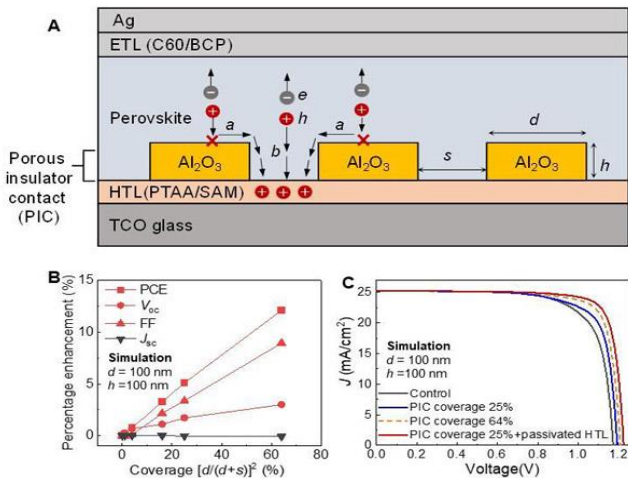




中国科大提出钙钛矿太阳能电池新结构方案



图注：PIC（porous insulator contact）的设计原理和器件仿真

中国科学技术大学徐集贤教授团队与合作者针对钙钛矿太阳能电池中长期普遍存在的“钝化-传输”矛盾问题，提出了一种命名为PIC（porous insulator contact，多孔绝缘接触）的新型结构和突破方案，基于严格的模型仿真和实验给出了PIC方案的设计原理和概念验证，实现了p-i-n反式结构器件稳态认证效率的世界纪录，并在多种基底和钙钛矿组分中展现了普遍的适用性。2023年2月17日，该成果以“通过一种多孔绝缘接触减少钙钛矿太阳能电池中的非辐射复合（Reducing nonradiative recombination in perovskite solar cells with a porous insulator contact）”为题发表在《科学》（Science）杂志上。

钙钛矿太阳能电池技术作近些年引起了广泛关注，其主要器件类型包括钙钛矿单结、晶硅-钙钛矿叠层、全钙钛矿叠层电池等，有望在传统晶硅太阳能电池之外提供新的低成本高效率光伏方案。钙钛矿电池中，异质结接触问题带来的非辐射复合损失已经被普遍证明是主要的性能限制因素。由于“钝化-传输”矛盾问题的存在，超薄钝化层纳米级别的厚度变化都会引起填充因子和电流密度的降低。因此各类钙钛矿器件都亟需一种新型的接触结构，能够在提高性能的同时大幅减少钝化厚度的敏感性。

团队经过长期思考和大量实验探索，提炼出这种PIC接触结构方案。其主要思想是不依赖传统纳米级钝化层和隧穿传输，而直接使用百纳米级厚度的多孔绝缘层，迫使载流子通过局部开口区域进行传输，同时降低接触面积。研究团队的半导体器件建模计算揭示了这种PIC结构周期应该与钙钛矿载流子传输长度匹配的关键设计原理。PIC方案与晶硅太阳能电池领域的局部接触技术有异曲同工之妙，但是不同的是，钙钛矿中的载流子扩散长度较单晶硅要短很多，从毫米级别大幅减小到微米甚至更短，这就要求PIC的尺寸和结构周期要在百纳米级别。传统的晶硅局部接触工艺不能够直接满足这种精度要求，而使用高精度微纳加工技术在制备面积和成本方面存在不足。对此挑战，团队巧妙利用了纳米片的尺寸效应，通过PIC生长方式从常规“层+岛”（Stranski-Krastanov）模式向“岛状”（Volmer-Weber）模式的转变，成功由低温低成本的溶液法实现了这种纳米结构的制备。

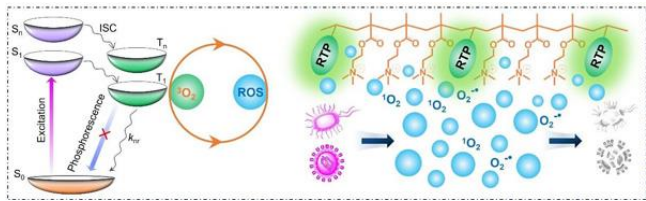
团队在叠层器件中广泛使用的p-i-n反式结构中开展了PIC方案的验证，首次实现了空穴界面复合速度从~60cm/s下降至10cm/s，以及25.5%的单结最高效率（p-i-n结构稳态认证效率纪录24.7%）。这种性能的大幅改善在多种带隙和组分的钙钛矿中都普遍存在，展现了PIC广泛的应用前景。另外，PIC结构在多种疏水性基底都实现了钙钛矿成膜覆盖率和结晶质量的提高（载流子体相寿命大幅提升），对于大面积扩大化制备也很有意义。

