



中国材料大会 2024

暨第二届世界材料大会

CMC 2024 & WMC 2024

July 8-11, 2024

Guangzhou, China

D21-多尺度结晶光电材料及器件

**D21-Multiscale Crystalline Electric
and Optical Materials and Devices**

Organized by

Chinese Materials Research Society

Website: <https://cmc2024.scimeeting.cn>

D21. 多尺度结晶光电材料及器件

分会主席：薛冬峰、陈昆峰、刘军、梁风

D21-01

新型光电材料多尺度多自由度研究

薛冬峰*¹、陈昆峰²、刘军³

1. 电子科技大学（深圳）高等研究院
2. 山东大学新一代半导体材料研究院
3. 华南理工大学材料科学与工程学院

材料一般是指人类用来制造机器、构件、器件和其他产品的物质^[1]。材料学科植根于金属学、矿物学和晶体学，同时结合了化学、物理和一些工程学科，形成了现代材料科学体系^[1]。在实际应用中，功能材料主要是利用物质的物理、化学性质或生物现象等对外界变化产生的不同反应而制成的一类材料^[1,2]。光电材料的制备与表征过程的物理化学本质是其系统涉及的多尺度科学问题，光电材料的功能提升本质是其体系涉及的多自由度耦合优化^[3]。本报告以大尺寸氟酸锂和钇铝石榴石单晶体、电化学储能电极材料、有机无机杂化钙钛矿团簇材料等研究进展为例，探索新型光电材料多尺度多自由度的研究策略。

致谢：本研究得到了深圳市科技计划的资助（SGDX20230116092051001）。This work was also supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 52220105010).

参考文献：

1. 何维，材料革命是发展新质生产力的源动力，前进论坛，2024，1，43-64.
2. Dongfeng Xue, Hongjie Zhang, A Special Issue on Design and Engineering of Novel Functional Materials, Reviews in Advanced Sciences and Engineering, 2012, 1, 163-164.
3. Feng Liu, Kunfeng Chen, Dongfeng Xue. How to fast grow large-size crystals. The Innovation, 2023, 4, 100458.

D21-02

富表面羟基二氧化钛设计及光催化海水产氢性能研究

阳晓宇*

武汉理工大学，材料复合新技术国家重点实验室

光催化海水产氢是一项使用光催化剂利用太阳能分解海水获取氢能的绿色技术。然而海水的高盐度会导致光催化剂在使用中快速失活，极大地限制了该技术的实际应用。二氧化钛（TiO₂）因其高稳定性的优势，是目前在光催化产氢中应用最广泛的半导体材料之一。然而二氧化钛本身较低的载流子分离传输效率以及海水产氢过程中无机盐在材料表面的沉积会严重制约其活性与稳定性。

富表面羟基结构的设计可以提高二氧化钛表面的亲水性，增强二氧化钛表面对氢离子对吸附位点的竞争从而显著降低钙离子、镁离子等在表面的吸附，最终抑制产氢过程中无机盐在表面的沉积。同时表面羟基还可以提高二氧化钛光生载流子的分离传输效率，增强二氧化钛的光催化性能。本论文通过控制二氧化钛前驱体的煅烧温度，调控水分子在二氧化钛表面裂解形成表面羟基，从而实现二氧化钛富表面羟基结构的设计，并揭示了表面富羟基结构对光催化海水产氢性能的影响机制。

(1) 通过煅烧温度控制实现了纳米二氧化钛中富表面羟基结构的设计。通过二维核磁氢谱（¹H TQ-SQ MAS NMR）、傅里叶变换红外光谱（FT-IR）和 X 射线光电子能谱（XPS）等表征手段证明了二氧化钛中表面羟基的存在，然后通过透射电子显微镜（TEM）和氮气吸附/脱附测试等表征手段研究了煅烧温度对纳米二氧化钛微纳结构的影响。并进一步通过光催化海水产氢性能测试证明了富表面羟基结构对二氧化钛性

能的显著提升作用。例如，富表面羟基纳米二氧化钛在人工海水中展现出较高的光催化产氢性能 ($9.8 \text{ mmol}\cdot\text{g}^{-1}\text{h}^{-1}$)，2 倍于低表面羟基含量的纳米二氧化钛，并且经过 15 h 稳定性测试后其光催化海水产氢活性仍然保持 95% 以上。

(2) 通过调控介晶二氧化钛前驱体的煅烧温度，实现了介晶二氧化钛中富表面羟基结构的设计。通过 FT-IR 和 XPS 等表征手段证明了表面羟基的存在，通过 TEM 和氮气吸附/脱附测试等表征手段证明了介晶结构的形成，光催化性能测试结果表明，富表面羟基介晶二氧化钛在人工海水中展现出较高的光催化产氢性能 ($25.8 \text{ mmol}\cdot\text{g}^{-1}\text{h}^{-1}$)，5.7 倍于商业纳米二氧化钛，并且经过 30 h 稳定性测试后光催化海水产氢活性仍然保持 95% 以上。

(3) 使用形貌调控与纳米复合的方法对富表面羟基二氧化钛进行改性，实现了中空二氧化钛限域氧化亚铜异质结 (H-TiO₂/Cu₂O) 的设计。通过 NMR 和 XPS 等表征手段证明了富表面羟基的存在，通过 TEM 和氮气吸附/脱附测试等表征手段证明了氧化亚铜纳米颗粒限域在中空结构二氧化钛的介孔壳层中。通过光/光电性能测试证明了二氧化钛和氧化亚铜形成的异质结构对其性能具有显著的提升作用，进一步揭示了载流子自 n 型二氧化钛向 p 型氧化亚铜的高效传输机制。H-TiO₂/Cu₂O 在人工海水中展现出较高的光催化产氢性能 ($32.6 \text{ mmol}\cdot\text{g}^{-1}\text{h}^{-1}$) 并且经过 30 h 循环稳定性测试后活性未下降。

(4) 参照二氧化钛中富表面羟基结构设计原则和方法，实现了非氧化物光催化剂 (氮化碳) 富表面羟基结构的设计。使用三聚氰胺与氯化铵的混合物一步煅烧得到同时具有氮空位与富表面羟基的多孔氮化碳材料 (VN-HCN-OH)。通过 TEM、XPS、EPR 和 FT-IR 等表征手段证明了 VN-HCN-OH 中多孔结构、表面羟基及氮空位的形成。实验结果表明，VN-HCN-OH 展现了较高的光催化海水产氢性能 ($8.7 \text{ mmol}\cdot\text{g}^{-1}\text{h}^{-1}$)，是块状氮化碳 (BCN) 的 3.9 倍，并且在海水中表现出明显优于 BCN 的稳定性。

综上所述，通过对光催化剂表面羟基结构的调控以及孔道结构的设计显著提高了其光催化海水产氢的活性与稳定性，为开发高性能海水产氢光催化剂提供了一种新的策略。

D21-03

基于原子排列调控构筑高效催化材料

王安良*

山东大学

发新型高效、稳定和低成本的电催化材料，对于实现可再生能源的高效存储与转化至关重要。以往大部分研究集中在对具有常规晶体结构的催化材料的组成、几何结构等方面进行调控，从而实现催化性能的有效提升。然而催化材料的原子排列，作为影响催化性能的重要因素，对催化性能的影响规律以及调控机制等方面仍不清楚。另外，受热力学和动力学因素等影响，材料形成过程中原子排列倾向于常规晶体结构，对催化材料原子排列调控难度较大。针对以上问题，报告人发展了成功构筑了非晶相、非常规晶相和金属间化合物催化材料，实现了对催化材料原子排列的调控，有效提升了其催化性能，并阐明了原子排列对催化性能的影响规律和调控机制 1-4。

参考文献

[1] X Zhu, C Ma, Y-C Wang, K Qu, L Song, J Wang, Y Gong, X Liu, J Zhang*, Q Lu*, A-L Wang*, *Energy Environ. Sci.* 2024, DOI: 10.1039/D4EE00715H

[2] Y Zhang, C Ma, X Zhu, K Qu, P Shi, L Song, J Wang, Q Lu*, A-L Wang*, *Adv Energy Mater.* 2023, 13, 2301492.

[3] K Qu, X Zhu, Y Zhang, L Song, J Wang, Y Gong, X Liu, *Small* 2024, 2401327

[4] H Zhang, P Shi, X Ma, C Ma, S Han, C He, H Wu, L Zhu, B Zhang, Y Lu, W Cao, H Yin, X Meng, J Xia, J Zhang*, A-L Wang*, Q Lu*, *Adv Energy Mater.* 2023, 13, 2202703.

D21-04**基于 Au₁Ag_x/Al₄B₂O₉ 的光 plasma 效应及对水体含 N 基团污染物的去除性能研究**

王玮璐*、巩辰阳

重庆工商大学

贵金属纳米催化剂由于其独特的理化性质，在各类污染物的转化和去除领域备受关注。其中，AuAg 纳米材料因其特殊的局域表面等离子体共振（Localized Surface Plasmon Resonance, LSPR）效应所带来的良好光催化活性受到了广泛关注，然而催化过程中的构效关系仍存在巨大争议。

为此，本团队将 AuAg 纳米胶体负载于 Al₄B₂O₉ 上，测试了光照以及避光条件下 Au_xAg_{1-x}/Al₄B₂O₉ 对水系含 N 基团污染物的催化活性差异。结果表明，Au_{0.75}Ag_{0.25}/Al₄B₂O₉ 显示出最优性能，在其 LSPR 吸收波长范围内的光照射下可以有效的提升 4-NP 催化还原活性，光照条件下反应速率常数为避光条件下的 2.06 倍。然而却在罗丹明 B、亚甲基蓝和甲基橙的还原脱色反应中的催化活性存在明显差异。进一步设计了控制实验以探究在 Au_xAg_{1-x}/Al₄B₂O₉ 主导的光 LSPR 体系中热效应与非热效应对催化反应的贡献。

D21-05**二维镍基材料的合成设计与电解水反应研究**张睿谦¹、钱彬彬¹、陈昆峰³、薛冬峰*²

1. 中科院深圳先进技术研究院
2. 电子科技大学（深圳）高等研究院
3. 山东大学新一代半导体材料研究院 晶体材料国家重点实验室

层状材料因其独特的结构特性和高度可调的性能而成为电催化剂的焦点。合理设计和构建具有优异活性和耐久性的电催化剂是未来能源发展的关键问题。界面工程作为一种新兴技术，能够优化电催化剂表面对反应中间体的吸附能，已被证明是提高电催化剂性能有效策略。本文通过界面工程对镍基材料的电子结构进行重构，优化多相传输通道，提高催化活性。工作表明，在镍铁双层氢氧化物（NiFe LDH）的表面构筑普鲁士蓝类似物（PBA）异质界面，能够显著增强 NiFe LDH 在氧析出反应（OER）过程中的重建现象。重建后的 NiFe LDH 具有优化的表面化学组成、电子结构以及丰富的活性位点，在 OER 上具有显著优势。此外，通过界面工程对层状材料硫化镍进行了钼掺杂和稀土元素修饰。得益于优化的电子结构配置和丰富的异质界面，所制备的电极在氢析出反应（HER）和氧析出反应（OER）上表现出优异的催化活性。本研究表明界面工程为先进催化材料的制备提供了新策略。

D21-06**仿粘土层状材料的设计、制备及其电化学析氧性能研究**钱彬彬^{1,2}、陈昆峰³、徐珂^{1,2}、张睿谦¹、薛冬峰*²

1. 中国科学院深圳先进技术研究院，深圳市南山区西丽深圳大学城学苑大道 1068 号，邮编：518055
2. 电子科技大学（深圳）高等研究院，广东省深圳市龙华区观澜街道银星智界二期，邮编：518000
3. 山东大学晶体材料国家重点实验室新一代半导体材料研究院，济南山大南路 27 号，邮编：250100

探索用于电化学析氧反应（OER）的高效、经济和耐用的电催化剂对于电解水制氢的大规模应用至关重要。类粘土结构的层状金属氢氧化物的结构可调性（金属/非金属阳离子、配位阴离子、层间离子/分子、丰富的表界面位点、缺陷等）赋予其丰富的设计和改性策略。我们仿照粘土矿物的层状框架进行结构设计，采用简单的水热法制备了一系列仿粘土金属铬酸盐氢氧化物纳米片 $\text{Co}_x\text{M}_{3-x}\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$ ($\text{M}=\text{Fe}, \text{Ni}, \text{Cu}, \text{Zn}$)。 $\text{Co}_{2.6}\text{Fe}_{0.4}\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$ 显示出最佳的 OER 活性（在 10 mA cm^{-2} 电流密度下的过电位为 270 mV），并优于商业 RuO_2 和大多数 Co、Ni 基化合物。此外， $\text{Co}_{2.6}\text{Fe}_{0.4}\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$ 在氧化电位下表现出良好的化学稳定性，这一工作为进一步开发活性层状金属氢氧化物催化剂提供了科学指导。

D21-07**高比能金属锂二次电池材料与器件**

刘军*

华南理工大学

金属锂二次电池具有原料来源广泛和能量密度高的优点，已经成为最具潜力的新一代储能器件^[1]。我们以金属锂二次电池为主要研究体系，重点针对金属负极的枝晶和体积形变大问题，多电子转化反应正极材料的导电性差和活性物质溶解问题，无机固态电解质的离子导电性差和界面阻抗大等关键科学问题，开展了高性能合金化反应金属负极、高容量单质硫及硫化物正极、新型固态电解质材料及隔膜材料开发及全电池器件的系统研究工作^[2-5]。系统研究了硫正极的氧化还原动力学，率先提出了表征硫正极材料催化活性的“d-p”耦合模型，建立了硫正极相关物理参数与电化学性能的关系，指导载体催化材料设计^[6,7]；针对高镍三元正极，跨尺度构制界面导向的离子快速通道，并基于低共熔界面相制备单晶，解决了离子扩散动力学缓慢和高电压服役颗粒破碎难题，实现了材料高倍率和低应变^[8,9]。在正负极材料研究工作基础上，基于新型电解质材料的开发，通过电池材料组成与结构的协同优化，批量可控制备高性能金属锂二次电池正极、负极材料，实现 Ah 级软包金属锂电池验证^[10-12]。

