

# 陕西省自然科学奖公示信息

(2025年度)

## 一、项目基本情况

项目名称	高效全无机钙钛矿太阳能电池研究
主要完成人	刘治科、段玉伟、杨少敏、段晨阳
主要完成单位	陕西师范大学

二、提名意见（适用于提各单位）

提 名 者	陕西省教育厅
<p>提名意见（不超过 600 字）：</p> <p>该项目研究内容涉及材料科学、能源化学与表面物理化学等多学科交叉领域。针对全无机钙钛矿太阳电池（PSCs）中存在的缺陷密度高、相稳定性差等关键科学问题，开展了从分子设计、缺陷钝化机制、界面调控到器件优化的创新性研究。开创性地提出并设计了一系列多功能钝化分子，通过协同配位、氢键作用、离子键合等机制，显著降低了钙钛矿薄膜的缺陷态密度；提出了阴离子主导的钝化新机制；实现了对钙钛矿结晶过程、相稳定性的全面优化。</p> <p>上述原创性的学术思想和技术路线，显著提升了全无机 PSCs 的光电转换效率、开路电压和环境稳定性，为高性能无机 PSCs 的开发提供了重要的理论依据和实验支撑。</p> <p>该项目 5 篇代表性论文均发表在国际顶级期刊 <i>Angew. Chem. Int. Ed.</i> 2022, e202205012（ESI 高被引论文）、<i>Adv. Mater.</i> 2023, 35, 2210223（ESI 高被引论文）、<i>Adv. Funct. Mater.</i> 2020, 30, 1909972（ESI 高被引论文）、<i>Nano-Micro Letters</i> 2022,14,7（国内期刊，影响因子 36.3）等，研究成果受到国内外同行的广泛关注和积极评价。</p> <p>经审核，该项目成果材料齐全、规范，无知识产权争议，人员排序无异议，符合 2025 年度陕西省科学技术奖自然科学奖提名条件。</p> <p>提名该项目为陕西省自然科学奖二等奖。</p>	
<p>说明：省科学技术奖一、二等奖项目，实行按等级标准提名、独立评审表决的机制。提名单者应严格依据省科学技术奖的标准条件，说明提名项目的贡献程度及等级建议。“提名一等奖”评审落选项目不再降格参评二等奖。项目组与提名单位沟通后，做出提名等级意见；提名项目提交后，提名等级建议不得变更。</p>	

### 三、项目简介

金属卤化物钙钛矿材料因具有带隙可调、激子结合能低、载流子扩散长度长、迁移率高及吸光系数大等优异特性，在光电器件领域引起广泛关注。目前，有机-无机杂化钙钛矿太阳能电池的光电转换效率已突破 27%，展现出巨大的应用前景。然而，该类材料中的有机阳离子（如  $\text{MA}^+$ 、 $\text{FA}^+$ ）在外界环境下易发生分解或逸出，导致器件稳定性较差。采用全无机  $\text{CsPbX}_3$ （ $\text{X} = \text{I}, \text{Br}, \text{Cl}$  或其混合物）钙钛矿替代有机-无机杂化钙钛矿，可从根本上解决有机组分不稳定问题，对发展高效、稳定的光电器件具有重要意义。

本项目围绕全无机  $\text{CsPbX}_3$  钙钛矿材料制备、性能优化及器件设计展开系统研究。首先，对于  $\text{CsPbX}_3$  钙钛矿的晶体结构、结晶机理、生长方式和相稳定性，以及可能存在的缺陷及其对器件性能的影响进行了系统分析；其次，对  $\text{CsPbX}_3$  薄膜的结晶调控策略进行了系统研究，通过不同的调控策略，如溶剂工程、前驱体工程、组分工程和界面工程实现了  $\text{CsPbX}_3$  钙钛矿薄膜质量的大幅度提高；最后，基于高质量  $\text{CsPbX}_3$  薄膜制备全无机钙钛矿电池，实现了多个该类电池的纪录效率。本项目为全无机钙钛矿材料和器件发展提供有力的技术指导和理论支持，取得的创新研究成果如下：

