原药代谢途径的情况下改变其吸收、分布、代谢和排泄特性, 从而降低给药剂量、提高用药安全性并取得更高临床获益。全球迄今已产生五款氘代新药上市, 数十款进入临床试验。我国《重大新药创制》接续性战略报告已将氘代药物开发技术列为推动我国新药发展的关键共性技术之一, 指出面临的关键挑战在于缺乏关键氘代试剂、氘代方法和催化剂。报告人聚焦药物精准氘标记的国家战略需求和前沿科学挑战, 借鉴光合作用“光反应裂解水释氢物种(还原型辅酶II, NADPH)协同酶催化用氢还原三碳酸”的机制, 提出“光反应”释氘协同原位“暗反应”用氘的人工光合氘代新策略, 并据此建立卤氘交换、碳氧键氘解、烯炔烃加氘系列精准氘代方法; 阐明氘资源分子活化热力学和动力学调控规律, 揭示催化位点活性氘形成及碳氘成键机制; 掌握数十种氘代药物或其关键中间体精准合成及规模制造关键技术, 获得抗肿瘤等氘代新药结构专利授权两项。研究成果为我国氘代新药产业发展提供了自主知识产权和核心氘代技术。

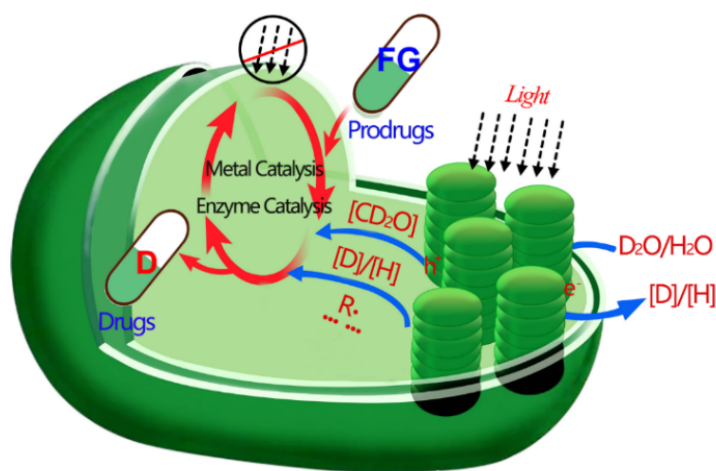


Fig. 1 Artificial Photosynthesis of Value-added Deuterated Chemicals

关键词: 重水分解; 多相光催化; 氘化化学

参考文献

- [1] Su, C. L.* *Nat. Commun.*, **2020**, 11, 4722.
- [2] Su, C. L.* *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2021**, 6357-6361.
- [3] Su, C. L.*, Ohno, T.*, Liu, B.*, *Nat. Chem.*, **2024**, 1250-1260.
- [4] Su, C. L.*etc. *Sci. Adv.*, 2024, ead15432.
- [5] Tao, Y. Liu, B.*; Su, C. L.*etc. *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, 18814-18825

报告人/墙报展示人简介:

苏陈良, 深圳大学特聘教授, 获教育部青年长江学者 (2020)、深圳市杰青 (2020)、鹏城学者 (2018)、广东省特支计划青年拔尖 (2017)、广东省自然



科学二等奖（2023，排序第一）、Nano Res.青年科学家奖（2022）、中国感光学会光拓奖（2025）等。主要从事人工光合氧化策略与机制研究。近五年以通讯作者在Nat. Chem.、Nat. Catal.、Nat. Nanotech.、Sci. Adv.、Nat. Commun.（5篇）、Angew. Chem. Int. Ed.（5篇）、Adv. Mater.（2篇）、Natl. Sci. Rev.、Sci. Bull.（4篇）、Chem. Soc. Rev.等期刊发表论文70余篇，获国家发明专利授权28项。担任Sci. Bull.期刊特邀编委，Nano. Res. Energy等期刊青年编辑。担任中国感光学会青年理事会副主任、光催化专委会副秘书长、可再生能源光催化专委会委员等。