参考文献/Reference:

- [1] Z. Liang, J. Shen, X. Xu, F. Li, J. Liu, B. Yuan, Y. Yu, M. Zhu, *Adv. Mater.* 2022, 34, 2200102.
- [2] Z. Sun, J. Zhao, M. Zhu, J. Liu, *Adv. Energy Mater.* 2023, 14, 2303498.
- [3] S. Zou, Y. Yang, J. Wang, X. Zhou, X. Wan, M. Zhu, J. Liu, *Energy Environ. Sci.* 2024, 10.1039/D4EE00822G.
- [4] Y. Yang, S. Yao, Z. Liang, Y. Wen, B. Liu, Y. Wu, J. Liu, M. Zhu, *ACS Energy Lett.* 2022, 7, 2, 885.
- [5] Y. Yang, S. Yao, Y. Wu, J. Ding, Z. Liang, F. Li, M. Zhu, J. Liu, *Nano Lett.* 2023, 23, 5061.
- [6] Z. Wang, J. Shen, J. Liu, X. Xu, R. Hu, J. Liu, Z. Shi, L. Ouyang, Y. Yu, M. Zhu, *Adv. Mater.* 2019, 31, 1902228.
- [7] J. Shen, X. Xu, J. Liu, Z. Wang, S. Zuo, Z. Liu, D. Zhang, J. Liu, M. Zhu, *Adv. Energy Mater.* 2021, 15, 2100673.
- [8] Z. Sun, F. Li, J. Ding, Z. Lin, M. Xu, M. Zhu, J. Liu, *ACS Energy Lett.* 2023, 8, 2478.
- [9] F. Li, Z. Liu, C. Liao, X. Xu, M. Zhu, J. Liu, *ACS Energy Lett.* 2023, 8, 11, 4903
- [10] D. Zhang, Y. Liu, Z. Sun, Z. Liu, X. Xu, L. Xi, S. Ji, M. Zhu, J. Liu, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2023, 62, e20231006.
- [11] Z. Zhao, X. Zhou, B. Zhang, F. Huang, Y. Wang, Z. Ma, J. Liu, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2023, 62, e202308738.
- [12] W. Liang, X. Zhou, B. Zhang, Z. Zhao, X. Song, K. Chen, L. Wang, Z. Ma, J. Liu, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2024, 63, e202320149.

D21-08**钠离子电池硬碳负极材料关键技术开发**

李雪

昆明理工大学锂离子电池及材料制备技术国家地方联合工程研究中心，昆明理工大学冶金与能源工程学院，650093

具有成本优势的钠离子电池被认为是锂离子电池的有益补充，而电极材料的性能是决定钠离子电池能否实现大规模应用的关键因素之一。硬碳是钠离子电池唯一商业化使用的负极材料，但其产业化工艺还不成熟，成为制约钠离子电池产业化应用的关键瓶颈所在。因此，本工作从产业化瓶颈---高成本和低安全性出发，开发了一系列不同类型碳负极的设计思路及其实用化进展，包括高容量的生物质基硬碳 (350 mAh/g)，量产化的沥青基硬碳 (10 吨/年) 和低成本 (<1 万/吨)，高安全性的煤基硬碳等完善的工艺和产业链技术。

实现了从打造成本优势到延展性能优势，从基础原理认知突破到关键工程技术创新，对钠离子电池硬碳负极材料的发展具有重要的指导意义。

D21-09

Organic Solar Cell Materials, Devices, and Applications

Tao Liu*, Linji Yang, Ciyuan Huang
Guangxi University

Organic solar cells (OSCs) not only represent a promising next-generation photovoltaic technology but also offer the opportunity to fabricate low-cost green photocatalytic/adsorbent materials for water treatment using their active layers. In recent years, my research has focused on addressing the challenges in effectively engineering the ideal morphology of the active layer in OSCs from molecular and device engineering perspectives to enhance device efficiency and stability, as well as to expand the application of OSC active layers in water pollution control. References [1-9] highlight achievements including achieving device efficiencies of 16.33% and 17.36% in high-humidity air environments/glove boxes, which were among the best records at the time for device fabrication in air and non-halogenated solvent environments. Additionally, the first fully polymer-based devices constructed using polymers derived from isomeric copolymers achieved efficiencies exceeding 15% and demonstrated excellent stability. By integrating high-quality interpenetrating network fiber-like structures of OSC active layers with biomass resources from Guangxi, low-cost recyclable photocatalysts/adsorbents were prepared. These materials effectively degraded high-concentration lignin pollutants in papermaking wastewater, maintaining high efficiency and stability over 100 repeated experiments, while rapidly and efficiently removing various heavy metal ions from wastewater with consistent efficiency over 10 repeated experiments.

D21-10

多尺度铋基负极材料结构设计及其宽温域储钠性能

许希军*
广东工业大学

钠离子电池因其原材料资源丰富、成本低等特点，有望成为锂离子电池的有效补充。[1,2] 目前商用的石墨负极并不适用于钠离子电池，开发低成本、高容量和长循环寿命的负极材料是钠离子电池产业化亟待解决的问题。铋具有较高的储钠比容量(385 mAh g^{-1} , 3800 mAh L^{-1})、丰富的储量和合适的工作电位等优点，而被认为是最具前景的负极材料。[3] 然而，铋负极在循环过程中体积应变大，会导致电极结构破碎、界面稳定性差和容量衰减快等问题。[3] 基于此，我们设计了三类多尺度电极材料：(1) 采用模板法结合包覆的方法，构筑形貌规整的 Bi@C 微球材料。[4] 通过聚多巴胺包覆热解形成氮掺杂碳外壳提升了材料整体导电性，抑制活性铋纳米颗粒的团聚，缓冲充放电过程中产生的应力。(2) 发展了水浴沉积结合原位多巴胺包覆退火制备 Bi@C 纳米阵列的方法，独特的纳米阵列结构有利于电解液浸润，离子和电子的传输，缓冲充放电过程中的体积膨胀。[5] Bi@C 纳米阵列 0°C 下的比容量为 327.5 mAh g^{-1} (为室温的 94.3%)，即使在 2 A g^{-1} 的大电流下循环仍保持有 300.3 mAh g^{-1} 的比容量。(3) 设计了一种以金属有机化合物为自模板和反应物，制备了原位碳包覆 Bi@C 负极材料。[6] 有机配体在惰性气氛中碳化原位封装活性颗粒，使得这些材料具有良好的电子导电性，多孔/空心的微结构，离子/电子的快速传输。这些工作为制备过金属化合物材料提供了简单而合理的结构设计和原位碳包覆方法。

参考文献：

- [1] X. Xu, J. Liu*, J. Liu, L. Ouyang, R. Hu*, H. Wang, L. Yang, M. Zhu, *Adv. Funct. Mater.* 2018, 28, 1707573.
- [2] X. Xu, F. Li, D. Zhang, Z. Liu, S. Zuo, Z. Zeng, J. Liu*, *Adv. Sci.* 2022, 9, 2200247.
- [3] Y. Wang, X. Xu*, F. Li, S. Ji, J. Zhao*, J. Liu*, Y. Huo*, *Batteries* 2023, 9, 440.

[4] X. Xu, D. Zhang, Z. Wang, S. Zuo, J. Shen, Z. Liu, J. Liu*, Acta Metallurgica Sinica (English Letters) 2021, 34, 347-353.

[5] Y. Wang, X. Xu*, Y. Wu, F. Li, W. Fan, Y. Wu, S. Ji, J. Zhao*, J. Liu*, Y. Huo*, Adv. Energy Mater., 2024, 2401833.

[6] X. Xu, Z. Wang, D. Zhang, S. Zuo, J. Liu*, M. Zhu, ACS Appl. Mater. Interfaces 2020, 12, 51478-51487.

D21-11

面向致密储能的碳孔道设计与构筑

夏开胜*

中国地质大学（武汉）

开发具有高体积能量密度的碳基致密储能材料，对推动储能器件的实用化进程至关重要。孔道结构、孔道环境等因素显著影响碳电极材料的致密储能特性。基于此，合理设计调控碳材料的孔道工程，将有助于获得兼具高质量、高体积电容性能的碳电极材料。本报告主要包括：（1）基于分级多孔的孔道设计思想，来提升碳电极材料的储能密度；（2）基于碳孔道表面的掺杂设计思想，提升碳电极材料的孔道利用效率和超电容性能；（3）提出了一种基于生物聚多糖的分子活化与原位掺杂技术，解决了超限域碳孔道利用效率低的难题，其体积储能特性显著优于现有国内外报道水平。

D21-12

一维结构固态电解质的构筑及其在金属锂电池中的应用

刘美男¹、郑宇廷²、王宇琛²

1. 广西大学

2. 中国科学院苏州纳米技术与纳米仿生研究所

锂金属具有较高的理论容量(3860mAh g⁻¹)和较低的电极电位(相比标准氢电极是-3.04 V)，是当今高能量密度可充电电池的理想负极。然而，易燃的液态电解质的潜在安全隐患一定程度上阻碍了锂金属电池的进一步发展，固态电解质因具有高安全性、高能量密度、低成本、尺寸和大小可塑性强等优点，受到了研究者的广泛关注。聚合物基固态电解质具有柔韧性和可加工性，但通常离子电导率较低。无机固态电解质具有高机械强度和高离子电导率，但界面接触性较差。因此，如何构筑兼顾聚合物以及无机固态电解质性能的全新电解质是当今研究的热点。

一维阵列结构由于其空间限域效应大大缩短了离子在正负极间的输运路径，展示出其在固态电解质中的优势。基于此，受自然界冰晶生长的启发，我们采用冷冻流延结合相转化过程制备出 PVDF-HFP 基系列一维阵列结构膜。利用阵列通道的空间限域效应，加速通道内部凝胶态、固态电解质中的锂离子快速在正负极将迁移，有效改善了由于离子输运动力学缓慢造成的金属锂枝晶问题，很好的延长了金属锂负极的循环寿命。再次基础上，本研究团队通过设计管壁官能团、无机填料来调控管道内部锂离子的溶剂化配位环境，诱导形成聚离子体模式的溶剂化结构，进一步提升了锂离子的输运动力学，有效实现了固态金属锂电池在高倍率、低温环境下的正常工作，如 Li/LFP 全电池在 2C 倍率下可以循环 600 圈，并且在 5C 的倍率测试下仍有 100 mAh g⁻¹ 以上的放电比容量；Li/NCM811 全电池在室温 3C 的倍率下循环容量保持率达 82%，4C 下循环 50 圈容量保持率达 82%，即使在 -20°C 的低温下仍以 0.1C 的倍率循环 100 圈，容量保持率达 81.5%。这些结果表明微观形貌与分子结构的合理设计将助力固态金属锂电池向实用化方向快速发展。

D21-13

上转换纳米颗粒在染料敏化太阳能电池中的应用

王丽*

河南大学

Dye-sensitized solar cells (DSSCs) have attracted wide attention due to their abundant raw materials, low

cost and simple preparation process. At present, DSSCs devices have achieved power conversion efficiency (PCE) of up to 14.3%, but the N719 dye-based DSSCs only obtained the PCEs of about 11.5%, far below the minimum value of 15% required for commercial applications. The main reasons for this phenomenon are small specific surface area, poor electron transport performance, and narrow response range of the sensitizer loaded on the photoanode to the solar spectrum, which greatly limits its large-scale application. To solve these problems, we proposed two main solutions. Firstly, the design of functionalized TiO_2 nanomaterials, such as TiO_2 hollow spheres (TiO_2 -HSs) and peanut-like TiO_2 (PN TiO_2) significantly increased the specific surface area of photoanode materials and improved the electron transport performance on the photoanode. Secondly, upconversion nanoparticles (UCNPs) and Au nanoparticles (AuNPs) were introduced into the photoanode of DSSCs. A multifunctional composite photoanode containing TiO_2 hollow spheres (TiO_2 -HSS), AuNPs and a novel $\text{NaYF}_4:\text{Yb,Er}@/\text{NaLuF}_4:\text{Eu}@/\text{SiO}_2$ ($\text{Er}@/\text{Eu}@/\text{SiO}_2$) UCNPs was proposed. AuNPs were grown in situ on photoanode films containing TiO_2 -HSs and UCNPs by a simple plasma treatment. The DSSC based on the multifunctional composite photoanode achieved a photoconversion efficiency of 14.13%, which is the highest record for DSSCs based on N719 dyes. It is worth noting that after 180 h of steady-state test, the efficiency of the champion battery still maintained 95.33%, showing good equipment stability. This work provides a simple, economical and effective strategy for preparing multifunctional composite photoanodes, which is expected to realize potential application value in the field of solar cells.

