

2023 年度拟提名陕西省自然科学奖项目公示内容

一、项目名称

有机及钙钛矿薄膜光伏电池活性层微观结构调控策略

二、提名者及提名意见

提名者：陕西省教育厅

提名意见：

在我国提出“双碳目标”、我省提出“能源产业高端化发展”的背景下，该项目聚焦于跨材料、物理、信息等多个学科、交叉融合发展起来的薄膜光伏电池这一国际前沿领域，在拓展凝聚态结构调控理论、实现薄膜光伏电池的高性能化及多功能化、推进薄膜光伏电池“从书架走向货架”方面做了大量富有开拓性、创新性和系统性的研究工作。具体而言，该工作揭示了有机光伏电池活性层中共轭分子结晶的微观物理机制，为制备高结晶度、低缺陷态密度的薄膜提供了理论指导；在此基础上，进一步发展了顺序结晶策略，实现了活性层包括相区尺寸、分子取向等多层次结构的可控调节；另外，该项目将脉冲激光直写/冲击技术引入到钙钛矿活性层加工过程中，实现了钙钛矿光伏电池稳定性及批次重现性的提升。相关工作引起国内外科研工作者的广泛关注，其中中国科学院院士曹镛教授及李永舫研究员、英国皇家学会院士 Mercouri G. Kanatzidis 教授等国际知名学者均对该工作予以了正面评述；同时，该工作的部分研究引领了相关领域的发展，对材料学科发展起到了推动作用。综上，该工作在理论层面有创新、在方法策略层面有突破、在工程工艺方面有拓展。综上，推荐提名该项目为陕西省自然科学奖二等奖。

提名该项目为陕西省自然科学奖 二 等奖。

三、项目简介

为持续推进产业结构和能源结构调整，2020年9月我国明确提出2030年“碳达峰”与2060年“碳中和”的双碳目标。在此基础上，我省也进一步颁布了《陕西省“十四五”节能减排综合工作实施方案》及《关于完整准确全面贯彻新发展理念做好碳达峰碳中和工作的实施意见》等，加大力度发展可再生能源，积极构建清洁低碳的新型能源体系。有机及钙钛矿薄膜光伏电池（以下简称薄膜光伏电池）可高效的将光能转换为电能，是助力我国实现双碳目标的重要途径。薄膜光伏电池活性层结构直接决定器件光电转换过程能否顺利发生。然而，由于薄膜光伏电池中，有机分子及钙钛矿结晶行为可控性差，导致活性层微观结构不可控，限制了光伏电池能量转换效率的进一步提高。针对上述关键科学问题，该项目围绕“薄膜光伏电池活性层结构与性能”这一主题，在揭示“共轭聚合物分子及钙钛矿结晶微观物理机制”的基础上，提出了将“将结晶热力学因素与动力学因素相结合精细控制活性层微观结构”的策略，实现了有机光伏电池活性层中相区尺寸、结晶度、分子取向多层次结构的精细调控，以及钙钛矿光伏电池活性层晶体结构的可控调节，为制备高性能薄膜光伏电池奠定了理论基础及技术铺垫。因此，该项目的实施在材料科学领域及能源科学技术领域都具有重要的科学意义和应用价值。项目主要发现点具体如下：

（1）揭示共轭聚合物结晶微观物理机制，实现其结晶行为可控调节。揭示了共轭聚合物结晶微观机制包括解缠结、构象转变、链间堆叠三个过程，并指出共轭聚合物分子间缠结是限制其结晶的主要因素；提出了通过削弱共轭聚合物链间相互作用并降低分子构象转变势垒的策略，有效抑制了分子间缠结程度，大幅提高了有机光伏电池活性层的结晶度及晶体完善程度；在此基础上，建立了结晶微观物理过程—结晶行为—密度态紊乱程度—载流子迁移率间的关系。基于该成果，项目完成人与广州华睿光电材料有限公司（TCL全资子公司）、天津大学等联合承担**2项国家重点研发计划**，突破了大面积溶液加工工艺制备发光显示器件的关键技术，满足国家重大战略需求；与此同时，完成人出版了“十三五”**国家重点出版著作1部（46万字）**，并受邀担任**物理化学学报、Battery Energy**杂志的青年编委等；此外，基于该研究，完成人申报了**陕西省高等学校科学研究优秀成果奖一等奖**。