合金表面氧化行为的微观机理和调控方法研究

谢雯

摘要正文： 氧化行为从本质上来说是氧化环境下反应表面或者界面发生的物质交换和原子运动现象的集中体现，结合第一性原理方法和热力学理论研究系统研究氧化过程中缺陷和偏析行为的起源及其影响动态氧化过程的规律有助于对合金氧化行为的定向调控。合金表面的氧化反应十分复杂，合金成分、表面结构、环境温度和压力、反应气氛等条件都能对氧化行为产生影响。氧化过程伴随着反应界面成分和结构的变化、缺陷的形成和转移。其中表面缺陷可以促进表面反应性，外表面的组成和结构变化可以动态地向亚表面区域甚至更深的原子层传播。这些现象深刻影响着合金的持续氧化行为。

理论辅助多孔性有机框架材料的分子设计与光电性能研究

刘从学*

北京大学深圳研究生院

摘要内容：共价有机框架（COFs）作为一种高度有序且具备分子可编程特性的多孔晶态材料，因其可调的化学功能性和优异的结构稳定性，在能源转换与储存领域展现出独特的应用潜力。本研究围绕理论计算方法，分别针对COFs的结构可设计性与功能调控开展了深入研究：在锂离子储能方面，通过静电势分析，在结构中引入吡啶鎓磺基甜菜碱基团，实现了COF纳米片的自剥离组装，有效构建了连续的锂离子迁移通道，室温离子电导率达 $10^{-4} \text{ S} \cdot \text{cm}^{-1}$ ，且在宽电化学窗口内展现出优异的电化学稳定性与锂金属界面兼容性，优于传统聚合物基电解质；在光催化领域，基于菲咯咪唑单元设计的共轭COF，通过对激发态分析，调控其 π 共轭网络与D-A分布，提升了可见光吸收与电荷分离效率，实现了高效的光催化析氢（产氢速率达到 7.4 mmol/g/h ），并在循环测试中保持稳定的催化活性。该研究从分子层面揭示了COFs结构调控对性能优化的关键作用，展示了COFs作为新一代多功能能源材料的广阔前景，为推动能源转换与储存技术的发展提供了新的设计理念与研究范式。

关键词：共价有机框架；量子化学计算，锂离子电导；光催化析氢

量子点中离域激子的动力学与应用

张志龙^{1,*}

¹华南理工大学 前沿软物质学院 华南软物质科学与技术高等研究院, 广州, 510640

*Email: zzhang@scut.edu.cn

量子点是一类具量子限域效应的半导体纳米晶体。当量子点受到光激发时,会产生库仑束缚的电子-空穴对,即激子。由于量子点的空间尺寸小于其材料的激子玻尔半径,理论上激子的波函数会被限域在颗粒中,即局域的Frenkel激子,其限域的程度也随着量子点尺寸缩小而增加;量子点也因此根据颗粒尺寸与激子玻尔半径的差距,分为强、中、弱限域。以上理论在当单个量子点处于绝对真空,或分散在溶液、以及高分子固态载体等能量壁垒高的环境中成立。然而,在许多实际应用中,量子点都被组装形成纳米-微米级别的固体薄膜。与单个量子点相比,由于量子点之间的距离缩小到纳米级别甚至更短,受激发量子点的激子波函数可以泄露到附近量子点中,发生离域现象,形成Wannier激子。相对于局域激子,离域激子更容易在量子点薄膜中移动传输,并具有更加复杂的动力学行为。由于对其表征探测的方法相对缺乏,量子点中的激子动力学尚有许多未被阐明之处。

本次汇报将介绍利用飞秒瞬态吸收显微成像技术观测量子点薄膜中激子生成初期的动力学。我们发现激子在生成初期的扩散系数可以达到 $10^2 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ 级别,较此前其他表征方法所获得的数值高3-5个数量级。通过一系列分析后,我们发现该超快扩散源自于激子在生成初期的高度离域,持续时间仅为百飞秒-数皮秒,且该现象只在激子玻尔半径较大的材料体系中出现。本次汇报还将介绍课题组近期在激子离域现象与应用的探究进展,包括调控量子点激子玻尔半径的策略、其对激子能量转移、光谱转换、光电器件界面载流子传输等方面的影响。