D21-14

固态电池界面的电化学-力学失效

熊仕昭*

昆明理工大学

以固态电解质和锂 (Li) 金属负极为核心组件的固态电池具有高能量密度和高安全性的特点, 具有广阔的应用前景。然而, 固态锂金属电池目前在实际条件下的最大电流密度通常低于 0.5 mA cm^{-2} , 远低于交通运输行业动力电池的要求 (高于 4 mA cm^{-2}), 严重阻碍其高功率场景的应用。固态锂金属电池一旦在高于临界电流密度(CCD)的条件下运行, 将不可避免得引发内部短路和电池失效。研究认为, 这种内部短路是由锂枝晶在固态电解质中的生长和扩展造成的, 这种生长会导致固态电解质力学失效直至连通正负极。理解这一失效机理是开发设计新型材料和界面, 实现固态电池产业化的关键, 然而采用常规实验方法难以获取固态电解质内部的应力、位移和电场。

针对这一问题, 作者研究了固态电解质内部锂细丝生长、界面缺陷和内部缺陷/界面缺陷协同作用对固态电解质电化学-力学失效的影响机制, 取得系列进展。(i) 采用多物理场模拟方法建立了电化学-力学耦合模型, 对固态电解质内部锂细丝生长引起的失效过程进行了系统研究, 通过应力场动态演变、局部位移和相对损伤的可视化, 揭示了裂纹形成及其在固态电解质内扩展过程[1]。(ii) 揭示了金属锂在界面缺陷处沉积引发固态电解质失效的机理。纵横比作为缺陷研究的关键几何参数对电解质失效过程具有显著影响, 在低纵横比为 0.2~0.5 三棱锥界面缺陷附近显示出损伤的分支区域, 可能导致固态电解质的表面粉化, 而当界面缺陷的纵横比超过 3.0 时, 将引发体电解质本体中的损伤累积[2]。(iii) 对比研究了界面缺陷和内部缺陷协同效应对固态电解质的力学失效和金属锂电化学沉积过程的影响, 重点阐述了缺陷尺寸和几何构型对形成协同效应的作用机制[3]。

[1] Adv. Mater. 2022, 34, 2207232

[2] Adv. Mater. 2023, 2301152

[3] Adv. Energy Mater. 2023, 13, 2203614

D21-15

Based on β - $\text{NaYF}_4:\text{Yb,Er}@/\text{NaGdF}_4$ Composite photoanode of Nd UCNPs and TiO_2 HSs to enhance the photoelectric performance of DSSCs

Ye Xiong*
Henan University

In recent decades, dye sensitized solar cells (DSSCs) have received widespread attention due to their advantages of low cost, simple preparation process, and considerable efficiency. According to reports, DSSCs devices using heavy metal complexes as photosensitizers have achieved over 11% photoelectric conversion efficiency (PCE), and DSSCs based on the synergistic effect of two non-metallic organic sensitizers have achieved an efficiency of up to 14.3%. However, the efficiency of current experimental measurements is still far below the Shockley Queisser (SQ) efficiency limit of about 30%. The main reason for this significant difference is the inability to effectively utilize the infrared and near-infrared (NIR) light that occupies nearly half of the solar radiation, resulting in so-called transmission losses and greatly limiting the efficiency improvement of DSSCs. To address this issue, introducing UCNPs onto the photoanode loaded with photosensitizers is an effective solution, as UCNPs can convert NIR light into UV visible light, thereby expanding the light absorption range of photosensitizers to the near-infrared region, which helps to develop DSSCs devices that fully utilize near-infrared light. We prepared a core-shell structure of NaYF₄: Yb using a simple solvent thermal synthesis method, Er@NaGdF₄ Nd UCNPs were doped into the photoanode material along with TiO₂ HSs. In this way, UCNPs can expand the absorption range of the composite photoanode, while TiO₂ HSs can enhance the light scattering ability of the composite photoanode. Among them, the photoelectric conversion efficiency of the DSSC device containing P25: TiO₂ HSs: UCNPs is 8.17%, which is 17.22% higher than the DSSC of the P25: TiO₂ HSs composite film without UCNPs, and 59.26% higher than the DSSC of the pure P25 film. This improvement can be attributed to the synergistic effect between UCNPs and TiO₂ HSs.

D21-16

Upconversion photoluminescence enhancement by Gd-doped NaYF₄:Yb,Er@SiO₂ nanoparticles and their application in dye-sensitized solar cells

Shuaiqi Hu*

School of Chemistry and Molecular Science, Henan University

Ever since the groundbreaking work in 1991, dye-sensitized solar cells (DSSCs) have received considerable attention owing to their low fabrication cost, simple preparation procedure, and high photovoltaic performance. During the past 30 years, numerous studies have been focused on the enhancement of power conversion efficiencies (PCEs) in DSSCs devices so as to meet the requirements of the minimum threshold (15%) for commercial application. It is reported that the DSSCs using metal complexes as sensitizers have realized the PCEs of exceeding 11%, and more encouragingly a record high PCE of 14.3% has been obtained in a DSSC based on metal-free organic dyes under one sun illumination.

Introducing upconversion nanoparticles (UCNPs) onto photoanode films is an effective way to enhance the photovoltaic performance of dye-sensitized solar cells (DSSCs). In this contribution, the β -NaYGdF₄:Yb, Er UCNPs and β -NaYGdF₄:Yb,Er@SiO₂ nanoparticles (NPs) were prepared by tuning the dopant contents of the Gd ions and the β -NaYGdF₄:Yb,Er@SiO₂ NPs were applied as an upconverting layer in DSSCs. Upconversion photoluminescence indicates that the UCNPs doped with 5% Gd ions exhibit the strongest green and red fluorescence emissions. Moreover, the DSSCs device incorporating the NPs with 5% Gd ion dopant can achieve an optimal photovoltaic efficiency of 5.89%, which is 20.20% enhancement in comparison to the device without NPs and 16.17% increasement with respect to the device containing β -NaYF₄:Yb,Er@SiO₂ nanocrystals, thus highlighting the effect of the doping of the Gd ions in nanoparticles on their upconversion photoluminescence and photoelectric performance. Accordingly, the current results offer a feasible strategy for further regulating the photoluminescence property of UCNPs and optimizing the photovoltaic performance of UCNPs-based DSSCs

devices.

D21-17**钨基电致变色材料与宽波段调控**

丛杉*

中国科学院苏州纳米技术与纳米仿生研究所

颜色变化是自然生命系统的一个神奇特征，例如变色龙和章鱼等生物的进化，它们利用动态颜色变化来实现自适应伪装、隐藏和警报功能。模仿这种生物功能，开发新的仿生智能变色技术，对工业技术、日常生活等领域具有重要意义。然而，面对物联网经济下新兴应用日益增长的需求，当前电致变色材料的颜色多样性、宽光谱调控能力仍未达到要求。通过将超构表面设计与 WO₃ 等传统电致变色材料结合，成功实现了对多色彩、可见/红外的动态调制。在电致变色材料创新基础上，探索了新型电致变色器件结构，开发了柔性多彩、全固态多彩电致变色器件，验证了相关器件对于光谱的精细选择以及宽波段调控能力。

D21-18**新型硫属光电功能材料制备及应用**

梅大江*

上海工程技术大学

探索新型硫属光电功能材料有着重要意义。我们聚焦光催化、铁电和非线性光学三个方面，通过降低禁带宽度至合适大小来满足可见光响应要求，设计出优异的光催化材料；增强铁电材料在外电场作用下的自发极化；调控非线性光学材料带隙来有效提高材料的激光损伤阈值。通过“基元转移”、“电荷转移策略”等策略，合成了多种新型硫属光电功能材料。

D21-19**上转换光色智能调控及应用探索**

周博*

华南理工大学

稀土是我国的战略资源，具有优异的上转换发光性质，在激光、传感、生物成像与诊疗等领域表现出巨大的应用潜力。稀土离子因其独特的 4f 电子能级结构而成为一种理想的多色发光材料。目前如何实现智能光色调控与输出仍然是一个挑战。本报告主要介绍我们近年来的相关研究进展，包括近红外二区响应的多光子上转换发光，纳米尺度上的能量相互作用过程研究，稳态和非稳态调控的红绿蓝三基色和多色智能输出，以及信息安全、纳米探针、多重防伪、生物诊疗、红外器件等应用探索。上述进展为稀土发光基础研究、新型发光材料设计与开发以及前沿光子学应用提供了新思路。

关键词：稀土；上转换发光；光色调控；前沿应用

参考文献

- [1] B. Zhou,* et al., Nat. Photon., 14, 760-766 (2020).
- [2] B. Zhou,* et al., Nano Lett., 23, 6241-6248 (2023).
- [3] B. Zhou,* et al., Nat. Commun, 15, 1923 (2024).
- [4] B. Zhou,* et al., Adv. Mater., 36, 2310524 (2024).
- [5] B. Zhou,* et al., Nano Lett., 22, 7042-7048 (2022).
- [6] B. Zhou,* et al., Nat. Commun., 13, 760-766 (2022).

D21-20**稀土光功能陶瓷材料与器件研究进展**

冯少尉 1,2、李乾 2、薛冬峰*3

1. 中国科学院深圳先进技术研究院
2. 深圳市绎立锐光科技开发有限公司
3. 电子科技大学（深圳）高等研究院

稀土光功能陶瓷材料具有高光学透过率，稳定物理化学性能，适合的能带结构，及丰富的可掺杂离子类型等优点，作为光-光转换基质在激光、红外、荧光和射线探测等领域具有重要的研究意义和应用前景。Nd、Yb 等稀土离子掺杂的高透过率 YAG 透明陶瓷，可以作为固体激光器的增益介质，性能有望能与 YAG 单晶相媲美，同时可以实现更灵活的制备尺寸。以 Y_2O_3 透明陶瓷为代表的倍半氧化物具有更高的熔点，中红外波段透过率高，优异的抗冲击性能等特点，可应用于红外窗口和整流罩等领域，有望作为重要备选材料之一。近年来，硫氧化钷和钷铝镓石榴石等闪烁陶瓷在国内的研究取得了一系列重要进展，但由于国内早期的技术积累缺乏，且国外设备厂商在该领域对我国的技术封锁，导致国产医疗 CT 探测器中闪烁陶瓷依赖于进口的局面仍然未实现突破。因此，稀土光功能陶瓷材料作为一类重要的光电功能材料，是实现我国稀土资源的高值化开发应用和高端装备关键零部件的自主可控的关键一环。

D21-21

纤维状光电探测材料与器件

张其冲*

中国科学院苏州纳米技术与纳米仿生研究所

光电探测器作为一种现代光电子产业的核心组件，可以将光信号转换为电信号，在国民经济和国防军事等领域具有重要的应用。柔性光电探测器相比于传统的刚性器件具有机械稳定性和曲面共形的优点，在可穿戴电子领域具有重要的应用价值。柔性平面光电器件无法与不规则基底紧密贴合且透气导湿性差，因此无法满足可穿戴设备的要求。纤维状光电探测器具有全方位探测、柔软、可高度集成的优势，通过纺织技术编织成透气且导湿的织物，能够与复杂的表面进行完美的贴合，有效契合了柔性电子设备轻型化、微型化、集成化的发展方向。但是受限于现有纤维状光电探测器灵敏度低、稳定性差和功能单一，难以大规模应用推广。围绕“如何兼顾柔性纤维状光电探测器高灵敏度、高稳定性与多功能性”关键问题开展系统研究：（1）开发出无机半导体纤维柔性化新技术，制备了高质量的半导体纤维新材料，实现了纤维状光电探测器的高灵敏度；（2）利用多尺度界面设计新策略，实现了纤维状光电探测器的高稳定性；（3）研制出光电协同的仿生突触视觉记忆新器件，实现了纤维状光电探测器的多功能性。

D21-22

介电氧化物陶瓷的缺陷结构与光电调控

胡万彪*

云南大学材料与能源学院

钙钛矿氧化物具有丰富的物相、电子结构与光电性质。缺陷普遍存在于氧化物材料中，如何构筑特定缺陷以及缺陷如何影响物相、电子态和光电性质等方面仍存在诸多问题。本工作系统研究了钙钛矿结构 $ATiO_3$ ($A=Ca/Ba$) 中 A 位空位的构筑和调控，并建立缺陷和局域结构与电学、发光及静电储能的关联。同时，开展了 $BaTiO_3$ 中 B 位电子态调控，制备 $BaTiO_3/MoS_2$ 光电探测器，全面研究电学和光电性质。

D21-23

有机无机杂化金属卤化物材料的制备及圆偏振发光性能

庞起*

广西大学化学化工学院

圆偏振发光(Circularly polarized luminescence, CPL)材料在三维光学显示、光子学加密传输和信息存储、X 射线成像和光学传感器等多个光电领域都具有广泛的应用。在众多材料里具有优异发光性质以及独特手性结构的有机-无机杂化金属卤化物有望成为一类新型的 CPL 功能材料。目前，这一热门研究领域的首要

挑战是同时实现高光致发光量子产率 (PLQY)、高抗热淬灭和大的发光不对称因子(glum)结构确定的 CPL 材料合成。因此, 如何制备具有优异 CPL 性能的金属卤化物杂化物, 并揭示手性光学活性的来源, 仍然是一个亟待解决的难题。

使用手性有机胺分子诱导合成策略, 通过简单的反溶剂结晶法, 获得了金属卤化物有机无机杂化材料, 它们结晶于非中心对称空间群 P212121。该材料具有 100% 光致发光量子产率(PLQY)和高抗热淬灭能力, 不对称因子 (glum) 为 2.5×10^{-3} , 这归因于 R/S-(3-羟基哌啶)阳离子与[MnCl6]4-链之间的氢键网络增强了晶体刚性。圆偏振发光活性源自于与 R/S-(3-羟基哌啶)发生的不对称的[MnCl6]4-发光团的 N-H...Cl 氢键作用。进一步的电子顺磁共振光谱 (EPR) 和磁滞回线分析证实了红色发光来源于 Mn²⁺的 d-d 跃迁。进一步研究该材料在圆偏振发光 LED 和 X-射线成像方面的应用潜力。这项工作为多功能手性杂化金属卤化物材料的结构设计、晶体生长和光电应用提供了重要的指导。

Reference:

[1] Jianwu Wei, Qiulian Luo, , Qi Panga*. J. Phys. Chem. Lett. 2023,14,5489-5496.

[2]Jing Li, Binbin Luo*, Qi Pang*, Angewandte Chemie International Edition, DOI: 10.1002/anie.202405310.