#### （1）酰肼衍分子钝化实现高效稳定纯相 $\text{CsPbI}_3$ 电池

针对  $\text{CsPbI}_3$  钙钛矿太阳能电池（PSCs）存在的缺陷密度高、相稳定性差及非辐射复合严重等问题，创新性引入苯甲酰肼（BH）、甲酰肼（FH）和苯甲酰胺（BA）三类酰肼衍生物作为钝化剂，系统研究其分子构效关系。理论计算与实验表征表明，BH 分子中羰基（ $\text{C}=\text{O}$ ）与肼基（ $-\text{NH}-\text{NH}_2$ ）可协同与  $\text{Pb}^{2+}$  形成双位点配位，肼基还可与碘形成氢键，显著增强缺陷钝化效果；苯环共轭结构进一步提升分子稳定性。经 BH 处理的  $\text{CsPbI}_3$  薄膜缺陷密度显著降低，载流子寿命延长，薄膜质量明显改善。基于 BH 的器件实现了 20.47% 的光电转换效率（PCE），开路电压（ $V_{\text{oc}}$ ）达 1.24 V，为 2022 年  $\text{CsPbI}_3$  PSCs 的最高效率。该研究为分子结构设计协同钝化提供了新思路，对推动全无机钙钛矿电池发展具有重要指导意义。

#### （2）酰偶姻配体添加剂提升 $\text{CsPbI}_3$ 电池效率及稳定性

针对  $\text{CsPbI}_3$  PSCs 中相不稳定、缺陷多及离子迁移等问题，设计合成新型酰偶姻配体衍生物—1,2-二(噻吩-2-基)乙烷-1,2-二酮（DED）作为多功能添加剂，用于稳定  $\gamma$ - $\text{CsPbI}_3$  相并钝化缺陷。研究表明，DED 中羰基与噻吩基团可协同与未配位  $\text{Pb}^{2+}$  形成螯合配位，大幅提升缺陷钝化效果，有效抑制离子迁移。DED 处理的  $\text{CsPbI}_3$  薄膜结晶质量提高，缺陷态密度降低，非辐射复合受到抑制，载流子寿命显著延长。相应器件实现 21.15% 的 PCE 和 1.244 V 的高  $V_{\text{oc}}$ ，是 2023 年  $\text{CsPbI}_3$  PSCs 的最高效率。未封装器件在空气中储存 1000 小时后效率保持率达 94.9%。该研究通过理性分子设计

实现高效双位点协同钝化，为制备高性能全无机钙钛矿电池提供了有效策略。

### (3) $\text{CaCl}_2$ 掺杂调控实现纪录效率 $\text{CsPbI}_2\text{Br}$ 电池

尽管  $\text{CsPbI}_2\text{Br}$  钙钛矿电池发展迅速，但其效率仍落后于有机-无机杂化体系，主要瓶颈在于高缺陷密度与能级失配导致的低开路电压。本研究提出采用  $\text{CaCl}_2$  作为添加剂，实现  $\text{CsPbI}_2\text{Br}$  钙钛矿的可控 n 型掺杂。研究表明， $\text{Ca}^{2+}$  可有效钝化薄膜缺陷，延缓结晶过程，提升薄膜质量，显著降低缺陷态密度，延长载流子寿命。同时， $\text{CaCl}_2$  引入使费米能级向导带方向移动，增强内建电场，从而显著提高  $V_{\text{oc}}$ 。最终器件获得 1.32 V 的高  $V_{\text{oc}}$ ，PCE 达到 16.79%。该研究为无机钙钛矿材料的能级调控与缺陷工程提供了新途径。

### (4) 前驱体工程实现大气环境制备高效 $\text{CsPbI}_2\text{Br}$ 电池

无机钙钛矿对湿度极为敏感，传统制备方法需惰性气氛保护，严重制约其大规模应用。本研究开发了新型前驱体体系 ( $\text{HCOOCs}$  与  $\text{HPbX}_3$ )，通过一步法无需反溶剂即可在大气环境中制备高质量  $\text{CsPbI}_2\text{Br}$  薄膜，显著延长了空气中制备的时间窗口，有效抑制前驱体薄膜在加工与退火过程中的相变。在 30% 和 91% 的相对湿度下，电池效率分别达到 16.1% 和 15.1%，均为中高湿条件下全无机钙钛矿电池的最高效率。该方法具备良好的工艺兼容性与实用性，为大气环境中低成本、大规模制备高性能无机钙钛矿器件奠定基础。

