

自然科学奖公示信息

一、项目名称

高性能钙钛矿光伏器件功能层设计及异质界面调控研究

二、提名者及提名意见

提名单位：陕西省教育厅

我单位认真审阅了该项目提名书及附件材料，确认全部材料真实有效，并按照要求对该项目的基本情况进行了公示，公示期间无异议。

该项目面向我国“双碳”战略目标以及能源结构转型的重大需求，围绕高性能钙钛矿光伏器件开展研究。针对钙钛矿光伏器件关键功能层设计及其异质界面调控等关键问题，创新性地提出氢键聚合物网络调控钙钛矿薄膜结晶及缺陷钝化策略，发展了高质量氧化物电荷传输层低温制备工艺，揭示了钙钛矿太阳能电池异质界面调控机理，最终实现了钙钛矿太阳能电池效率和稳定性的提升，多项器件指标达到同期国际领先水平。项目主要研究成果发表在钙钛矿太阳能电池领域国际一流期刊上，受到了国内外著名学者及研究机构的高度评价。项目研究成果对于提升钙钛矿光伏器件性能、推动其大规模应用具有重要意义。

根据《陕西省科学技术厅关于 2025 年度省科学技术奖提名工作的通知》，参照陕西省自然科学奖评定条件和评定标准，提名该项目参评陕西省自然科学一等奖。

三、项目简介

面对全球气候变化日益紧迫的挑战，我国将“双碳”目标确立为未来发展的关键战略导向，开发新型光伏技术是实现这一战略目标的重要途径。新型钙钛矿太阳能电池具有原材料及工艺成本低、理论效率高、柔性轻量化等特点，在光伏电站、光伏建筑一体化、可穿戴设备等领域具有广泛的应用前景。国家能源局、科学技术部发布的《“十四五”能源领域科技创新规划》中将高效钙钛矿电池制备与产业化生产技术列入太阳能发电及利用技术的重点任务。尽管钙钛矿太阳能电池在理论上、实验室中有相当大的优势，但在面向商业化时仍面临一些重大科学问题，主要表现在：1) 钙钛矿薄膜内部缺陷多，导致光生载流子复合，严重影响器件效率，同时缺陷诱导离子迁移还会影响器件稳定性；2) 氧化物电荷传输层

通常需要较高的退火温度以提升其电学性质，进而提高电荷提取和传输效率，但高温退火会影响氧化物表面形貌，增加工艺成本并限制柔性器件的应用；3）器件异质界面由于晶格失配会产生大量缺陷，缺陷作为复合中心导致电荷复合，界面能级失配会影响界面电荷提取效率，严重影响器件效率，同时界面处的离子迁移也会影响器件稳定性。

针对上述关键科学问题，项目组依托国家级研究平台，在国家自然科学基金、陕西省自然科学基金等项目支持下，经过十余年潜心探索，提出了钙钛矿薄膜结晶调控及缺陷钝化新策略，发展了高质量氧化物电荷传输层低温制备工艺，揭示了钙钛矿太阳能电池异质界面调控机理，最终实现了钙钛矿太阳能电池效率和稳定性的提升，多项器件指标达到同期国际领先水平。主要科学发现如下：

（1）氢键聚合物网络调控钙钛矿薄膜结晶及缺陷钝化策略：针对钙钛矿薄膜内部缺陷及结晶动力学问题，开发了一种富含氢键和羰基的自修复聚合物添加剂（PPG-mUPy-APDS）。该聚合物能与钙钛矿形成多种化学键合，有效地钝化钙钛矿薄膜中的缺陷，提升薄膜质量。聚合物掺杂的器件表现出最高 23.10 % 的效率和优异的空气稳定性。聚合物添加剂在钙钛矿薄膜中形成氢键网络，增强了柔性器件的机械稳定性。此外，聚合物网络可以与 Pb^{2+} 离子结合，固定铅原子，抑制铅泄露，降低钙钛矿太阳能电池的环境危害。