研究得到了国家自然科学基金项目 (22365005), 中央引导地方科技发展资金项目 (ZY23055001), 广西自然科学基金重点项目 (2024GXNSFDA999018) 及广西科技重大项目 (AA23073018) 资助

D21-24

Ga 系低维半导体纳米材料的生长设计与光电性能

刘宝丹*、李晶

东北大学

以 GaN、Ga₂O₃、GaAs 等为代表的 Ga 系化合物是高性能光电器件的重要原材料, 近年来受到了极大的研究兴趣。纳米结构的 Ga 系半导体不仅具有大块晶体的固有性质, 而且表现出 2D 材料的独特性质。然而, 2D Ga 系纳米结构的合成仍然具有挑战性, 因为其非层状结构无法用类石墨结构的传统方法 (如机械剥离、离子插入等) 等获得。在这项工作中, 我们报道了使用模板法和液态金属印刷策略高效合成 2D GaN、Ga₂O₃、GaP 等, 并对这些二维 Ga 系半导体的微观结构、相变和光电性能进行了系统的研究。

D21-25

光功能纳米复合材料的构建及肿瘤协同治疗

李春霞*

山东大学

癌症严重威胁着人类的生命和健康, 免疫抑制的肿瘤微环境是限制癌症治疗效果的重要因素, 针对该问题, 我们设计了不同功能的光功能纳米复合材料, 通过多种策略逆转免疫抑制微环境, 实现了多模式的肿瘤联合治疗。具体包括: (1) 设计了基于稀土上转换的智能纳米材料 UCNPs@Cu-Cys-GOx: 在肿瘤微环境 (TME) 中发生一系列酶级联反应, 通过“开源节流”策略原位提高活性氧的生成, 增强的氧化应激逆转了肿瘤免疫抑制微环境, 进一步联合 PD-L1 实现了饥饿/化学动力学/免疫协同治疗。而且, 发现材料在 TME 中呈现上转换荧光增强现象。(2) 针对低温光热治疗效果不佳的问题, 一是提出了单原子 Pd 纳米酶通过铁死亡增强低温光热治疗的新策略, 发现 Pd 纳米酶具有过氧化物酶和谷胱甘肽氧化酶双酶活性和较高的光热转化性能; 二是设计了 AuPtAg-GOx 纳米酶用于饥饿治疗增强的低温 PTT 和免疫治疗, 从而逆转了肿瘤免疫抑制微环境, 促进抗肿瘤免疫反应。(3) 开发了多种可生物降解的新型细胞焦亡诱导剂, 首次证实通过线粒体钙超载引起细胞焦亡, 阐明了诱导免疫反应的机制, 发现材料可显著抑制原发肿瘤和肺转移。

参考文献:

- [1] M. Y. Chang, Z. Y. Hou*, C. X. Li*, J. Lin*, et al. Single Atom Pd Nanozyme for Ferroptosis-Boosted Mild-Temperature Photothermal Therapy, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2021, 60, 12971.
- [2] P. Zheng, B. B. Ding, G. Q. Zhu, C. X. Li*, J. Lin*, Biodegradable Ca²⁺ Nanomodulators Activate Pyroptosis through Mitochondrial Ca²⁺ Overload for Cancer Immunotherapy, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2022, 61, e202204904.
- [3] M. Wang, C. X. Li*, Z. Y. Hou*, J. Lin*, et al. Tumor Microenvironment-activated Reactive Oxygen Species Amplifier for Enzymatic Cascade Cancer Starvation/Chemodynamic /Immunotherapy, *Adv. Mater.* 2022, 34, 2106010.
- [4] M. Wang, J. Lin*, C. X. Li*, et al. A Noble AuPtAg-GOx Nanozyme for Synergistic Tumor Immunotherapy Induced by Starvation Therapy-Augmented Mild Photothermal Therapy. *Adv. Sci.*, 2022, 9, 2202332.
- [5] L.Y. Qiao, C. X. Li*, et al. Self-destructive Copper Carriers Induce Pyroptosis and Cuproptosis for Efficient Tumor Immunotherapy Against Dormant and Recurrent Tumors, *Adv. Mater.* 2024, 36, 2308241.
- [6] G. Zhu, C. X. Li*, et al. Lysosomal Rupture-Mediated “Broken Window Effect” to Amplify Cuproptosis and Pyroptosis for High-Efficiency Cancer Immunotherapy, *Adv. Funct. Mater.* 2024, 2400496.

D21-26**Suppression of Cation Intermixing Highly Boosts the Performance of Core–Shell Lanthanide Upconversion Nanoparticles**

Cong Liu*

Henan University

Lanthanide upconversion nanoparticles (UCNPs) have been extensively explored as biomarkers, energy transducers, and information carriers in wide-ranging applications in areas from healthcare and energy to information technology. In promoting the brightness and enriching the functionalities of UCNPs, core–shell structural engineering has been well-established as an important approach. Despite its importance, a strong limiting issue has been identified, namely, cation intermixing in the interfacial region of the synthesized core–shell nanoparticles. Currently, there still exists confusion regarding this destructive phenomenon and there is a lack of facile means to reach a delicate control of it. By means of a new set of experiments, we identify and provide in this work a comprehensive picture for the major physical mechanism of cation intermixing occurring in synthesis of core–shell UCNPs, i.e., partial or substantial core nanoparticle dissolution followed by epitaxial growth of the outer layer and ripening of the entire particle. Importantly, we established a simple method to better reserve the seed core nanoparticles from dissolution by adding excessive sodium oleate, which regulates the dissolution equilibrium of the core nanoparticles and facilitate the cubic-to-hexagonal phase transition involved in the core–shell synthesis process. This route can effectively suppress cation intermixing and present core–shell nanoparticles with a much-boosted performance. We believe that the results of this work provide generic ramifications for synthesizing and employing core–shell UCNPs and further boost their applicability in already established technologies, including applications for bioimaging where a combination of small size and high brightness of the UCNPs is key for their applicability.

D21-27**多尺度有机异质结构晶态材料的宏量制备及其光子学功能研究**

吕强、王雪东*、廖良生

苏州大学

具有精确定义的多组分体系、多尺度结构和异质界面的有机异质结构晶态材料由于其催化、等离子

体、光电等领域的潜在应用而吸引了广泛的关注。然而，由于不同有机组分的晶格失配问题难以解决，大规模构建有机异质结构仍然是一个巨大的挑战，也限制了它们在未来的实际应用。因此，开发一条普适性的合成路线，既能够实现大规模制造，又能够实现多功能有机异质结构具有重要意义。在此，我们提出了一种用于有机半导体分级自组装的无晶格失配生长的概念，实现大规模、可控地合成有机异质结构纳米线。其中，有机合金的构建，是基于受体分子结构相似性和分子间的相互竞争作用实现的。最后，基于无晶格失配生长的概念，通过选择合适的给体和受体分子制备了十几种有机三嵌段纳米线，这表明该策略对于有机异质结构纳米线的制备存在普适性。并且，基于各种异质结构纳米线实现了全色可调的光致发光性能，可以满足光信号处理的不同需求，为将来光子学发展提供材料基础。

[1] Lv, Q.; Wang, X. D.; Yu, Y.; Xu, C. F.; Yu, Y. J.; Xia, X. Y.; Zheng, M.; Liao, L. S. *Nat. Chem.* 2024, 16: 201.

[2] Lv, Q.; Wang, X. D.; Yu, Y.; Zhuo, M. P.; Zheng, M.; Liao, L. S. *Nat. Commun.* 2022, 13: 3099.

[3] Lv, Q.; Wang, X. D.; *Sci. Bull.* 2022, 67: 991.

[4] Lv, Q.; Wang, X. D.; Yang, W. Y.; Wang, K. L.; Xu, C. F.; Zheng, M.; Liao, L. S. *CCS Chem.* 2023, 5: 423.

[5] Lv, Q.; Wang, X. D.; Liao, L. S. *Adv. Funct. Mater.* 2022, 32: 2202364.

D21-28

Synthesis of "small and bright" up-conversion nanoprobe using transient energy capture

Shanshan Song*
Henan University

Up-conversion nanoparticles (UCNPs) have received more and more attention in the biomedical field, not only for bioimaging, but also for optogenetics and gene editing. This is due to several significant advantages of UCNPs, such as high light stability, high chemical stability, low toxicity, large imaging depth, no autofluorescence interference and little damage to biological. However, UCNPs has not been widely used in the biomedical field, mainly because of their large size. Despite efforts to develop small size UCNPs, small size UCNPs have a strong surface quenching effect, making their luminescence usually weak. specimens. Generally, surface passivation strategy or sensitization effect is used to reduce surface quenching and achieve the purpose of enhancing the luminous intensity of nanoparticles. However, the use of the above methods will inevitably increase the mass, volume and size of the nanoparticles, which runs counter to the original intention. Therefore, there is an urgent need to develop more effective sensitization or passivation strategies to improve the luminescence performance of small-size UCNPs with size control. We explored the transient energy capture effect in Er^{3+} sensitized UCNPs and demonstrated that this effect can be applied to Yb^{3+} sensitized UCNPs, confining the energy inside the nanoparticle without rapidly dissipating from the surface, thereby enhancing the upconversion luminescence intensity. This work solves the problem of how to enhance the luminous intensity of UCNPs to get "small and bright" UCNPs without increasing the size of UCNPs and covering the shell. Using this "small and bright" UCNPs, bright cell images with clear nuclear boundaries can be obtained.

D21-29

Low-lying excited state energy trap induced by cross-relaxation – The main origin of concentration quenching in lanthanide upconversion nanoparticles

Yafei Huang*
Henan University

In lanthanide-doped upconversion nanoparticles (UCNPs), the concentration of emitter ions, also known as activator ions, is usually limited to 1 – 5 mol% due to concentration quenching effects. This circumstance limits the luminescent efficiency of UCNPs' and their use in a variety of application areas. Earlier studies have attributed

the activator concentration quenching to migration of energy to the nanoparticle surface, while indicating that cross-relaxation between activator ions had a minor role therein. The effect of energy transfer pathway between activator ions on the luminescence properties of UCNPs was studied. NaYF₄: x% Er doped with Er³⁺, NaYF₄: x% Er@NaLuF₄ and Yb-Er co-doped NaYF₄: 20% Yb, x% Er, NaYF₄: 20% Yb, x% Er@NaLuF₄ were synthesized by thermal decomposition method. The results show that: First, the cross-relaxation between activator ions plays an important role in the concentration quenching of upconversion emission, and these quenching cannot be simply attributed to the energy transfer to the surface. Second, the side effects of cross relaxation can be inhibited when the absorptive capacity of activator ions is very prominent. Third, cross relaxation results in the accumulation of excitation energy at the lowest excited state level of the activator ion, forming a "low energy trap" and enhancing the down-transition emission intensity related to the energy state. Fourth, the "low energy trap" can be utilized to adjust the upconversion fluorescence channel to achieve pure red emission that is more conducive to biological imaging. The study identified the role of cross relaxation in the concentration quenching of co-doped UCNPs and supplied the possibility to further optimize the upconversion emission in specific fields such as bioimaging, energy harvesting, and nanophotonics.

D21-30

分子内氢键诱导的 Zn 基杂化金属卤化物高效蓝光发射

张琪、李凌云*

福州大学材料科学与工程学院

氢键作用是决定有机-无机杂化金属卤化物 (OIMHs) 晶体结构的关键因素。在 OIMHs 晶体中氢键作用分为分子间氢键作用和分子内氢键作用, 它们对于 OIMHs 结晶特性的影响已被广泛研究, 但是对于晶体光学性能的调控机制却有待深入研究。我们以具有光活性的分子 2,2'-联吡啶为有机配体, ZnCl₂ 为无机金属中心合成了具有 OD 结构的晶体 1 (C₁₀H₁₀N₂ZnCl₄), 晶体 2 (C₁₀H₁₀N₂ZnCl₄) 和晶体 3 ((C₁₀H₉N₂)₂ZnCl₄)。在晶体 1 中, 254 nm 和 302 nm 激发下, 晶体是绿光发射; 在 365 nm 激发下, 晶体是蓝光发射; 其中绿光发射强度强于蓝光发射。在晶体 2 中, 254 nm 和 302 nm 激发下, 晶体同样是绿光发射; 在 365 nm 激发下, 晶体是蓝光发射; 其中蓝光发射强度强于绿光发射。在晶体 3 中, 254 nm, 302 nm 和 365 nm 激发下, 晶体均是蓝光发射且 PLQY 高达 34.1%。实验研究表明, 三个晶体的发光来源均来源于 2,2'-联吡啶有机阳离子, 在紫外光激发下, 2,2'-联吡啶阳离子将从基态 S 激发到激发态 S₁ 的高声子倍数。随后, 激发的 2,2'-联吡啶阳离子将在声子的帮助下弛豫到 S₁ 态高能谷的零声子倍数。有机系统从 S₁ 态高能谷的零声子倍数进一步松弛到基态 S 态, 在此期间产生绿光和蓝色发射。但是这三个晶体中不同发光特性, 我们将其归结为晶体 1 和晶体 2 中只存在分子间氢键, 然而在晶体 3 中不仅存在分子间氢键, 还存在分子内氢键。晶体 3 中有机阳离子的分子内氢键存在改变了有机体系的能带结构, 促进了有机阳离子从较高能量谷向较低能量谷的传递, 从而增强了蓝光发射。综上所述, 考虑到晶体 1 的强绿光发射特性与晶体 3 的强蓝光发射特性, 我们将晶体 1 与晶体 3 通过溶剂挥发法制备了异质晶体, 异质晶体在选择性探测光线 UVA (365 nm) 和 UVB (254 nm, 302 nm) 展示出良好的抗干扰探测性能, 具有一定的使用价值。并且本工作为揭示分子内氢键作用诱导可调光发射机理为发光 OIMHs 材料的设计提供了新的指导。