（2）将结晶动力学引入共混体系相分离理论，实现活性层微观结构的精细调控。将给受体结晶顺序这一动力学因素引入到相分离过程，拓展了共轭分子共混体系相分离理论，并开发了可单独控制给体与受体结晶行为的顺序结晶策略；在此基础上，揭示了给受体同时结晶及顺序结晶对相分离驱动力的影响，利用顺序结晶策略实现了小相区尺寸的活性层的制备；揭示了给体与受体同时结晶过程中的竞争耦合关系，利用顺序结晶策略在提高活性层结晶度的基础上，进一步降低了缺陷态密度；将顺序结晶策略与异相成核相结合，利用外延结晶及受限结晶原理，诱导活性层分子取向发生转变，构筑给体与受体分子取向一致的活性层微

观结构；在此基础上，建立了活性层微观结构与光伏电池光物理过程之间的构效关系。该研究受到**国家自然科学基金委优秀青年科学基金（2017）**及**国家自然科学基金委面上项目**于**2015**年、**2018**年、**2021**年的连续支持；基于该研究，完成人入选**陕西省高层次人才引进计划**，并申获**陕西省杰出青年科学基金**；此外，完成人受邀担任***Frontiers in Chemistry***杂志副主编、***Energies***杂志编委及多个相关学科高水平期刊的编辑。

（3）激光直写/冲击技术调节钙钛矿结晶行为，改善薄膜重现性及稳定性。将脉冲激光直写/冲击技术与钙钛矿结晶行为相结合，利用激光直写技术“热加工”特点调控钙钛矿结晶动力学，通过定量控制晶核数量及抑制离子浓度梯度，实现钙钛矿薄膜重现性的提高；在钙钛矿晶体形成过程中，将脉冲激光冲击压力引入到晶格内部，增加离子间相互作用并抵消薄膜残余张应力，提高钙钛矿晶体的本征稳定性；在此基础上，建立钙钛矿结晶动力学及热力学参数与薄膜微观结构之间的关联，揭示晶体内部离子间相互作用对离子迁移及晶格畸变的影响，为制备高稳定性及高批次重现性的钙钛矿光伏电池提供理论基础及技术支持。该研究受到**国家自然科学基金委及陕西省重点研发计划的支持**；与此同时，该研究部分成果成功应用于西安普思莱克新材料科技有限公司的“高效钙钛矿光伏电池墨水研制”的项目，用于制备高性能、高稳定性的钙钛矿光伏电池，三年累计新增利润**1300**余万元，经济效益和社会效益显著。

该项目共发表 SCI 论文 103 篇，在 *Nat. Commun.*, *J. Am. Chem. Soc.*, *Adv. Funct. Mater.* 等材料、高分子、能源领域顶级期刊或高水平期刊发表中科院一区/二区论文 74 篇。该项目选取的 5 篇代表性论文被中国科学院院士曹镛教授、中国科学院院士李永舫研究员、英国皇家学会院士 **Mercouri G. Kanatzidis** 教授等国内外多位专家学者在 *Joule*, *Matter*, *J. Am. Chem. Soc.*, *Adv. Mater.* 等期刊上对该项目工作给予正面引用和高度评价；5 篇代表作累计被 SCI 他引 142 次，评述 31 次，其中 1 篇申获**太仓市自然科学优秀学术论文一等奖**。项目主要完成人应邀在本学科领域重要国际/国内会议上做大会报告、分会邀请报告 11 次，担任分会主席 6 次。该项目共培养**国家自然科学基金优秀青年基金项目获得者** 1 名（项目第四完成人）、**陕西省杰出青年基金项目获得者** 1 名（项目第一完成人）、**陕西省高层次人才引进计划（青年项目）** 1 名（项目第一完成人）、**江苏省科协青年科技人才托举工程入选者** 1 名（项目第二完成人）、**江苏省“双创博士”资助对象** 1 名（项目第二完成人）、**北京市科技新星人才计划**（项目第四完成人）。基于该项目部分研究成果，申获**陕西省高等学校科学研究优秀成果奖一等奖** 1 项。