关键词: 量子点; 激子; 能量转移; 瞬态光谱

参考文献

- [1] Zhilong Zhang; Jooyoung Sung*; Daniel T W Toolan; Sanyang Han; Raj Pandya; Michael P. Weir; James Xiao; Simon Dowland; Jiachen Liu; Anthony J. Ryan; Richard A L Jones; Shujuan Huang; Akshay Rao*; Ultrafast exciton transport at early times in quantum dot solids, *Nature Materials*, **2022**, **21**, 5: 533-539
- [2] Mengxia Liu; Sachin Dev Verma; Zhilong Zhang; Jooyoung Sung*; and Akshay Rao*; Nonequilibrium Carrier Transport in Quantum Dot Heterostructures, *Nano Letters*, **2021**, **21**, 21, 8945-8951
- [3] Naomi S. Ginsberg*; William A. Tisdale*; Busting through quantum dot barriers. *Nature Materials*, **2022**, **21**, 497-499

报告人/墙报展示人简介：

张志龙，华南理工大学教授、博士生导师。分别在澳大利亚国立大学、新南威尔士大学获得学士与博士学位，于英国剑桥大学卡文迪许实验室开展博士后工作、期间入选欧盟玛丽·居里学者。2022年加入华南理工大学前沿软物质学院并建立独立课题组。长期致力于半导体量子点的激子动力学、能量转移、超快瞬态光谱与显微成像、光电器件性能优化等方面研究。近年来已发表SCI论文40余篇，包括以第一或通讯作者在Nat. Mater., Adv. Mater., Adv. Energy Mater.等知名期刊上发表文章多篇。主持国家自然科学基金面上、外国学者项目、国家外专局、欧盟玛丽·居里基金等项目，入选广东省珠江人才计划。兼任中国科协、广东省科协海智计划特聘专家。



金属卤化物的压力诱导发光

张龙^{1,*}, 王永刚¹

¹材料科学与工程学院, 北京大学, 北京, 100871

*Email: zhangl@pku.edu.cn

近十年来, 金属卤化物材料在太阳能电池和发光二极管方面显示出了巨大的潜力, 并取得了前所未有的进展。压力工程作为一种有效的技术可以系统地调控功能材料的电子结构和物理化学性质。由于金属卤素钙钛矿具有成分多样性和软的晶格的特征, 施加外部压力可大幅度地调整其结构和性质。高压工程已经对这类材料的结构-性质关系开展了深入的探索, 极大地促进了此类材料的进一步发展。从多个角度出发, 我们着重研究了压力对金属卤化物结构和光电性质的影响, 发现了许多压力诱导的新性质, 包括压力诱导发光 (PIE)、压致变色、自陷态激子的三重-单重态转换, 半导体-金属转变等, 同时也探讨了在其高压研究中仍然存在的局限性和困境。高压工程不仅在原子级水平上精修晶体结构来阐述其内在的结构-性质关系, 而且能够发现许多新颖的或改善的光电性质, 这为设计新型多功能金属卤化物材料提供了一条有前景的路径。

关键词: 高压; 金属卤化物; 光电性质

参考文献

- [1] Zhang, L.; Li, S.; Sun, H. et al. Manipulating Lone-Pair-Driven Luminescence in 0D Tin Halides by Pressure-Tuned Stereochemical Activity from Static to Dynamic. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, *62*, e202311912.
- [2] Zhang, L.; Li, S.; Sun, H. al. Revealing the Mechanism of Pressure-Induced Emission in Layered Silver-Bismuth Double Perovskites. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, *62*, e202301573.
- [3] Zhang, L.; Liu, C.; Wang, L. et al. Pressure-Induced Emission Enhancement, Band-Gap Narrowing, and Metallization of Halide Perovskite Cs₃Bi₂I₉. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 11213.