D21-31

新型铟基有机-无机杂化金属卤化物的发光性能与温度依赖特性研究

刘清逸、李凌云*

福州大学材料科学与工程学院

有机-无机杂化金属卤化物因其多样的光物理性能备受关注。铟离子 (In³⁺) 离子半径较小, 易于形成低维有机-无机杂化金属卤化物, 因此成为这一领域的研究热点。目前报道的铟基有机-无机杂化金属卤化物通常存在发光强度弱、荧光量子效率低等问题, 限制了其应用和发展。在本工作中我们合成了新型铟基

有机-无机杂化金属卤化物 $(C_{15}H_{18}N)_2InCl_5$ ，晶体结构属于 C 2 空间群，晶格常数为 $a=16.19\text{\AA}$ ， $b=12.56\text{\AA}$ ， $c=8.37\text{\AA}$ ， $\alpha=90.0^\circ$ ， $\beta=103.8^\circ$ ， $\gamma=90.0^\circ$ ， $Z=2$ ， $[InCl_5]^{2-}$ 多面体在晶体中呈零维分布。纯相 $(C_{15}H_{18}N)_2InCl_5$ 在紫外线激发下没有发光行为，通过掺杂 Sb^{3+} 、 Bi^{3+} ，我们成功赋予其光致发光性能。其中 $(C_{15}H_{18}N)_2In_{1-x}Bi_xCl_5$ 在 375nm 激发下具有蓝色宽带发射，发射峰位于 470nm，荧光量子效率约为 6%，荧光强度随温度升高明显下降； $(C_{15}H_{18}N)_2In_{1-x}Sb_xCl_5$ 在 365nm 激发下具有橙红色宽带发射，发射峰位于 650nm，具有接近 100%的高荧光量子效率，并且荧光强度受温度变化影响小。 Bi^{3+} 、 Sb^{3+} 共掺杂的 $(C_{15}H_{18}N)_2InCl_5$ 在 365nm 激发下表现出双峰发射行为，发射峰分别位于 475nm 与 650nm，并且两个发射峰荧光强度的温度依赖特性与单掺杂相一致。采用实验与第一性原理计算相结合的研究手段，我们从电子结构、晶格振动模式等方面，系统研究了该体系的发光动力学过程以及温度依赖特性。最后利用 Bi^{3+} 、 Sb^{3+} 共掺杂的 $(C_{15}H_{18}N)_2InCl_5$ 展示出的温度依赖特性不同的双发射峰，探索并证明了这一新型有机-无机杂化金属卤化物应用在低温传感领域的可行性。

D21-32

多尺度钙钛矿魔幻尺寸团簇材料研究

徐珂^{1,2}、钱彬彬^{1,2}、陈昆峰³、薛冬峰*²

1. 中国科学院深圳先进技术研究院
2. 电子科技大学（深圳）高等研究院
3. 山东大学晶体材料国家重点实验室新一代半导体材料研究院

金属卤化物钙钛矿（MHPs）材料，基于其出色的带隙可调性、宽波长范围覆盖能力、优越的载流子传输特性及长电荷扩散长度等优异理化性质，在光伏、传感技术、照明、高清显示和生物医学等多个领域都展现出广泛的应用潜力和价值。其中，在 MHPs 材料体系中，介于微观物质与宏观物质之间的金属卤化物钙钛矿魔幻尺寸团簇（PMSCs）材料，由于具备高比表面积（S/V）、尺寸和组分精确可控、色纯度高、发光光谱灵活可调、独特的光量子效应以及易于对缺陷进行功能化处理等特性，同时兼具良好的溶液加工性、快速合成能力和低成本等特点而在光电应用领域具有显著优势。本研究聚焦于多尺度（从原子尺度到介观尺度）水平上，构建 PMSCs 材料的结构设计和粒子生长动态精准调控制备，研究 PMSCs 体系中光学性质和稳定性作用机制，阐明 PMSCs 材料的成核、组装和生长演化规律，建立 PMSCs 材料制备工艺-结构-性能的优化设计方法。本研究旨在构建高稳定性 PMSCs 发光材料体系，突破其精准制备合成技术，为实现制备光电功能型钙钛矿团簇基材料与器件提供技术支持与理论借鉴。

D21-33

晶体生长固液界面的异质结性质探索

朱允中*

中山大学

大尺寸人工晶体的固液界面，是左右晶体品质的核心区域，却也是晶体生长的盲区。尽管固液界面的基础理论已日益完备，但实际生长过程中边界层传热与传质、生长基元组合与构序、载流子输运与分布等多尺度动力学问题始终无法在极端敏感严苛的晶体生长环境中原位探测，致使界面演化机理不明、材料品质良莠不齐、大尺寸工艺研发艰巨漫长甚至无法重复、诸般控制手段存在过度的经验依赖和盲目性等难题。

近年我们提出界面原位诊断技术，通过测量界面相本征电动势，相继原位揭示了界面电动势与生长速度、温度过冷、溶体波动的定量关系，多角度的呈现了界面宏观动力学[1-3]。基于此，近期工作逐渐由宏观向微观视角延伸。我们发现生长中的高温氧化物晶体端和熔体端分别呈 N 型和 P 型半导体性质[1,2]，两者连接成 PN 结展现出非线性的时变伏安特性，构成了能在 2000°C工作的二极管器件！利用这一性质，能将微观离子动力学与宏观边界层的弛豫响应巧妙建立定量关系，进而具象载流子输运、团簇演化、外场干预等边界层的微观动力学现象。上述工作通过界面诊断技术与半导体异质结模型的综合运用，为原位调控掺杂离子分凝、生长基元组合、界面形状演化，提供了由微观介观扩展至宏观尺度的连贯理论模型和实验

方法。

关键词：晶体生长界面；半导体异质结；多尺度动力学

参考文献

[1] Zhu, Y.*; Ding, J.; et al, Acta Materialia 2022, 238: 118242

[2] Wang, W.; Zhu, Y.*; et al, Materials & Design 2023, 232: 112070

[3] Liu, Z.; Zhu, Y.*; et al, Talanta 2024, 274: 126054

D21-34

立方氮化硼中点缺陷引起的声子共振散射及反常热导率

郭瑞强*

山东高等技术研究院

立方氮化硼的高热导率和超宽带隙使其在热管理、高功率电力电子和光电器件等领域极具应用前景。然而，在实际应用中，生长过程或掺杂等因素引入的点缺陷会强烈地散射声子，抑制热传导，显著降低其散热效果。目前，对于立方氮化硼中的点缺陷-声子散射机理及其对热导率的影响尚不清楚。针对该问题，本工作采用基于第一性原理的格林函数方法准确预测了含点缺陷立方氮化硼的晶格热导率，研究了典型点缺陷对其热输运性质的影响，揭示了点缺陷导致的声子共振散射机理及其引起的反常热导率，从而为其掺杂元素选择和热物性调控提供了指导。

D21-35

Er³⁺, Yb³⁺共掺白钨矿钨酸盐晶体的生长与光学温度传感性能研究

李凌云*

福州大学

荧光温度传感是一项能够在极端条件下使用的新型测温技术，稀土离子 Er³⁺离子的 4S_{3/2} 与 2H_{11/2} 是一对经典的热耦合能级，其荧光强度比值（FIR）与温度间的依赖关系抗干扰能力强，是用来测温的理想光学参数。NaY(WO₄)₂ 和 CaWO₄ 是典型白钨矿结构钨酸盐材料，物化性能稳定，Er³⁺、Yb³⁺等稀土离子可掺杂性良好，是光学温度传感材料的理想基质。目前，大多数荧光温度传感材料形态以粉末、微晶玻璃为主，针对单晶形态材料的开发研究较少，并且 NaY(WO₄)₂ 和 CaWO₄ 较大尺寸单晶的制备方法以提拉法为主，使用该法制备测温材料成本较高，因此需要开发 Er³⁺, Yb³⁺共掺杂 NaY(WO₄)₂ 和 CaWO₄ 单晶材料更具性价比的生长方法，同时探究单晶相较于多晶材料用作光学温度材料的优势，研究两者上转换荧光（UC）光谱学特性以及荧光温度传感性能。在该工作中，我们模拟了极端环境条件，测试了单晶与多晶材料的湿热稳定性、抗热震稳定性及酸碱稳定性，可知在强酸性环境下单晶材料的稳定性能强于多晶材料。对比了 Er³⁺, Yb³⁺共掺杂 NaY(WO₄)₂ 和 CaWO₄ 单晶材料实际制备的荧光温度传感器的实际性能，前者 773K 时仍有明显光发射，最大相对灵敏度为 0.83% K⁻¹；而后者则 773K 时荧光衰减明显。相对而言，以 NaY(WO₄)₂-SC: Er³⁺, Yb³⁺为测温介质的荧光温度传感器具有更大的工作温度范围，极具实际应用价值。

D21-36

异价离子掺杂的 Cs₂ZnCl₄ 闪烁晶体生长及性能研究

尹航*

中国计量大学

围绕国家战略前沿的核医学成像、高能物理等技术，迫切需要研发应用于闪烁探测核心技术的超快闪烁体。Cs₂ZnCl₄ 作为新一代超快闪烁晶体由于拥有 1.7 ns 的衰减时间，且无明显慢分量而备受研究者关注，然而 Cs₂ZnCl₄ 因为较宽的带隙与光产额较低等缺点，导致其难以进一步开发应用。因此，提高 Cs₂ZnCl₄ 晶体的光产额成为了能否应用于高能领域的重点。本研究探讨了一系列通过坩埚下降法制备的大尺寸、高

质量的 Cs₂ZnCl₄:Ce³⁺和 Cs₂ZnCl₄:Zr⁴⁺晶体并对其闪烁和发光性能进行了初步表征, 研究表明 Cs₂ZnCl₄ 晶体中掺杂 Ce³⁺和 Zr⁴⁺, 荧光和闪烁性能均表现出极大的提升。其中, 生长的 Cs₂ZnCl₄:Zr⁴⁺晶体兼具宽的蓝色发射与纳秒级荧光衰减时间, 荧光强度在 Zr⁴⁺浓度为 8%时达到最优; 在闪烁性能方面, Zr⁴⁺离子的掺入使 Cs₂ZnCl₄ 晶体表现出优秀的 X/γ 射线响应能力, 降低的检出限 (65 nGy s⁻¹), 以及 γ 射线激发 (137Cs) 的超快衰减时间 (~3 ns)。前期结果初步证明, Cs₂ZnCl₄:Zr⁴⁺晶体有潜力成为能够应用于高能探测领域的闪烁新材料。

D21-37

晶体生长

陈昆峰*¹、薛冬峰²

1. 山东大学新一代半导体材料研究院
2. 电子科技大学(深圳)高等研究院

晶体生长经历了从微观原子分子到宏观体块的转变过程。晶体生长方法包括气相法、液相法、熔体法等, 这些方法包括热量传递、质量输运、流体流动、反应等物理化学过程。在生长过程中, 热场、流场等物理场将会影响固液界面状态、缺陷形成, 最终决定晶体的品质。铌酸锂是一种广泛应用于声表滤波器、电光调制器、热释电传感器的晶体材料。提拉炉在加热过程中的温度分布和加热效率对铌酸锂晶体生长有着重要影响。本报告介绍典型晶体生长过程中热场、流场对晶体生长过程的影响, 包括提拉法、溶液结晶、焦耳热快速烧结等, 采用有限元仿真和实验方法研究其中的稳态和动态问题。真实晶体生长体系是多物理场耦合的结果, 构建与真实情况一致的多物理场模型将会加快研发迭代速度。

D21-38

ZIF 衍生多尺度钴碳复合空心纳米颗粒制备与吸波性能研究

张牧*

东北大学

通过湿化学使用酚醛树脂对 ZIF-67 进行了改性制备出 ZIF-67@PR 核壳结构前驱体, 这种在碱性水解环境下改性得到的复合材料表面出现了由 ZIF-67 被碱性微刻蚀得到的片状氢氧化钴附着生长, 对 ZIF-67@PR 进行微调热解温度的热处理工艺成功制备了具有空心结构的 N 掺杂 Co/C 复合材料, 样品微结构的多重设计, 借助湿化学法、热处理的方法, 最终得到的[Co/NC]@NC-T 样品表现出金属钴在碳框架内弥散分布的空心结构, 内部的金属钴存在多个尺寸, 外部树脂中层状强氧化钴通过 Stranski-Krastanow 模型还原形成小尺寸金属钴量子点, 整体颗粒中分布多尺度的金属钴磁性颗粒, 表现出明显的杂质原子掺杂和丰富的异质界面极化。当热解温度为 600 °C时, 得到的[Co/NC]@NC-600 同时实现了上述多尺度损耗机制的耦合, 并获得了出色的电磁波吸收性能: 当厚度为 1.73 mm 时, 在 17.9 GHz 处达到 RL_{min} 值 -57.0 dB, 当厚度为 2 mm 时, 有效吸收频宽达到最大值 5.7 GHz。这项工作是实现具有多尺度耦合损耗机制的宽带吸波材料的一种简单方法, 为后续电磁波吸收材料的设计提供了可靠的模板。

D21-39

自旋自由度下低维无机材料(团簇)磁电耦合机制研究

庄桂林*

安徽师范大学

团簇是建立物质微观结构与宏观性质内在关联的理想模型, 对深刻认识和理解物质转化规律和构效关系具有重大意义。团簇的电子相互作用, 例如轨道自由度上的相互作用和自旋自由度上的相互作用, 决定整个团簇的理化性质。对于过渡金属团簇基材料, 微观上, 原子内电子间的库仑排斥作用(U)、洪特交换; 原子间电子可能存在相互作用如库仑交换、动能交换、直接交换、超交换等。这当中, 研究在自旋自由度上电子作用, 对理解团簇构效关系(如磁构关系)具有非常重要意义, 同时也是当前自旋化学在团簇理性合成设计中的关键科学问题。磁电材料兼具磁极化或电极化, 且两种极化存在耦合可以实现电场和磁场下