四、客观评价

对发现点一的部分评价：

国际高分子化学家、中国科学院院士、华南理工大学曹镛教授在其研究论文 (*J. Mater. Chem. C*, 2022, 10, 6710) 在论述关于有机光伏电池活性层结晶原理时, 将项目组通过溶剂工程抑制分子间缠结及干扰的研究工作作为代表性工作 (Generally, small-scale phase separation behavior occurs as the solution dynamically freezes from a thermodynamically stable blend film during the rapid evaporation of the solvent. [34].....[34] Q. J. Liang et al., *Adv. Funct. Mater.*, 2019, 29, 1807591)。国家纳米科学中心周二军研究员在其综述论文 (*Nano Energy*, 2021, 87, 106174) 中, 用14行内容对项目组关于抑制分子间干扰, 精细调控活性层结晶行为的工作进行了积极评价和详细介绍 (In 2018, Liang et al. researched the effect of film-forming kinetics on the crystallinity of the P3HT: m303-based blend. Cosolvent 1,2,4-trichlorobenzene (TCB) has a high boiling point and slower evaporation rate, which can prolong the crystallization duration. Polymer P3HT had more time for the adjustment of the local chain segment.....Consequently, the active layer forms a nano-interpenetrating network with excellent vertical phase separation and higher crystallinity. The optimized morphology is instrumental in suppressing the bimolecular recombination and enhancing charge collection efficiency. Finally, the TCB processed device showed a higher PCE of 7.18% with an excellent FF of 70%. [86].....[86] Q. J. Liang et al., *Adv. Funct. Mater.*, 2019, 29, 1807591)。国家自然科学二等奖、国家杰出青年科学基金获得者、天津大学耿延候教授在其研究论文 (*J. Mater. Chem. A*, 2021, 9, 19874) 对项目组关于聚合物结晶动力学的观点予以介绍, 并用于支撑其论文观点。(By manipulating the drying kinetics with the introduction of a high boiling point co-solvent, Han et al.[22] further promoted the efficiency of P3HT:O-IDTBR up to 7.18%[22] Q. J. Liang et al., *Adv. Funct. Mater.*, 2019, 29, 1807591.)

对发现点二的部分评价：

国际高分子化学家、中国科学院院士、北京化学所李永舫研究员在其综述论文 (*Angew. Chem. Int. Ed.*, 2021, 60, 4422) 阐述全聚合物有机光伏电池活性层形貌调控重要方法时, 将项目组有关顺序结晶调控全聚合物共混体系相区尺寸的研究工作作为代表性工作 (For the well-studied PDI/NDI-based polymer acceptors, there are a variety of strategies for morphology control, such as sequential crystallization,[54]can give some design rules for PSMAAs with suitable crystalline properties and molecular weights as well as good miscibility with polymer donors.....[54] J. G. Liu, et al., *J. Phys. Chem. Lett.*, 2020, 11, 2314)。科睿唯安全球高被引科学家、国家级青年人、才天津大学叶龙教授, 在其综述论文 (*InfoMat.*, 2022, 4, e12270) 中用11行内容积极评价并进行详细介绍项目组关于顺序结晶调控全聚合物体系相分离形貌方面的工作 (Liu et al. [66] recently achieved a high