值得注意的是，PIC方案具有普遍性，可进一步在不同器件结构和不同界面中推广拓展；同时模拟计算指出目前实验实现的PIC覆盖面积还远未达到其设计潜力，可进一步优化获得更大的性能提升。



研究进展

中科大在分子光物理和光化学领域取得重要成果



图注：高分子基质与染料产生的活性氧的协同杀菌作用

近日，中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心张国庆教授团队在分子光物理和光化学领域取得重要成果。相关成果分别发表在《Angewandte Chemie》和《ACS Catalysis》上。

在分子光物理领域，中国科学技术大学张国庆教授和张学鹏研究员团队，将具有分子内电荷转移态（ICT态）特征的染料共聚到不同极性的高分子中，研究了高分子基质对RTP材料的三大功能化调控作用。

首先， S_1 态具有ICT属性的染料，在越极性高分子中， S_1 能级越低，具有局域跃迁属性的 T_1 态的能级在不同高分子中几乎保持不变，因此可以通过改变高分子极性来调控染料的 ΔE_{ST} ，进而实现对其热激活延迟荧光和RTP发射比例及发光颜色的调控。传统上调控系间窜越（ISC）一般采取改变染料自身化学结构的方式，而该工作提供了一个通过外部基质极性调控ISC的独特方法。

其次，传统上高分子RTP材料易被氧气渗透，难以实现空气中的RTP。作者发现可以通过高分子链形成交联离子键来改变高分子形貌，获得空气中高效和超长的RTP。例如Dye1-co-PQAS和Dye2-co-PQAS，其本身因多孔疏松在空气中无RTP；但与聚丙烯酸阴离子络合之后，变得光滑致密，在空气中获得了超长的绿色和红色余辉。

最后，作者将磷光染料与季铵盐共聚，带正电的季铵盐基质和带负电的细菌膜具有静电吸附效应，更易于将磷光染料产生的活性氧释放到细菌周围，从而实现了杀菌效率的大幅提升。

该工作创新性的揭示了高分子基质对RTP材料的系间窜越、氧气通透性和杀菌能力的“主动”调控作用，为拓展高分子RTP材料的新功能与新应用提供了新思路。

中国科大在设计单位点催化剂用于二氧化碳电还原方面取得重要进展

近日，中国科学技术大学微尺度物质科学国家研究中心曾杰教授团队在单原子催化二氧化碳电还原制备乙烯和一氧化碳方面取得重要进展。相关成果分别发表在《自然·通讯》上。

中国科学技术大学曾杰教授和耿志刚副教授团队与澳大利亚悉尼大学李逢旺教授合作，成功构建稳定的单位点铜配位聚合物——苯并三氮唑铜（ $\text{Cu}(\text{OH})\text{BTA}$ ），实现了高效二氧化碳电还原碳碳耦联过程。通过结构解析表明该配位聚合物具有周期性的近邻铜位点，合适的铜-铜距离（5.7埃）既能够使得碳碳耦联可以发生，同时也不会因为中间体的吸附而破坏催化剂结构的稳定性，实现了稳定的单位点催化剂上高效合成多碳产物的目的。

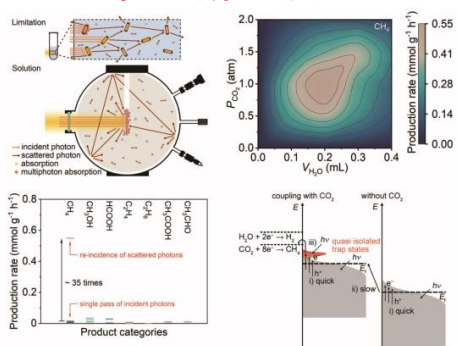
流动池中二氧化碳电还原性能显示，苯并三氮唑铜在-0.87伏特（相对于可逆氢电极），总电流-500毫安每平方厘米的条件下，其多碳产物的法拉第效率达到73%，其中乙烯产物的法拉第效率达到57%，是金属铜催化剂性能的1.3和1.5倍。膜电极反应池性能评估进一步表明，苯并三氮唑铜在近1安培的工业级电流下，全电池稳定电解二氧化碳还原制乙烯长达67小时，展现出苯并三氮唑铜优异的二氧化碳电催化性能。

最后，原位X射线吸收谱，原位拉曼等一系列表征证明，该配位聚合物在电催化二氧化碳还原过程中温和的局域环境维持了结构的稳定。近邻的铜位点为碳碳耦联过程提供了距离合适的活性中心，促进了关键吸附中间体（ $^*\text{OCCHO}$ ）的形成。本论文为设计分子结构稳定的二氧化碳活化与转化催化剂提供了新的思路。