的交叉调控, 满足信息器件小型化、多态存储、多功能和低功耗的要求, 其是量子信息与存储、自旋电子学的关键材料。近年来, 我们课题组围绕配位团簇的磁电性能的构效关系, 结合智能算法和量子蒙特卡洛方法、密度泛函理论方法从多维度上系统且深入地研究多核团簇双交换作用对价态互变、磁电耦合等相变影响机制。系统发现了外磁场下 Fe₃ 团簇体系海森堡反铁磁交换与动能交换竞争机制, 提出磁阻挫(电荷阻挫和自旋阻挫)双重诱导磁电耦合关键机制; 探证了金属-配体间动能交换促使 D-M 交换产生磁电耦合。

D21-40

基于瞬态吸收的新型半导体超快载流子动力学研究

林乾乾*

武汉大学

近几年, 有机半导体、硫化物、杂化钙钛矿等新型半导体材料被广泛研究。由于其柔性、廉价和性能容易被调控等优点, 基于新型半导体的光电器件也取得了日新月异的进展, 广泛应用于薄膜太阳能电池、发光二极管、光电探测器和场效应晶体管等。相比于硅、锗和砷化镓等传统的无机半导体, 新型半导体材料一般更无序和复杂多变, 对其光电性能还缺乏系统性认识, 在半导体器件上的工作原理也存在一些争议, 对于结构性能关系的研究和器件设计的探索也显得极为迫切和重要。本次报告, 主要介绍基于泵浦-探测原理的瞬态吸收(反射)技术(TA)应用于新型半导体的超快载流子动力学研究, 主要关注于半导体薄膜和单晶中载流子的产生、输运、电荷转移等核心过程。

参考文献:

【1】R. Li, F. Yao, Y. Xu, S. Bai, Z. Jia, Q. Lin*, *Adv. Funct. Mater.*, 34: 2307005 (2024)

【2】Y. Xu, R. Li, S. Bai, Y. Li, Z. Jia, Y. Yang, E. Cui, F. Yao, D. Wang, C. Lei, Q. Lin*, *Adv. Funct. Mater.*, 33: 2212523 (2023)

【3】Z. Jia#, M. Righetto#, Y. Yang, C. Xia, Y. Li, R. Li, Y. Li, B. Yu, Y. Liu, H. Huang, M. Johnston, L. Herz*, Q. Lin*, *ACS Energy Lett.*, 8: 1485-1492 (2023).

【4】J. Peng, C. Q. Xia, Y. Xu, R. Li, L. Cui, J.K. Clegg, L. M. Herz, M. B. Johnston, Q. Lin*, *Nat. Commun.*, 12: 1531 (2021).

【5】S. Bai, R. Li, H. Huang, Y. Qi, Y. Xu, J. Song, F. Yao, O. J. Sandberg, P. Meredith, A. Armin, Q. Lin*, *Appl. Phys.Rev.*, 9: 021405 (2022).

【6】J. Peng, Y. Xu, F. Yao, H. Huang, R. Li, Q. Lin*, *Matter*, 5: 2251-2264 (2022).

D21-41

等离子体多尺度制备与改性功能材料

梁风*

昆明理工大学

低温等离子体具有较高的电子温度和较低的气体温度, 可作为一种重要的材料制备和改性手段, 在功能材料领域得到广泛应用。在功能材料制备中, 低温等离子体因其能量密度大、温度高、冷却速率快、反应体系可控等优点, 可作为高温热源使固体熔化、气化, 从而制备功能材料, 或提供促进化学反应的活性粒子, 提高功能材料的合成效率。在改性功能材料中, 低温等离子体的改性作用源于被电离的气体中含有带能量的电子、离子和亚稳态、激发态、游离态粒子, 这些粒子具有不稳定性和活泼性, 产生等离子体的同时伴有红外线等各种形式的光辐射, 能量粒子和能量光辐射在材料中易引起掺杂、刻蚀、表面清洁、界面聚合等一系列物理化学反应, 从而达到材料改性的作用。然而, 等离子体在功能材料制备改性中仍面临着等离子体制备改性功能材料的机理尚不完全清楚等挑战。本课题组通过确立电弧等离子体放电过程中电极温度的准确测量方法, 揭示等离子体的电子过热不稳定性机制, 为等离子体在功能材料制备领域的应用奠定了科学基础。提出等离子体改性金属离子电池电极材料策略, 实现氧空位浓度、离子迁移通道、原位界面层的多尺度协同调控与构筑, 从而提高电极材料性能。通过深入研究等离子体制备和改性机理和影响

因素，实现对功能材料的精确制备和改性，推动等离子体技术在材料领域的大规模应用。

D21-42

等离子体冶金与材料制备

张达、梁风*

昆明理工大学

等离子体冶金是以等离子体流作为热源的冶金过程。由于热等离子体温度可达 104 K 以上且能量集中、导电性和导热性好，特别是氢等离子体存在高活性粒子等特性，使其具有升温速率快、物料反应快、温度高、电热转换效率高等优点，已广泛应用于还原熔炼、氧化熔炼和金属精炼等冶金领域。作为等离子体技术的另一个研究热点，等离子体材料制备技术具有高温、高焓、高的化学反应活性、反应气氛及反应温度可控等特点，适合制备纯度高、粒度小的粉体。基于此，本文采用氢电弧等离子体对金属进行精炼。根据电弧熔炼金属实验、数值模拟手段，结合热力学及动力学分析，从原子、分子尺度上预测杂质去除机制，最终实现电弧等离子体高效精炼金属。然后将精炼的金属再次通过电弧等离子体高效、一步地合成了氮化钛、氮化锆和氮化铪以及硼化铁、硼化镍、硼化钒和硼化钴 纳米颗粒，并对所制备金属氮化物和金属硼化物的生长机理进行了探究。通过热力学计算以及等离子体诊断，发现金属氮化物由电离的氮和金属原子反应后经“成核-凝结-凝并”形成；发现在过量的硼含量下，经自蔓延反应得到金属硼化物。该研究对于等离子体冶金及材料制备中具有重要的科学意义，为材料科学和冶金工业的发展注入新的活力。这一技术在钢铁冶炼领域的应用尤为广泛，对提高生产效率、降低能耗和减少环境污染具有重要意义。

D21-43

二维铁电材料与异质结器件

袁硕果*

中国地质大学（武汉）

近年来，二维铁电材料由于具有超薄厚度、无悬挂键、无晶格失配、兼容性好等优点，受到研究者的广泛关注。我们通过相转变获得了非对称中心结构且能产生自发极化的铁电相 MoTe_2 ，揭示了二维材料 MoTe_2 铁电性来源，制备了基于 MoTe_2 的超薄铁电存储器件。发展了一种基于铁电薄膜调控的高性能垂直石墨烯异质结器件，利用铁电材料的极化翻转，可以调节隧穿势垒的高度，获得了高性能的石墨烯/铁电晶体管器件特性。构建了半导体异质结光电探测器，展示了优异的光电性能和弯曲稳定性，为实现高性能的电子和光电器件提供了可能。这些研究将促进超薄信息存储器件的发展和应用。

D21-44

薄膜型声表面波滤波器功率耐受性提升关键基础问题研究

唐供宾¹、陈昆峰¹、薛冬峰*²

1. 山东大学

2. 电子科技大学（深圳）高等研究院

本文聚焦于 5G/6G 通信与人工智能背景下，声表面波(SAW)滤波器在无线通信中日益重要的地位，特别是针对中高端市场的需求激增与国内自给能力不足的问题。文章指出，由于 3GPP 协议对 5G 手机增强上行功率等级(HPUE)的要求，导致现有国产滤波器（功率耐受性 29dBm）无法满足 5G 手机至少 32dBm 的输入功率需求。因此，研究重点转向以硅基压电异质集成结构为主的薄膜型声表面波(TF-SAW)滤波器的电热模型快速建模、芯片级电热失效分析及功率耐受性增强机制，旨在突破技术瓶颈，实现自主可控的高端滤波器生产。国内外已有的研究在体声波滤波器的某些方面取得进展，但在硅基压电异质集成衬底的电热模型精确快速建模及其可靠性提升方面尚存空白。

本文提出了一套系统研究方案，旨在填补上述空白。该方案包括构建电-热多场耦合模型以精确模拟硅基压电异质集成声表面波器件的行为，开发基于该模型的失效机理分析及功率耐受性提升策略，并设

计了包含实验验证环节，利用微纳加工技术制备特殊器件，并结合瞬态功率测试与红外显微镜进行综合评估。

通过综合模型建立、方法创新及严谨的实验验证，本研究预期将为解决声表面波滤波器在 5G 应用中的功率耐受性挑战提供科学依据和技术路径，推动国产高端滤波器技术的发展，缩小与国际先进水平的差距，加速实现国产替代，满足快速增长的市场需求。

D21-45

石墨烯集成调控的太赫兹超表面技术

张翼飞*

山东大学

随着第六代通信技术的发展，太赫兹波受到了世界范围内极大的兴趣。与传统微波相比，太赫兹波可以提供更高的数据传输速率（高达数百 Gbps）和更小的空间分辨率；与红外相比，太赫兹波大气损耗很小，可以穿透薄介质材料。太赫兹已经被 IMT-2030（6G）推进组列为第六代移动通信的关键技术。超表面是一类具有亚波长人工结构的平面型超材料，可以操控太赫兹实现自然材料没有的光学性质。通常而言，超表面的光学性质在设计好之后就固定了，需要集成动态器件和材料实现动态调控。动态超表面可以有效地操控太赫兹波，非常适合 6G 通信应用，如智能超表面和多输入多输出通信等。石墨烯具有完美的电学和光学性质，在动态调控太赫兹超表面方面显示出巨大的应用潜力。本次报告将介绍我们在石墨烯集成调控太赫兹超表面方面的近期工作，包括动态表面等离子体-腔混合表面态、人工表面等离激元的相位和频率调控，动态调控的超高介电常数超材料等，并讨论这些器件的新物理机制和调控方式。

D21-46

多尺度晶体材料或器件中基于有限元的分层级联快速仿真

黄凯、李明、刘中洋、何玉莲、夏鑫、李坤朋、唐供宾*

山东大学新一代半导体材料研究院

随着 5G/6G 移动通讯技术的快速发展，多尺度晶体材料和声表面波(SAW)器件在半导体行业中的重要性日益凸显。在晶体材料的生长机理研究和器件设计制作的过程中，有限元仿真发挥着至关重要的作用。随着研究深入和设计复杂化，确保精准仿真的同时缩短计算时间、降低内存占用成为仿真技术的关键。基于有限元的分层级联算法为这一挑战提供了有效方案。以具有 $2\mu\text{m}$ 周期的二维结构高性能 (Incredible High Performance, IHP) SAW 器件仿真为例，该结构包含 100 根叉指电极和 15 对反射栅（电极材料为 Al，衬底材料结构为 $\text{LiTaO}_3/\text{SiO}_2/\text{SiC}$ ）。针对此结构在精度相同的情况下进行仿真，分层级联算法相较于传统的有限元方法内存占用减少约 85%，计算时间减少约 83%。其中计算资源的 CPU 为 Intel(R) Xeon(R) Silver 4410T，RAM 内存为 256GB。此外，在计算过程中存在大量的稀疏矩阵，恰好契合 GPU 的高效处理能力，或可以通过优化算法降低矩阵带宽进一步提升计算速度。因此，多尺度材料设计、器件优化等均可利用类似的分层级联算法实现快速精准仿真。

D21-47

SiC 基高性能 SAW 器件研究

李明、黄凯、刘中洋、何玉莲、夏鑫、李坤朋、唐供宾*

山东大学

近年来，声表面波（SAW）滤波器技术经历了迅猛的发展，并在通信领域中得到了广泛应用。尤其值得注意的是，高性能（Incredible High Performance, HP）SAW 和超高性能声表面波（ultra-SAW）器件，在频率温度系数（TCF）、品质因子（Q 值）、有效机电耦合系数（ k_{eff}^2 ）等关键性能指标上，展现了卓越的进步与优化。作为第三代半导体技术的杰出代表，碳化硅（SiC）凭借其宽禁带宽度、高载流子迁移速率、及卓越的高击穿电场强等特性，极大地推动了功率器件与射频器件、传感器等应用的发展。同时，SiC 的

高声速与高热导特性进一步预示其在促进 SAW 器件性能优化方面的巨大潜力。本文深入探讨了不同晶格结构（如 3H、4H、6H 等）在不同方向上的杨氏模量与剪切模量差异，及其对 SAW 器件性能的潜在影响。通过二维耦合模 (2D-COM) 模型分析了 SiC 基 SAW 器件横向模式的表现。在此基础上，通过离子束切割技术，成功制备了 36°YX/SiO₂/4H-SiC 异质键合衬底。利用光刻及 lift-off 工艺，在异质衬底上制备了叉指电极结构。实验结果显示，不同周期设计的 SiC 基 SAW 谐振器均展现出了显著的性能提升，如高 Q 值与 k_{eff}^2 。例如，周期为 5 μm 的 SAW 器件达到了 4670 的 Bode- Q 峰值，以及高达 12.2% 的 k_{eff}^2 ，凸显了 SiC 在高性能 SAW 器件应用中的巨大潜力。