### (5) 离子液体阴离子主导缺陷钝化机制研究及应用

系统研究了一系列咪唑类离子液体 (IILs) 对  $\text{CsPbI}_2\text{Br}$  钙钛矿的钝化机制与性能增强作用。通过调控 IILs 的阴/阳离子结构，结合理论计算与多种表征手段，发现阴离子 (如  $\text{BF}_4^-$ ) 在钝化铅、铯相关缺陷中起主导作用，可与  $\text{Pb}^{2+}/\text{Cs}^+$  形成强离子键 ( $\text{Pb-F}$ 、 $\text{Cs-F}$ )，有效减少  $\text{Cs}^+/\text{I}$  空位及 Pb 相关缺陷，抑制非辐射复合。经  $\text{BMMIMBF}_4$  处理的器件实现 17.02% 的 PCE 和 1.33 V 的  $V_{\text{oc}}$ ，为 2022 年  $\text{CsPbI}_2\text{Br}$  PSCs 的最高效率。未封装器件在 25 °C、25% 湿度空气中储存 1440 小时后效率保持 94.4%，表现出优异长期稳定性。该研究深入揭示了 IILs 中阴离子的关键钝化作用，为设计高效稳定钝化材料提供了重要理论依据。

本项目 5 篇代表性论文发表于 *Angewandte Chemie International Edition*、*Advanced Materials*、*Advanced Energy Materials*、*Advanced Functional Materials* 和 *Nano-Micro Letter* (国内期刊，影响因子 36.5) 期刊，被他引共 754 次，4 篇论文他引超百次，4 篇入选 ESI 全球高被引论文 (前 1%)。成果被三本钙钛矿专著及 *Nature Photonics*、*Nature Energy*、*Advanced Materials* 等国际权威期刊积极评述。完成人在该领域发表 SCI 论文 70 余篇，获授权国家发明专利 20 余项，多次在国内外重要学术会议做报告。本项目多项效率纪录和稳定性表现推动了全无机钙钛矿电池的发展，在人才培养、学科建设与科技进步方面均具有重要意义。

#### 四、客观评价

5 篇代表性论文被 Nature Photonics 杂志和专业书籍等大篇幅正面评论, 累计引用 754 次, 4 篇论文他引次数超过 100 次, 3 篇论文入选全球 ESI 高被引论文。

(1) 可控 n 型掺杂制备纪录效率 CsPbI<sub>2</sub>Br 钙钛矿太阳电池, 该工作发表在材料顶级期刊 *Advanced Functional Materials* 2020, 30, 1909972 上, 目前已经他引 187 次, 入选“Web of Science”高被引论文, 该工作引起国内外学术界同行高度关注。加州大学洛杉矶分校 (UCLA) 的杨阳教授, 世界上最具影响力科学家 (全球 19 人), 对该工作评论: “which is so far one of the most promising inorganic wide-bandgap perovskites (一种最有前途的宽带系半导体) whose efficiency has most recently reached 16.79% (最近效率提升至 **16.79%**) with the incorporation of CaCl<sub>2</sub>” (*Nature Photonics* 2021, 15, 411-423)。钙钛矿太阳能电池之父 Miyasaka 教授在其专著 *Perovskite Photovoltaics and Optoelectronics* 中将该工作获得的效率列入**最高效率图**, 并做了大段介绍。意大利帕维亚大学 Giulia Grancini 教授(现任 Saule Technologies 的联合创始人兼 CTO)对该工作进行了大段描述和评价“Thanks to this novel doping strategy (由于这种新奇的掺杂策略), the authors have realized devices with a PCE of 16.79%”(Adv. Energy Mater. 2021, 2100672)。被誉为“太阳能之父”马丁格林 (Martin Green) 教授充分肯定了该工作获得的效率并做了展望: “With the developments of the last several years, high efficiency CsPbI<sub>2</sub>Br solar cell with PCE of 16.79% (**最高的效率**) was achieved which might catch up with (**有望赶上**) the CsPbI<sub>3</sub> solar cell in the future” (*Materials Today* 2020, 41, 120-142)。中科院分子纳米与纳米技术重点实验室的胡劲松研究院评价: “**Surprisingly (非常惊艳)**, this method achieved an impressive V<sub>loss</sub> of 0.52 V and a record of over 65% of the Shockley-Queisser efficiency limit. **The device performance improved significantly (器件表现显著提升)**” (*Materials Today* 2020, 52, 250-268)。