此外，曾杰教授团队与电子科技大学夏川教授团队、中国科学院大连化学物理研究所肖建平研究员团队合作，通过在铜中引入孤立的铈原子构筑单原子合金催化剂（ Sb_1Cu ），实现了以超过95%的法拉第效率催化二氧化碳电化学还原为一氧化碳，揭示了铈-铜孤立界面对调控二氧化碳还原活性与选择性的作用。

进一步的原位光谱表征和理论模拟计算，揭示了单分散的铈-铜界面结构能够促进二氧化碳的吸附和活化，并且能降低碳氧吸附中间体的结合强度，从而提高了二氧化碳还原到一氧化碳的活性和选择性。这一工作为二氧化碳还原生成单一产物的铜基催化剂设计提供了新的思路。

研究进展

中国科大在红外人工光合成领域
取得新进展

图注：Optimized plasmonic catalysis: efficient utilization of scattered photons

近年来，国际上几个先进的等离激元催化研究团队（包括中国科学技术大学的熊宇杰教授团队），提出利用金属纳米材料的等离激元效应来驱动催化反应的思路，以期解决半导体光催化面临的瓶颈问题。等离激元金属纳米材料具有吸收低能光子的能力，却难以将吸收的能量有效地利用到催化反应中去，导致化学转化活性很低。熊宇杰研究团队针对等离激元催化的机制问题，开展了近十年的研究。近日，熊宇杰/龙冉研究团队设计了一类等离激元催化材料，发现其独特的界面耦合态直接电子激发机制，实现了可见光区和红外光区二氧化碳与水的高选择性转化。该技术使用广谱低强度光，甲烷产率高达0.55 mmol/g/h，碳氢化合物的产物选择性达100%，是目前光驱动二氧化碳资源化利用的最高纪录，发表在《自然·通讯》期刊。

该团队聚焦二氧化碳与水的转化反应，基于等离激元材料的催化活性位点设计，形成金属与二氧化碳分子的有效杂化耦合体系。通过一系列工况条件下的谱学表征，发现在等离激元的局域电场增强效应下，其费米能级之上会出现准离散的陷阱态，有助于发生热电子的直接激发过程，并通过延长热电子寿命而发生二次激发过程，从而实现高效多光子吸收和选择性能量转移。基于该作用机制，所设计的材料在可见光区和红外光区范围内，皆可驱动二氧化碳与水高选择性转化为碳氢化合物。有鉴于等离激元催化的多光子吸收特点，该团队设计优化了反应装置，实现了散射光子的高效吸收，从而突破了当前光驱动二氧化碳资源化利用领域的瓶颈。



国家研究中心简讯

◆中国科大封东来教授获2022年何梁何利基金
科学与技术进步奖

2月17日，何梁何利基金2021和2022年度颁奖大会在钓鱼台国宾馆隆重举行。2021和2022年度何梁何利基金科学与技术奖共授予112名杰出科技工作者，中国科大封东来教授获2022年何梁何利基金科学与技术进步奖。

封东来，中国科学院院士，国家同步辐射实验室主任兼核科学技术学院执行院长，教授、博导，长期从事复杂量子材料及其微结构的实验研究，在揭示超导机理和观测拓扑材料新奇性质等方面取得了系列原创成果。发表论文190余篇，被引用17000余次，应邀在学术会议做报告百余次，工作多次被国际主要学术杂志评述和报道，并因“阐明量子材料的电子结构的开创性贡献，特别是在铁基超导体的体材料和界面超导研究中的贡献”当选为APS凝聚态物理部会士。获联合国教科文组织侯赛因青年科学家奖、海外华人物理学会亚洲成就奖、亚太物理学会联盟杨振宁奖、中国物理学会叶企孙奖、国家自然科学基金二等奖等奖项。

何梁何利基金由香港爱国金融家何善衡、梁銶琚、何添、利国伟于1994年创立，旨在奖励中国杰出科学家，服务于国家现代化建设。何梁何利基金遴选奖励的杰出科技工作者，已成为我国社会力量创建科技奖项的成功范例，为激发我国科技发展的活力、培养自主创新人才发挥了积极作用。

◆中国科学技术大学余彦教授获2022年“美团
青山科技奖”

2023年2月27日，“美团青山科技奖”正式获奖名单公布，共有10位45周岁及以下青年科研工作者学者获得此奖项。中国科学技术大学教授余彦获奖。

获奖理由：余彦围绕钠离子电池关键电极材料及储能机制开展研究，取得突出成果。未来，她将致力于研究高比能、长寿命、低成本的新型钠离子电池储能材料及系统。

为助力国家双碳目标实现，促进行业绿色低碳转型，美团发起青山科技基金及“青山科技奖”，依托中国石油和化学工业联合会等全国性行业组织优势，资助鼓励更多科研工作者投身相关科技研发及前沿交叉领域。