

二・項目簡介

(項目所屬科學技術領域、主要研究內容、發現點、科學價值、同行引用及評價等內容。)

清潔能源作為國家戰略性新興產業，對國計民生具有重大意義。發展高效、低成本的光-電、電-光轉換技術是實現清潔能源開發與高效利用的最有效途徑之一，是我國“雙碳”戰略的重要保障。近幾年，金屬鹵化物鈣鈦礦材料在光電器件領域發展迅速，目前鈣鈦礦光伏器件效率已超 25%，發光器件外量子效率也已突破 20%。鈣鈦礦兼具無機和有機材料在光學、電學、機械可塑、溶液加工、低溫處理等方面的優勢，因此基於此材料的光電器件同時具有高性能、低成本等特點，具有廣闊的市場應用前景。

近 6 年來，申請人團隊始終圍繞“金屬鹵化物鈣鈦礦光譜物理及器件研究”這一主題，以超快光譜探究金屬鹵化物鈣鈦礦光電機制為核心，以提高器件性能及開拓其新的光電子應用為目標展開工作。主要發現點總結如下：

1. 鈣鈦礦中載流子動力學模型的構築。針對金屬鹵化物鈣鈦礦中微觀層面的載流子動力學機制與宏觀層面光電子器件性能間的構效關係這一重點和難點問題，該項目借助超快光譜學的手段，對鈣鈦礦中載流子的產生、輸運及復合過程進行了系統研究，建立了普適性的鈣鈦礦載流子動力學模型，闡明了製約三維金屬鹵化物鈣鈦礦發光效率的瓶頸問題，提出通過降低維度改變載流子復合機製成而提高發光效率的對策。同時闡明了維度及摻雜依賴的鈣鈦礦中載流子與載流子、載流子與聲子的相互作用機制。上述原創性研究成果對深入理解鈣鈦礦材料的光電特性與器件性能間的聯繫具有重要的科學意義，夯實了鈣鈦礦中載流子動力學研究的理論基礎，推動了新型半導體光物理特性的研究發展。
2. 高效鈣鈦礦太陽能電池穩定性提升上獲得突破。金屬鹵化物鈣鈦礦材料本身的不穩定性是目前限制其太陽能電池商業化的最主要問題。針對領域內存在的技術瓶頸，首次實現純相準二維鈣鈦礦薄膜的製備，讓無機骨架層得以均勻的受長碳鏈保護，更好的兼顧了鈣鈦礦太陽能電池的穩定性與高效。也創新性地結合了二維鈣鈦礦的穩定性與三維鈣鈦礦的高效，即通過長碳鏈的分子設計及製備方法的創新，有效地在三維鈣鈦礦的晶界雜化包覆二維鈣鈦礦，極大地提高了三維微納晶體的尺寸和質量，並通過鈣鈦礦微納結構的優化，在維持高效的同時提高了其穩定性。也通過對鈣鈦礦結晶動力學控制和優化獲得了大面積高效電池的製備技術及採用摻雜提升穩定性的新方法。相關研究成果對於促進高效鈣鈦礦電池穩定性提升具有重要的指導意義，為推動鈣鈦礦電池的實際應用及其產業化提供了材料和技術支撐。
3. 鈣鈦礦新型發光應用及高性能器件構築。準二維鈣鈦礦的載流子動力學過程高度依賴於不同帶隙相的分佈情況，因此調節準二維中的成相分佈是實現高效載流子傳輸和輻射復合的重要手段。該項目通過對鈣鈦礦的組分控制、間隔層材料調控和界面調控實現了精準的成相調控，優化了準二維的結晶過程，構築了高效率的綠光和藍光鈣鈦礦發光器件，並開拓了全新的鈣鈦礦激光多脈衝發射應用。上述研究對深入瞭解鈣鈦礦發光器件工作原理及進一步提升其性能具有重要的科學意義，也拓展了鈣鈦礦新的光電子應用範圍。

基於上述成果，團隊共發表 SCI 論文 100 餘篇。用於申報該項目的包括一作或通訊的 Nature Energy 1 篇，Nature Communications 2 篇，Advanced Materials 6 篇，Angewandte Chemie 2 篇等期刊論文 45 篇，SCI 總被引 1200 餘次。