(2) 基于 PbI<sub>2</sub>(DMSO)和 PbBr<sub>2</sub>(DMSO)前驱体策略实现纪录效率 CsPbI<sub>2</sub>Br 钙钛矿电池, 该工作发表在材料顶级期刊 *Advanced Functional Materials* 2018, 28, 1803269 上, 目前已经他引 **203** 次, 入选“Web of Science”高被引论文, 该工作引起国内外学术界同行高度关注。染料敏化太阳能电池的发明人 Michael Grazel 在其专著 *Perovskite Solar Cell* 中对我们提出的中间相结晶机理和低温制备工艺做了重点介绍: “The resultant

device exhibited a **high PCE** of 14.78% (器件实现了 **14.78%的高效率**)”。钙钛矿太阳能电池之父 Miyasaka 教授在其专著 *Perovskite Photovoltaics and Optoelectronics* 将该前驱体工作做了重点介绍。香港理工大学的严锋教授在其综述文章对本工作做了**整段**介绍:“**with negligible PCE loss after being stored in air (RH 20%)for 500 hours** (该器件老化 **500** 小时几乎效率没有衰减).....(*Energy Environ. Sci* 2019, 12, 2375--2405)”。工作被瑞士洛桑联邦理工学院的 Wolfgang Tress 教授评价: “Liu and co-workers adopted Lewis base adducts of  $\text{PbI}_2(\text{DMSO})$  and  $\text{PbBr}_2(\text{DMSO})$  to reduce the formation energy (降低形成能) of  $\text{CsPbI}_2\text{Br}$  perovskite as well as promote a growth process at low temperature (促进了低温制备).” (*Adv. Mater.* 2019, 32, 1902851)。悉尼大学的 Ho-Baillie 教授 (被澳洲媒体誉为可持续能源领域的顶级学者) 对该工作做了重点介绍: “Yin et al. fabricated  $\text{CsPbI}_2\text{Br}$  films utilizing Lewis base adducts  $\text{PbI}_2(\text{DMSO})_2$  and  $\text{PbBr}_2(\text{DMSO})_2$  as precursors (Yin 等人用路易斯酸碱加成产物  $\text{PbI}_2(\text{DMSO})$  和  $\text{PbBr}_2(\text{DMSO})$  作为前驱体) to slow down the crystallization of  $\text{CsPbI}_2\text{Br}$  perovskite-producing films with smoother surface and larger grains (用于达到延缓结晶, 提高薄膜平整度和增大晶粒)” (*Joule* 2019, 3, 938-955)。

**(3) 前驱体优化策略空气制备高效无机  $\text{CsPbI}_2\text{Br}$  钙钛矿电池**, 该工作发表在材料顶级期刊 *Advanced Energy Materials* 2020, 10, 2000691 上。英国帝国理工学院 Thomas J. Macdonald 教授对该工作也进行整段介绍和评价: “This new system provided a platform for high moisture-resistivity and the ability to fabricate perovskite films with an anti-solvent. (这种新的体系为高湿度环境且不要反溶剂制备钙钛矿薄膜提供了平台)” (*Small Methods* 2020, 5, 2000744)。北京航空航天大学陈海宁教授对该工作进行整段介绍和评价: “Duan et al. prepared a high-quality  $\text{CsPbI}_2\text{Br}$  film in ambient air conditions with high humidity (在高湿度的空气中制备了高质量的  $\text{CsPbI}_2\text{Br}$  薄膜) Most importantly, the PSCs fabricated under >90% RH still delivered a high PCE of 15.11% (更重要的是在大于>90%湿度下获得 **15.11%的效率**)” (*Adv. Energy Mater.* 2021, 11, 2002940)。