PCE of 7.8% by applying sequential crystallization of the polymer donor and polymer acceptor to decrease the domain size of PBDB-T:N2200.....The relationships among crystallization kinetics, morphology, and device performance were also established. In addition, the PBDB-T:N2200 blend system exhibited excellent PCE tolerance to blend-ratio changes and excellent longterm stability against oxygen and moisture.....[66] J. G. Liu et al., *J. Phys. Chem. Lett.*, 2020, 11, 2314)。著名有机光电领域专家、韩国科学技术研究院Hae Jung Son研究员在其综述论文 (*J. Mater. Chem. A*, 2021, 9, 24729) 中, 用23行内容和2个图积极评论并详细介绍了项目组通过将分子本征特性与动力学因素相结合调控给受体结晶顺序的研究工作, 充分肯定了结晶顺序对精细调控相分离结构的重要意义 (Han and coworkers developed a sequential two step post-treatment approach of SVA and TA to control the crystallinity of a polymer donor and NFA in a PBDB-T:ITIC blend film (Fig. 7c and d).[123][123]Q. J. Liang et al., *J. Mater. Chem. A*, 2018, 6, 15610)

对发现点三的部分评价:

英国皇家学会院士、美国西北大学 **Mercouri G. Kanatzidis** 讲席教授在综述性论文中 (*Matter* 2021, 4, 2765.) 对我们的工作多次予以评述, 并引用我们的文章对其观点进行支撑。文章指出高速脉冲激光技术用于钙钛矿薄膜结构的改善, 并消除薄膜的孔隙及减小薄膜缺陷和残余应力, 从而大幅提高运行稳定性和热降解温度。(A high-speed pulsed laser technique is proposed to improve the structure of MHP thin films, which can eliminate the pores and reduce the defects and residual stress. The resulting film exhibits higher operational stability and thermal decomposition temperature.[155]For instance, pulsed laser annealing has been shown to successfully anneal the film and reduce the residual stress by 40% in comparison with the thermal annealing method. [155].....[155] C. P. Song et al., *Adv. Funct. Mater.* 2020, 30, 1906781.)。美国罗切斯特大学郭春雷教授在其论文 (*Sol. RRL* 2020, 4, 2000189) 关于对脉冲激光加工优势的讨论中, 将项目组关于通过纳秒脉冲激光释放钙钛矿薄膜残余张应力相互作用, 提高钙钛矿电子学和光电子学性能的研究工作作为其论点的有力支撑 (Recently, Cheng's group reported that nanosecond laser processing can be a feasible method to release residual stress and a simple manner to improve the performance of perovskite electronics and optoelectronics.[12].....[12] C. P. Song et al., *Adv. Funct. Mater.* 2020, 30, 1906781.)

五、代表性论文专著目录（不超过 8 条，其中代表性论文不超过 5 篇，代表性专著不超过 3 部）

序号	论文专著名称	刊名	作者	年卷页码 (xx 年 xx 卷 xx 页)	发表时间	通讯作者	第一作者	国内作者	他引总次数	检索数据库	知识产权是否归国内所有
1	Separating crystallization process of P3HT and O-IDTBR to construct highly crystalline interpenetrating network with optimized vertical phase separation	Advanced Functional Materials	Qiuju Liang, Xuechen Jiao, Ye Yan, Zhiyuan Xie, Guanghao Lu, Jiangang Liu Yanchun Han	2019 年 29 卷 1807591 页	20 19 年 12 月 6 日	Jiang g Liu ,Ya nch un Han	Qiu ju Lia ng	梁秋菊,焦学琛,闫野,谢志元,鲁广昊,刘剑刚,韩艳	47	SCI Expanded Web	是