D21-48

基于氧化物电解质的固态钠离子电池界面调控研究

刘山

华北理工大学化学工程学院

固态钠离子电池由于原料分布均匀、储量丰富、成本低廉，且安全性能优异，是大规模储能领域的优秀备选电池，具有重要的研究意义和商业价值。然而，固态电池中电极/电解质固固界面的不良接触会显著增大界面电阻，极大地限制了固态钠离子电池的实际应用。因此，对电极与电解质界面力学-电学性能进行有效调控，是实现固态钠离子电池高效能源存储的关键。在本报告中，围绕固态钠离子电池电极/电解质界面（电）化学-力学耦合机制，从电极材料设计与开发、界面动态力学与离子输运调控等方面展开讨论。
关键词：固态钠离子电池；界面调控；界面动态力学；离子输运

墙报

D21-P01

有机太阳能电池材料及其水处理应用

杨林基¹、刘焘*¹、黄词苑¹

1. 广西大学

鉴于有机太阳能电池 (OSCs) 对有机污染物的光降解效果和卓越的光电特性，本研究首次创新性地将 OSCs 与环境光催化交叉领域结合起来。利用 OSC 形态学知识，在 PM6 供体聚合物和 BTP-2F-ThCl 主小分子受体体系中加入适量的客体受体 (Y6-O)，从而实现插入策略。Y6-O 使 π - π 堆积更紧密、畴尺寸减小、畴纯度提高，从而形成了有利于器件中电荷产生和转移的形态，并将功率转换效率 (PCE) 从 17.1% 提高到 18.1%。此外，三元共聚物有机光伏薄膜还被应用于废水处理，在 15 分钟内对离子 Sb(III) 和 Sb(V) 的去除率达到 100%，在 1 小时内对愈创木酚的光降解率达到 90%。这项工作极大地推动了有机光伏和废水处理的发展，为多功能有机光伏材料的应用开辟了前景。

D21-P02

有限元仿真超快高温法合成陶瓷材料

吴济安¹、陈昆峰¹、薛冬峰*²

1. 山东大学新一代半导体材料研究院晶体材料国家重点实验室

2. 电子科技大学（深圳）高等研究院

陶瓷、人工晶体、玻璃、金属合金的制备需要高温环境来提供生长能量，晶体生长是一个复杂的过程，具有多尺度和多场特性。传统的陶瓷材料制备方法采用电阻加热，但是该加热方式的升温速率 (10 °C/min) 和冷却速率 (5 °C/min) 相对较慢。超快高温烧结法的升温速率 (10³ ~ 10⁴ °C/min) 和冷却速率 (~ 10⁴ °C/min) 极快，能高通量筛选和合成材料。然而，在超快高温烧结 (UHS) 工艺过程中，碳载体大部分位置的温度和体块材料的温度难以准确测量。基于 Comsol Multiphysics 有限元仿真软件，开展了对 UHS 工艺温度、时间、加热元件设计的研究。通过非线性方程拟合电导率-温度实验数据，获得的拟合曲线可以反映碳毡的

电导率在高温下的变化趋势。仿真结果表明,最高温度的区域在碳毡两端,放置样品的区域温度较低。另外,沿着 x 轴方向温度场分布是不对称的。利用 Comsol 软件仿真了在快速加热和快速冷却过程中 GdTaO₄ 陶瓷表面的温度分布,陶瓷与加热元件之间的接触紧密程度是影响烧结的重要因素,仿真结果表明 0 mm 和 0.2 mm 间隙的陶瓷上表面中心温度相差约 440 K。最后,设计了不同尺寸的加热元件,研究了在 UHS 工艺过程中的碳毡和体块材料的温度场分布。实验与仿真结果一致,验证了模型的准确性,利用有限元仿真方法可以理解、预测和优化工艺。

D21-P03

pH-普适性的 CdSe_{0.9}Te_{0.1}/ZnS 核壳量子点基光电化学-光电探测器研究

张健¹、郭春显*¹

1. 苏州科技大学

新兴的光电化学-光电探测器与传统的光电探测器相比具有显著的优势,并引起了广泛的关注。然而,恶劣且复杂的液体环境(高腐蚀性等)极大地限制其优异性能的表达和广泛应用。为了应对这一棘手的挑战,通过简单地将 CdSe_{0.9}Te_{0.1}/ZnS 核壳量子点旋涂在导电衬底表面上,从而制备了高性能和稳定的光电化学-光电探测器。基于光电转换测试系统,获得了 7.36 $\mu\text{A}\cdot\text{cm}^{-2}$ 的最大光电流密度和 700 $\mu\text{A}\cdot\text{W}^{-1}$ 的光响应度。同时,在 1.0 mol·L⁻¹ HCl 中也可以观察到清晰且循环的光电流信号,光电流密度达到 1.4 $\mu\text{A}\cdot\text{cm}^{-2}$,光响应度达到 6 $\mu\text{A}\cdot\text{W}^{-1}$ 。更重要的是,四个月后,光电流密度在 1.0 mol·L⁻¹ KOH 中仍保持近一半的效率。而在 1.0 mol·L⁻¹ HCl 溶液中,静置一个月后光电流仅损失 3.7%。两个月后,光电流保持效率还能高达 67.5%。因此,这项工作不仅实现了光电化学-光电探测器的 pH-普适性,也为克服金属基半导体材料的酸解问题提供了新思路。

D21-P04

KDP 单液滴在异质界面上的结晶行为

胡乾宇¹、陈昆峰¹、薛冬峰*²

1. 山东大学

2. 电子科技大学(深圳)高等研究院

在当前的科学研究和工业应用中,晶体成核和生长的基本过程扮演着至关重要的角色。单个液滴的受限结晶条件能够揭示晶体生长的微观机制,尤其是在微尺度下的结晶过程,为理解结晶提供独特视角。室温条件下,磷酸二氢钾(KDP)单液滴的蒸发结晶呈现出不同于传统直接结晶为四方相的高过饱和结晶路径。该路径初期形成单斜相,最后转变为常态稳定的四方相晶体。本研究旨在探究影响 KDP 达到显著过饱和水平的因素,特别考虑环境变量在成核行为中的关键作用。异质界面的性质可能有助于调节成核自由能,从而影响过饱和水平和晶体结构。研究表明,在玻璃基板上形成高过饱和结晶路径的概率较低,通过调节液滴和衬底之间的异质界面以改变接触角,能够显著提高获得亚稳单斜相 KDP 晶体的概率。尽管 KDP 的高过饱和成核途径具有非经典特性,但仍然符合吉布斯自由能的经典成核理论。较大的接触角增加了表面自由能,从而抑制了成核。这项研究突出了在典型环境中多种成核途径的可行性,并为探索 KDP 及类似材料的各种结晶机制提供了新的视角。

D21-P05

High-Performance thin-film lithium niobate Electro-Optic modulator using Spoof Surface Plasmon Polariton electrodes

Zihao Wang¹, Yifei Zhang*², Kunfeng Chen¹

1. Institute of Novel Semiconductors, Shandong University

2. School of Integrated Circuits, Shandong University

Electro-optic (EO) modulators with low voltages and large bandwidths are crucial in optical fiber communication systems. Thin-film lithium niobate modulators retain material advantages such as linear response, high extinction ratio, robust optical power handling, and minimal optical losses, offering significantly improved voltage-bandwidth performances compared to conventional bulk lithium niobate modulators. The proposed Mach-Zehnder (MZ) EO modulator was designed using Spoof Surface Plasmon Polariton (SSPP) theory. SSPP is a type of electromagnetic surface wave that propagate on sub-wavelength periodic metal groove structures in microwave and terahertz frequency ranges, exhibiting dispersion characteristics similar to the optical surface plasmon polariton and promising advantages of local field enhancement and non-diffraction limit. However, integrated with SSPP transmission line structure as the traveling-wave electrode in EO modulator introduced the slow-wave effect, causing index mismatch between the microwave and the optics. Quartz, with its low dielectric constant, was utilized as a substrate to achieve index perfect matching in this work. This MZ EO modulator, with a modulation section 4.8 mm in length, demonstrated a low half-wave voltage of 4.8 V and a large 3 dB modulation bandwidth exceeding 120 GHz.

D21-P06

铌酸锂晶体生长热场模拟研究

陈昆峰*¹、张杰申¹

1. 山东大学

铌酸锂是一种广泛应用于声表滤波器、电光调制器、热释电传感器的晶体材料。提拉炉在加热过程中的温度分布和加热效率对铌酸锂晶体生长有着重要影响。目前对于提拉炉加热过程中各项因素对温场的影响研究尚不充分，本文主要利用有限元仿真软件进行感应加热温场研究，着重探讨了铌酸锂生长过程中，坩埚形状与线圈位置对温场分布及加热效率的影响。

运用 COMSOL 软件模拟了提拉炉中的电磁感应加热过程，对提拉炉加热温场进行了初步建模仿真，分析了各项材料参数改变对加热过程温度分布的影响，对比了不同保温层材料下的温度场分布的变化。针对线圈位置和坩埚形状对加热效率及温场分布的影响进行了深度探讨：通过优化调整线圈位置至与坩埚上沿基本齐平，感应加热区域得以分散，降低了坩埚的热损伤，并使得温度分布更为均匀；对比了三种不同坩埚形状的温场变化，发现弧形底坩埚在加热效率等方面表现略优于直角和倒圆角坩埚，这可能是由于弧形底坩埚的设计使得能量在传输过程中损耗更小，从而提高了加热效率。本研究为提高铌酸锂晶体生长的加热效率及产品质量提供了一定的理论依据与技术支持。

D21-P07

“电荷存储”诱导锂金属电池中富氟化锂的 SEI 层的形成

宋心¹、梁伟忠¹、刘军*¹

1. 华南理工大学

液态电解液锂电池面临易燃易爆、易泄漏等安全问题严重制约了锂电池的发展。固态电解质 (Solid electrolytes, SEs) 具有稳定的物理特性和更宽的电化学窗口，可抑制枝晶生长，提高电池安全性，因此被认为是一种很有前途的电解质。然而，由于锂金属与电解质接触后会自发还原，形成不稳定的固态电解质界面层 (Solid electrolyte interface, SEI)，从而大大降低了电池容量，这是一个迫切需要解决的重大问题。

本工作制备了一种具有“电荷存储”特性的多孔有机晶体结构——聚卟啉骨架材料 (Porphyrin Covalent Organic Framework, POF)，并将其掺入聚合物复合固体电解质中，以研究充分的电荷转移对锂盐分解的影响。研究表明，与单卟啉不同，聚卟啉的独特结构允许电荷在每个单独的卟啉之间进行电荷转移。因

此, 在 TFSI⁻分解形成 LiF 的过程中, TFSI⁻可以获得足够的电荷, 从而促进 C-F 断裂, 形成富含 LiF 的 SEI。与单一吡啶 ($0.423 e^-$) 相比, POF 向 LiTFSI ($1.147 e^-$) 提供的电荷转移多 2.7 倍。结果表明, PEO-POF 组装的 Li/Li 对称电池可在 60 °C 下稳定运行 2700 小时以上。LiFePO₄//PEO-POF//Li 电池在 2 C 下具有出色的循环性能 (750 次循环, 容量保持率为 80%)。即使将 PEO 基底更换为 PEG 基底和 PVDF 基底, 电池的性能仍有显著提高。

参考文献

[1] S. Zou, Y. Yang, J. Wang, X. Zhou, X. Wan, M. Zhu, J. Liu, *Energy Environ. Sci.* 2024.

[2] X. Zhou, F. Huang, X. Zhang, B. Zhang, Y. Cui, Z. Wang, Q. Yang, Z. Ma, J. Liu, *Angewandte Chemie International Edition* 2024, 63, e202401576.

D21-P08

钠离子电池 P2 型层状氧化物正极材料的电子分布调控

彭晨熹¹、刘政波¹、刘军*¹

1. 华南理工大学材料科学与工程学院, 广东省广州市, 510641, 中国

对于过渡金属氧化物正极材料, 提高 Ni 含量是一个提高比容量的有效策略。理论比容量是由过渡金属离子中一定数量的可移动电子决定的^{[1][2]}。然而, 由于有限的碱金属的含量, 特定电压窗口比容量的增加可能是由更容易的碱金属离子嵌入/脱出, 而非更多的活性元素可提供的电荷量增多导致的。本工作通过在 P2 型层状氧化物正极材料中加入过量的镍元素, 构造 Ni³⁺离子, 借此调节电子分布。大约 25%~61% 的 Ni³⁺离子可以有效地促进 Na⁺离子的去/插层, 因为它降低了扩散能垒, 增加了 Na⁺的吸附能。高镍材料 Na_{0.67}Mn_{0.45}Ni_{0.22}Co_{0.33}O₂ 在 2.0-4.25 V 的电压范围内具有 114 mAh g⁻¹ 的可逆比容量。此外, 在电流密度为 1A g⁻¹ 的条件下, 循环 1000 次后, 容量保持率可达 80%, 具有良好的循环稳定性。研究表明, 在合成阶段, 具有 Jahn-Teller 活性 Ni³⁺离子可以有效地调节周围离子的价电子分布。然而, 当 Ni³⁺含量增加到 74% 时, 会加剧结构的畸变, 使得速率性能急剧恶化。本工作从价电子分布的角度对高镍材料容量提升的现象提出了新的见解。

[1] J.-Y. Hwang, C. S. Yoon, I. Belharouak, Y.-K. Sun, *J. Mater. Chem. A* 2016, 4, 17952–17959.

[2] Z. Liu, J. Wu, J. Zeng, F. Li, C. Peng, D. Xue, M. Zhu, J. Liu, *Advanced Energy Materials* 2023, 13, 2301471.