## 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，应公开发表 2 年以上，即 2023 年 8 月 1 日前)

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 (年月 日)	通讯作 者 (含 共同)	第一作 者 (含 共同)	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	Hydrazide Derivatives for Defect Passivation in Pure CsPbI <sub>3</sub> Perovskite Solar Cells	Angew. Chem. Int. Ed.	Yuhang Che, Zhike Liu,* Yuwei Duan,* Jungang Wang, Shaomin Yang, Dongfang Xu, Wanchu n Xiang, Tao Wang, Ningyi Yuan, Jianning Ding, and Shengzhong (Frank) Liu*	2022 年 134 卷 e202205 012 页	2022 年 06 月 01 日	Zhike Liu, Yuwei Duan, Shengz hong (Frank) Liu	Yuhan g Che	车宇航, 段玉 伟, 刘治科, 王俊刚, 杨少 敏, 徐东方, 向万春, 王涛, 袁宁建, 丁建 宁, 刘生忠	124	SCI 科 学引 文索 引	是

2	21.15%-Efficiency and Stable $\gamma$ -CsPbI <sub>3</sub> Perovskite Solar Cells Enabled by an Acyloin Ligand	Advanced Materials	Jungang Wang, Yuhang Che, Yuwei Duan,* Zhike Liu,* Shaomin Yang, Dongfang Xu, Zhimin Fang, Xuruo Lei, Yong Li, and Shengzhong (Frank) Liu*	2023 年 35 卷 2210223 页	2023 年 01 月 09 日	Yuwei Duan, Zhike Liu, Shengzhong (Frank) Liu	Jungang Wang	王俊刚, 车宇航, 段玉伟, 刘治科, 杨少敏, 徐东方, 方志敏, 雷旭若, 李永, 刘生忠	146	SCI 科学引文索引	是
3	Controlled n-Doping in Air Stable CsPbI <sub>2</sub> Br Perovskite Solar Cells with a Record Efficiency of 16.79%	Advanced Functional Materials	Yu Han, Huan Zhao, Chenyang Duan, Shaomin Yang, Zhou Yang, Zhike Liu,* and Shengzhong (Frank) Liu*	2020 年 30 卷 1909972 页	2020 年 02 月 07 日	Zhike Liu, and Shengzhong (Frank) Liu	Yu Han	韩玉, 赵欢, 段晨阳, 杨少敏, 杨周, 刘治科, 刘生忠	285	SCI 科学引文索引	是



4	Precursor Engineering for AmbientCompatible AntisolventFree Fabrication of HighEfficiency CsPbI2Br Perovskite Solar Cells	Advanced. Energy Materials	Chenyang Duan, Jian Cui, Miaomiao Zhang, Yu Han, Shaomin Yang, Huan Zhao, Hongtao Bian, Jianxi Yao, Kui Zhao, Zhike Liu,* and Shengzhong (Frank) Liu*	2020 年 10 卷 2000691 页	2020 年 04 月 21 日	Zhike Liu, Shengzhong (Frank) Liu	Chenyang Duan	段晨阳, 崔健, 张苗苗, 韩玉, 杨少敏, 赵欢, 边洪涛, 姚建曦, 赵奎, 刘治科, 刘生忠	96	SCI 科学引文索引	是
5	Unraveling Passivation Mechanism of Imidazolium- Based Ionic Liquids on Inorganic Perovskite to Achieve Near-Record -Efficiency CsPbI2Br Solar Cells	Nano-Micro Letters	Jie Xu, Jian Cui, Shaomin Yang, Yu Han, Xi Guo, Yuhang Che, Dongfang Xu, Chenyang Duan, Wenjing Zhao, Kunpeng Guo, Wanli Ma, Baomin Xu, Jianxi Yao, Zhike Liu*, Shengzhong Liu*	2021 年 14 卷 7 页	2021 年 08 月 08 日	Zhike Liu*, Shengzhong Liu*	Jie Xu	徐杰, 崔健, 韩玉, 杨少敏, 郭茜, 车宇航, 徐东方, 段晨阳, 赵文静, 郭鲲鹏, 马万里, 徐宝民, 姚建曦, 刘治科, 刘生忠	103	SCI 科学引文索引	是
6											