								春			
2	Addressing the reliability and electron transport kinetics in halide perovskite film via pulsed laser engineering	Advanced Functional Materials	Chunpeng Song, Lei Tong, Feng Liu, Lei Ye, Gary J.Cheng	2019年30卷1906781页	2019年11月29日	Feng Liu, Lei Ye, Gary J.Cheng	Chunpeng Song	宋春鹏, 童雷, 刘峰, 叶镭, 程佳瑞	9	SCI Expanded Web	是
3	Reducing the confinement of PBDB-T to ITIC to improve the crystallinity of PBDB-T/ITIC blends	Journal of Materials Chemistry A	Qiuju Liang, Jie Han, Chunpeng Song, Jingming Xin, Xinhong Yu, Zhiyuan Xie, Detlef-M. Smilgies, Kui Zhao, Jiangang Liu, Yanchun Han	2018年6卷15610-15620页	2018年8月28日	Kui Zhao, Jiangang Liu, Yanchun Han	Qiuju Liang	梁秋菊, 韩杰, 宋春鹏, 辛景明, 于新	71	SCI Expanded Web	是

								红, 谢志元, 赵奎, 刘剑刚 韩艳春			
4	Investigating the effect of cosolvents on P3HT/O-IDTBR film-forming kinetics and film morphology	Journal of Energy Chemistry	Jiangang Liu, Shuyi Zeng, Peng Jing, Kui Zhao, Qiuju Liang	2020年51卷 333-341页	2020年12月1日	Jiangang Liu, Kui Zhao, Qiuju Liang	Jiangang Liu	刘剑刚, 曾淑怡, 彭晶, 赵奎, 梁秋菊	7	SCI Expanded Web	是

5	Optimizing the phase-separated domain size of the active layer via sequential crystallization in all-polymer solar cells	Journal of Physical Chemistry Letters	Jiangang Liu, Shuyi Zeng, Zhiguo Zhang, Jing Peng, Qiuju Liang	2020年11卷 2314-2321页	2020年3月19日	Jiangang Liu, Zhiguo Zhang, Qiuju Liang	Jiangang Liu	刘剑刚, 曾淑怡, 张志国, 曾淑怡, 梁秋菊	8	SCI Expanded Web	是
合 计									142		

六、主要完成人情况（不超过 6 人）

姓名	排名	行政职务	技术职称	工作单位	完成单位	对本项目贡献
刘剑刚	1	无	教授	西北工业大学	西北工业大学	统筹和规划本项目的顺利实施。提出了共轭聚合物结晶微观机制，对发现点 1 做出了贡献；提出了将分子本征特性与动力学因素相结合，通过控制给体与受体结晶顺序实现相分离结构调控的策略，对发现点 2 做出了贡献；与企业合作推动脉冲激光技术在钙钛矿墨水制备领域的应用，推动发现点 3 在应用领域的拓展。该完成人为代表性成果【1】、【3】、【4】、【5】、【6】的作者。
梁秋菊	2	无	副教授	西北工业大学	西北工业大学	开发了溶剂工程与成膜动力学相结合降低聚合物分子缠结程度的方法手段，为发现点 1 做出了贡献；开发了可降低分子间干扰的技术路径，实现了活性层相区尺寸及相分离结构的可控调节，为发现点 2 做出贡献。该完成人为代表性论文【1】、【3】、【4】、【5】的作者。
宋春鹏	3	无	副教授	西北工业大学	西北工业大学	在项目实施过程中，验证了顺序结晶策略在全聚合物体系中的可行性，并系统开展了器件制备及性能分析相关工作，为发现点 2 做出了贡献；利用脉冲激光

						加工技术对钙钛矿薄膜结晶动力学及热力学调控,改善了钙钛矿薄膜光伏电池的稳定性及批次重现性,为发现点3做出了贡献。该完成人为代表性论文【2】【3】的作者。
张志国	4	无	教授	北京化工大学	北京化工大学	为项目实施过程中提供了受体聚合物分子,并参与了分子相转变行为的研究,为发现点2做出了贡献。该完成人为代表性论文【5】的作者。
辛景明	5	无	无	西北工业大学	西安交通大学	通过同步辐射X射线散射的表征手段,对活性层薄膜的多尺度形貌进行了精确表征,为活性层相区尺寸及相分离结构的可控调节提供了表征支持,为发现点2做出贡献。该完成人为代表性论文【3】的作者。