仅发表论文

D21-PO01

铈酸锂晶体的导热性能与声子输运机理研究

包芸嘉¹、陈昆峰¹、郭瑞强*²

1. 山东大学中心校区

2. 山东高等技术研究院

在晶体生长和光电器件应用中部分光的能量会转化为热量留在晶体内部, 形成温度梯度和热应力, 从而容易发生热透镜效应、热致衍射损耗, 甚至热破裂, 这会导致减少器件输出功率以及使用寿命^[1-3]。为了生长优质铈酸锂晶体和铈酸锂光电子器件的高效利用, 我们对铈酸锂的热物性展开研究。在这项工作中, 我们利用密度泛函理论结合声子玻尔兹曼输运方程计算了铈酸锂晶体的热导率, 探究了铈酸锂晶体热导率各向异性的起源, 揭示了其本征声子输运机理。此外, 我们利用时域热反射法 (TDTR) 测量了含不同氧空位缺陷浓度铈酸锂晶体的热导率温度依赖性, 发现晶体中的点缺陷导致其热导率显著低于理论值。这些结果加深了对铈酸锂晶体本征导热机理及点缺陷-声子散射机理的理解, 将有助于通过缺陷工程调控材料的热物性, 解决晶体生长和器件使用中的相关问题。

D21-PO02**大尺寸压电晶体催化降解有机染料**孙向飞¹、陈昆峰*¹、薛冬峰²

1. 山东大学
2. 电子科技大学（深圳）高等研究院

电催化技术，尤其是压电催化，已成为环保和能源领域中一种高效的废水降解和水分解制氢方法。然而，该技术在实际应用中面临一个显著的挑战，即所使用的压电粉末在反应后的回收难题，这可能对环境构成潜在的二次污染风险。为了解决这一问题，本文提出了一种大尺寸压电单晶取代传统的压电催化粉末，旨在实现绿色化学的目标。研究表明，压电单晶可以有效地催化降解罗丹明 B(RhB)、亚甲基蓝(MB)和甲基橙(MO)。降解动力学符合准一级反应动力学。染料降解的过程主要依赖于压电系统生成的羟基自由基 ($\bullet\text{OH}$) 和超氧阴离子 ($\bullet\text{O}_2^-$)，这些活性物质能有效地攻击染料分子，促使它们分解成更小、毒性更低的化合物，从而实现了染料的有效降解。结合 DFT 建模和 COMSOL 仿真，论证了氧缺陷增强有机染料压电催化效果的机理。这些发现表明，压电材料在废水处理中有可能成为一种绿色高效的降解有机染料的方法。

D21-PO03**Substrate Screening for the Growth of Carbon Networks Containing 1D Grain Boundaries**Haojie Huang*¹

1. Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences

The carbon element can hybridize in sp , sp^2 , and sp^3 configurations, enabling for the formation of a diverse range of structures. Currently, various two-dimensional carbon allotropes with unique properties have been theoretically predicted. Recently, Fan et al. successfully synthesized a nonbenzenoid carbon allotrope, igniting a wave of interest in carbon allotropes synthesis (Science, 2021, 372, 852-856). In this study, first-principles calculations were employed to systematically explore the growth behavior of carbon networks containing graphene nanoribbons and one-dimensional grain boundaries on high-index Cu substrates. The grain boundary composed of square and octagonal carbon rings, separated by graphene ribbons of varying widths. The growth process can be divided into two main stages: 1) the formation of nanoribbons along the step edges, and 2) the coalescence of nanoribbons. Our findings suggest that Cu(112) and Cu(122) substrates can stabilize two distinct 4|8 carbon networks respectively, while the critical parameters influencing growth are the step width and step misalignment angle. We propose that it is possible to selectively fabricate carbon networks with different widths of 4|8 one-dimensional grain boundaries through a rational design of the step morphology on the substrate surface. This work provides essential theoretical reference for the synthesis of carbon allotropes.

D21-PO04**Design and preparation of photothermal materials for optoelectronic devices and interface evaporation devices**Longshi Rao*¹, Bin Sun¹, Yang Liu¹

1. Shantou University

Novel low-dimensional fluorescent nanomaterials, characterized by tunable sizes and excellent photothermal properties, play a crucial role in optoelectronic devices, health monitoring, and biomedicine. Their spectra and dimensions determine the final device performance. However, traditional preparation methods for these materials suffer from uneven temperature distribution and difficulties in controlling the reaction process and recognizing

dimensional changes, making precise control of multicolor spectra and cross-dimensional structures challenging. To address this, we are exploring field-assisted microfluidic methods to accurately control the spectra and dimensions of low-dimensional fluorescent nanomaterials. Additionally, carbon nanomaterials, with their unique physicochemical properties, high light absorption, and relatively low thermal conductivity, are ideal photothermal conversion materials. We propose an innovative strategy for the controlled preparation of carbon dots with broad-spectrum strong absorption using microreactors, elucidating the impact of the physicochemical properties of carbon nanomaterials on their photothermal performance, thus achieving efficient photothermal conversion.

D21-PO05

商用铜导线为原料生长高质量铜单晶的研究

王志强¹、孙向飞¹、陈昆峰*¹、薛冬峰²

1. 山东大学

2. 电子科技大学（深圳）高等研究院

铜单晶具有优异的电导率和和较少的缺陷，在集成电路、半导体器件、太阳能电池等电子器件的制造中具有显著的优势。为了降低铜单晶的制造成本，本研究利用布里奇曼法，将最容易获取的铜导线作为铜单晶的生长原料，对采用铜导线生长高质量铜单晶的可行性进行了分析，并实现了相关工艺参数的优化，成功制备了单晶铜锭。在铜锭中间位置定向切出{111}方向的铜块进行摇摆曲线测试，结果表明半峰宽较窄，结晶质量较高。在铜锭肩部和尾部切出铜块，利用 GDMS 对铜导线以及切出的样品进行了纯度分析，结果表明在铜单晶的生长过程中同时实现了原料的提纯。本研究为低成本铜单晶的制备提供了重要的理论和实验基础。

D21-PO06

等离子体调控 Na₃V₂(PO₄)₃ 正极氧空位以实现长循环和高倍率钠离子电池

东鹏^{1,2}、张达^{1,2}、梁风*^{1,2}

1. 昆明理工大学冶金与能源工程学院，昆明 650093

2. 昆明理工大学真空冶金国家工程研究中心，昆明 650093

Nasicon 型阴极（如：Na₃V₂(PO₄)₃），因其理论比容量高（~117 mAh g⁻¹）、工作电压高（V_{3+/4+}为~3.4V），最有望成为下一代钠离子电池的电极材料。但是，其固有的低电导率和钠离子扩散速率严重限制其倍率性能和电池使用寿命[1-5]。本文通过等离子体快速优化 Na₃V₂(PO₄)₃ 正极的晶体结构和界面反应，从而改善 Na⁺ 离子扩散动力学和提高电子导电性，进而提升其倍率和循环性能。该优异的性能归因于等离子体处理增加了 Na₃V₂(PO₄)₃ 中氧空位浓度，从而降低钠离子在晶体结构迁移垒，进而提高钠离子扩散速率，同时，减小了 Na₃V₂(PO₄)₃ 的禁带宽度，使得其电子的传输速率同步提高。并在 Na₃V₂(PO₄)₃ 表面原位生成稳定、高钠离子电导率的 NaF 层，该界面层有利于形成薄且均匀的电解质界面相层，使得电解液与 Na₃V₂(PO₄)₃ 的界面反应得到优化，进而提升整个电池的电化学性能。通过耦合光学分析技术、COMSOL Multiphysics 和密度泛函理论计算（DFT），厘清了等离子体与阴极材料相互作用的机理，并阐明电池循环过程中氧空位、NaF 层和动态 Na⁺ 扩散以及电子电导率行为之间的关系。改性后的 Na₃V₂(PO₄)₃ 正极在 40 C 高倍率下循环 7000 次后仍有 71% 的容量保持率。这项工作为构建先进的储能电极材料提供了一种新的等离子体诱导氧空位的方法，同时有望扩展到其他先进能源存储材料。

关键词：Na₃V₂(PO₄)₃；等离子体；氧空位；

致谢：这项工作得到了国家自然科学基金项目（12175089，12205127），云南省重点研发计划项目（202103AF140006），云南省基础研究计划项目（202001AW070004，202301AS070051，202301AU070064），

云南省“兴滇英才支持计划”产业创新人才(KKXY202252001), 云南省外国人才引进专项(202305AO350042)和云南省重大科技计划项目(202202AG050003)的支持。

参考文献

- [1] Armand, M. & Tarascon, J. M., Building better batteries: researchers must find a sustainable way of providing the power our modern lifestyles demand, *Nature*. 2008, 451: 652-657.
- [2] Goodenough, J. B. & Park, K. S., The Li-ion rechargeable battery: a perspective, *J. Am. Chem. Soc.*, 2013, 135: 1167-1176.
- [3] Cheng, X. B., Zhang, R., Zhao, C. Z. & Zhang, Q., Toward safe lithium metal anode in rechargeable batteries: a review, *Chem. Rev.* 2017, 117: 10403-10473.
- [4] Yan G., Mariyappan S. & Rouse G., Higher energy and safer sodium ion batteries via an electrochemically made disordered Na₃V₂(PO₄)₂F₃ material. *Nat. Commun.* 2019, 10, 585.
- [5] Zhang, K., Gu, Z., Ang, E., Guo, J. Z., Xiao, T. W. & Wang, Y., Advanced polyanionic electrode materials for potassium-ion batteries: progresses, challenges and application prospects, *Mater. Today* 2022, 54: 189-201.

D21-PO07

增强 Na₂Fe(SO₄)₂/C 赝电容效应的高倍率钠离子电池正极

张哲悦^{1,2}、侯敏杰^{1,2}、梁风*^{1,2}

1. 昆明理工大学冶金与能源工程学院, 昆明 650093
2. 昆明理工大学真空冶金国家工程研究中心, 昆明 650093

钠离子电池因资源丰富、分布广泛和环境友好等优势被认为是未来储能技术重要的候选者^[1-3]。具有 Alluaudite 结构的硫酸亚铁钠正极材料 (Na₂Fe(SO₄)₂) 因工作电压高、成本低、热稳定性好而备受瞩目, 然而, 其性能受限于低的电子电导率和缓慢的 Na⁺ 扩散速率。为克服上述挑战, 采用机械球磨法和低温固相法成功制备了具有显著赝电容效应的 Na₂Fe(SO₄)₂ 复合正极材料。表面形貌及微观结构分析证明了复合材料具有分层多孔结构, 石墨可被球磨成纳米薄片并附着在小的活性颗粒之间, 有利于电子的转移。电化学与动力学分析表明, 赝电容效应通过降低电荷转移阻抗和提高钠离子扩散速率来增强材料动力学, 钠离子扩散系数提高了 1-2 个数量级达到 (10⁻¹²~10⁻⁸ cm² s⁻¹)。基于以上结果, 该电池在 0.2 C 时的放电比容量为 84.9 mAh g⁻¹ (1 C=91 mAh g⁻¹), 更为显著的是, 在 1 C 时的放电比容量为 75.2 mAh g⁻¹, 且循环 500 次后容量保持率仍有 85%。本工作为提高铁基硫酸盐钠离子电池正极材料的电化学性能提供了有效策略。

致谢: 这项工作得到了国家自然科学基金项目 (12175089, 12205127), 云南省重点研发计划项目 (202103AF140006), 云南省基础研究计划项目 (202001AW070004, 202301AS070051, 202301AU070064), 云南省“兴滇英才支持计划”产业创新人才(KKXY202252001), 云南省外国人才引进专项(202305AO350042)和云南省重大科技计划项目(202202AG050003)的支持。

参考文献

- [1] Xiong, F., Li, J., Zuo, C., Mg-doped Na₄Fe₃(PO₄)₂(P₂O₇)/C composite with enhanced intercalation pseudocapacitance for ultra-stable and high-rate sodium-ion storage, *Advanced Functional Materials*, 2023, 33(6): 2211257.
- [2] You, Y., Manthiram, A., Progress in high-voltage cathode materials for rechargeable sodium-ion batteries, *Advanced Energy Materials*, 2018, 8(2): 1701785.
- [3] Zhang, J., Yan, Y., Wang, X., Bridging multiscale interfaces for developing ionically conductive high-voltage iron-sulfate containing sodium-based battery positive electrodes, *Nature. Communication*, 2023, 14(1): 3701.

D21-PO08**Preparation of upconversion nanoparticles and their effect on the photoelectric conversion efficiency of dye-sensitized solar cells**Ruiyu Zhang*¹

1. Henan University

Dye-sensitized solar cells (DSSCs) have become a good solar energy harvesting equipment because of their low production cost and simple manufacturing process, and have broad application prospects in many fields. DSSCs have achieved rapid development in the past three decades, but their maximum photoelectric conversion efficiency is still less than 15%. This is due to the low dye loading rate of the photoanode and the narrow light absorption range of the synthesized upconversion nanoparticles. In addition, the size of upconversion nanoparticles with high synthetic fluorescence intensity is larger, resulting in a limited number of nanoparticles loaded on the photoanode, which is also not conducive to improving the photoelectric conversion efficiency. In order to solve the above problems, we modified the cell structure, inserted a 200 nm TiO₂ thin layer into the light scattering layer on the outer layer of the photoanode and the light dense layer in the inner layer, so that the photoelectric conversion efficiency of the modified blank cell increased to 6.89 %. At the same time, Nd³⁺ ions were added to β -NaYF₄: Yb, Ho UCNPs. TiO₂ hollow spheres (TiO₂-HSs) were synthesized to increase the dye load of the photoanode. The dye load of the photoanode and the photoelectric conversion efficiency of DSSCs devices were tested under ultraviolet-visible and simulated sunlight irradiation. The results show that adding TiO₂-HSs to DSSCs not only increases the dye load, but also significantly improves the photoelectric conversion efficiency of DSSCs devices. When the upconversion nanoparticles and TiO₂ hollow spheres were applied to the photoanode at the same time, the DSSCs device demonstrated an optimal photoconversion efficiency of 7.28 %, a 30 % improvement over the blank cell. This work provides a new idea for preparing composite photoanode films based on TiO₂-HSs to enhance the photoelectric conversion efficiency of DSSCs.