7											
8											
合 计									754		
补充说明（视情填写）：无											

## 六、主要完成人情况表

姓 名	刘治科	排 名	1
行政职务	副院长	技术职称	教授
工作单位	陕西师范大学	完成单位	陕西师范大学
<p>对本项目主要学术贡献：</p> <p>项目主持人，全面负责项目的设计、实施和管理，对本项目的所有重要科学发现做出了创造性贡献，是全部代表性论文的通讯作者。</p>			

姓 名	段玉伟	排 名	2
行政职务	无	技术职称	副研究员
工作单位	成都理工大学	完成单位	陕西师范大学
<p>对本项目主要学术贡献：</p> <p>主要负责高效无机 <math>\text{CsPbI}_3</math> 钙钛矿电池钝化材料的设计及制备，对本项目中钝化材料研制和钝化机理分析做出了创造性贡献，是代表性论文 1，2 的共同通讯作者。</p>			

姓 名	杨少敏	排 名	3
行政职务	无	技术职称	无
工作单位	华中科技大学	完成单位	陕西师范大学
<p>对本项目主要学术贡献：</p> <p>主要负责高效无机 <math>\text{CsPbI}_3</math> 和 <math>\text{CsPbI}_2\text{Br}</math> 钙钛矿电池制备及性能优化，对本项目五篇代表中器件表征与优化均有突出贡献。</p>			

姓 名	段晨阳	排 名	4
行政职务	无	技术职称	无

工作单位	陕西师范大学	完成单位	陕西师范大学
<p>对本项目主要学术贡献：</p> <p>主要负责高效无机 CsPbI<sub>2</sub>Br 钙钛矿电池制备和性能优化，对本项目中空气制备钙钛矿电池做出了创造性贡献，是代表性论文 4 的第一作者。</p>			

## 七、主要完成单位情况表

单位名称	陕西师范大学
<p>对本项目主要学术贡献：</p> <p>作为本项目的依托单位，陕西师范大学为项目的顺利完成、并且取得具有显著创造性的成果，做出了重要贡献，主要体现在：</p> <p>（1）组织并完成了项目策划和实施工作；</p> <p>（2）为项目的顺利实施提供了人力资源与优质的工作环境和场所；</p> <p>（3）提供了本项目所需的设备、能源、图书资料和网络数据库等资源；</p> <p>（4）材料科学与工程学院的大型仪器测试分析平台，为本项目提供了研究所需要实验设备条件。</p>	

## 八、完成人合作关系说明

本项目主要完成人刘治科与段玉伟，杨少敏合作完成代表性论文 1, 2；刘治科与杨少敏合作完成代表性论文 3；刘治科与杨少敏，段晨阳合作完成代表性论文 4。

序号	合作方式	合作者/项目排名	合作时间	合作成果	证明材料
1	论文合著	刘治科 (1) 段玉伟 (2) 杨少敏 (3)	202206	Hydrazide Derivatives for Defect Passivation in Pure CsPbI <sub>3</sub> Perovskite Solar Cells	代表性论文 1 Angew. Chem. Int. Ed., 134, 2022, e202205012
2	论文合著	刘治科 (1) 段玉伟 (2) 杨少敏 (3)	202301	21.15%-Efficiency and Stable $\gamma$ -CsPbI <sub>3</sub> Perovskite Solar Cells Enabled by an Acyloin Ligand	代表性论文 2 Adv. Mater. 2023, 35, 2210223
3	论文合著	刘治科 (1) 杨少敏 (3)	202002	Controlled n-Doping in Air Stable CsPbI <sub>2</sub> Br Perovskite Solar Cells with a Record Efficiency of 16.79%	代表性论文 3 Adv. Funct. Mater. 2020, 30, 1909972
4	论文合著	刘治科 (1) 杨少敏 (3) 段晨阳 (4)	202004	Precursor Engineering for AmbientCompatible AntisolventFree Fabrication of High Efficiency CsPbI <sub>2</sub> Br Perovskite Solar Cells	代表性论文 4 Adv. Energy Mater. 2020, 10, 2000691
5	论文合著	刘治科 (1) 杨少敏 (3) 段晨阳 (4)	202108	Unraveling Passivation Mechanism of Imidazolium- Based Ionic Liquids on Inorganic Perovskite to Achieve Near-Record- Efficiency CsPbI <sub>2</sub> Br Solar Cells	代表性论文 5 Nano-Micro Lett. 2022, 14, 7