七、主要完成单位情况（不超过 3 个）

完成单位	排名	对本项目主要贡献（限 600 字）
西北工业大学	1	<p>西北工业大学是一所以发展航空、航天、航海(三航) 等领域人才培养和科学研究为特色的多科性、研究型、开放式大学，是国家“一流大学”建设高校，隶属于工业和信息化部。学校作为本项目的第一完成单位，对本项目研究的顺利开展和实施，以及相关代表作的发表提供了必要的实验条件和工作环境保障，同时为项目的实施提供了管理及相关支持。另外，西北工业大学为本项目第 1 完成人、第 2 完成人、第 3 完成人和第 5 完成人的工作单位，对本项目重要科学和应用价值的发现、成果的推广及应用做出了重要的贡献。</p>
北京化工大学	2	<p>北京化工大学是教育部直属的全国重点大学、国家“211 工程”和“‘985’优势学科创新平台”重点建设院校，国家“一流学科”建设高校。学校作为本项目的第二完成单位，对本项目中发现点 2 的顺利开展和实施，以及相关代表作的发表提供了必要的实验条件和工作环境保障。另外，北京化工大学为本项目第 4 完成人的工作单位，对本项目发现点 2 的推广及应用做出了重要的贡献。</p>

八、完成人合作关系说明

项目组完第一完成人、第二完成人、第三完成人、第五完成人均属于西北工业大学电子信息学院教工，隶属于柔性电子材料与器件工业和信息化部重点实验室、智能光电研究团队；项目第四完成人属于北京工业大学材料科学与工程学院教工，隶属于化学资源有效利用国家重点实验室。完成人之间长期合作，共同承担多项国家级课题，合作发表多论文。项目所有工作均在第一完成人刘剑刚教授的系统组织下开展论证和实施，具体合作关系如下：

1. 项目第二完成人梁秋菊副教授为智能光电研究团队骨干成员，与第一完成人【代表性论文 1、3、4、5】、第三完成人【代表性论文 3】、第四完成人【代表性论文 5】及第五完成人【代表性论文 3】展开大量合作。项目中第二完成人开发了系列可降低分子缠结程度的方法，并拓展了可降低共混体系给受体分子间干扰的原理。

2. 项目第三完成人宋春鹏副教授为智能光电研究团队骨干成员，与第一完成人、第二完成人及第五完成人共同发表了多篇科研论文，其中包括代表性论文 3 及论文 *iScience*, 2022, 25, 104090、等；同时与第一完成人及第二完成人申获了陕西省高等学校科学研究优秀成果奖一等奖。项目中第三完成人验证了顺序结晶策略的普适性，同时提出了利用脉冲激光加工技术提高钙钛矿薄膜光伏电池稳定性及批次重现性。

3. 项目第四完成人张志国教授主要研究领域为有机光电功能材料合成，合成了大量的高性能给体分子及受体分子。与第一完成人、第二完成人合作发表了多篇论文，其中包括代表性论文 5 及论文 *Cell Reports Physical Science*, 2023, 4, 101303 等。项目中，第四完成人提供了大量聚合物受体分子及非富勒烯受体小分子，为验证该项目顺序结晶策略的普适性做出了重要贡献。

4. 项目第五完成人辛景明博士为智能光电研究团队骨干成员，与第一完成人、第二完成人、第三完成人共同发表了多篇科研论文，其中包括代表性论文 3 及论文 *Journal of Materials Chemistry C*, 2017, 27, 6842、*ACS Omega*, 2018, 3, 7603、*Battery Energy*, 2023, 2, 20220040 等。项目中，第五完成人利用同步辐射 X 射线散射等表征手段证实了顺序结晶策略调节活性层微观结构的有效性，为构建活性层微观结构与器件性能间的构效关系提供了大量基础数据。

第一完成人签名：