（2）低温溶液法制备高质量氧化物传输层：针对传统氧化物传输层工艺温度高的缺点，创新性地提出低温溶液法制备氧化物半导体作为传输层实现高效率稳定的钙钛矿太阳能电池。采用低温工艺制备 NiO_x 空穴传输层比传统高温工艺制备的 NiO_x 更加平整致密、导电性高，在反式平面结构钙钛矿太阳能电池中实现了 20% 以上的能量转换效率，为同期基于该结构的最高效率之一。将低温工艺制备 ZnO 电子传输层引入全无机钙钛矿太阳能电池，获得了均匀致密的高质量全无机钙钛矿薄膜及更优的界面接触，实现了 1.21 V 的高开路电压，为低温工艺制备氧化物半导体在钙钛矿太阳能电池中应用奠定了基础。

（3）无机缓冲层调控钙钛矿太阳能电池异质界面：针对氧化物与钙钛矿晶格参数和热膨胀系数不同所引起的晶格失配和界面应力的问题，提出在 NiO_x /钙钛矿界面引入 CsBr 缓冲层，有效缓解了界面晶格失配引起的界面应力，提升了界面电荷传输，从而抑制了钙钛矿太阳能电池界面电荷的非辐射复合。针对电荷传输

层/电极界面能级失配及稳定性问题，提出采用热蒸发在 Spiro-OMeTAD 和 Ag 电极之间引入 MoO_3 界面缓冲层，高功函数的 MoO_3 有效提升了界面空穴传输同时阻挡电子，抑制了界面处载流子的非辐射性复合。同时可以有效地阻挡空气中水氧等对于钙钛矿薄膜的侵蚀，阻挡了金属电极离子的扩散与钙钛矿发生反应，显著提升了全无机钙钛矿太阳电池的稳定性。

项目主要研究成果发表在钙钛矿太阳电池领域国际一流期刊上。5 篇代表性论文 SCI 他引总次数 710 次，**5 篇论文全部入选 ESI 高被引论文**。研究成果被 Nature Materials、Advanced Materials、Advanced Energy Materials 等本领域顶级刊物重点引用报道，并被 Materials Views China、X-Mol、学研资讯等网站及公众号进行报道转载。上述研究工作得到了包括钙钛矿太阳电池的发现者及奠基人、德国科学院院士、英国皇家科学院院士、中国科学院院士等多位著名学者及剑桥大学、麻省理工学院、瑞士洛桑联邦理工学院等国际顶尖研究机构专家的高度评价，认为我们的方法“可以有效钝化钙钛矿薄膜缺陷”、“可以在低温条件下制备高质量的氧化物传输层”、“可以有效降低界面应力”等。

本项目成果在 Science、Nature Energy、Joule 等本领域国际权威期刊上发表 SCI 论文 180 余篇，申请国家发明专利 45 项，授权 18 项，参与国际权威学术会议并做大会报告或邀请报告 30 余次，获邀在 Applied Physics Reviews、Nano-Micro Letters、Journal of Energy Chemistry 等撰写综述论文 6 篇，撰写专著 2 部。项目团队获批 1 项国家级人才项目，4 项省部级人才项目，5 项国家级/省级自然科学基金项目，培养博士研究生 15 名，硕士研究生 68 名，包含中国电子学会优秀博士学位论文获得者和中国电子教育学会优秀博士论文获得者 2 名，陕西省自然科学优秀学术论文获得者 1 名。项目团队推动相关研究成果与国家电投集团黄河上游水电开发有限责任公司等达成项目合作多项。

四、客观评价

科学发现点一：氢键聚合物网络调控钙钛矿薄膜结晶及缺陷钝化

代表性论文 1: 中国科学院院士褚君浩教授在其发表于 (Energy Environ. Sci., 2025, 18(2): 509-544.) 的综述文章中肯定了申请人的工作，指出“线性聚合物被用于覆盖重要的晶粒边界，**可以提高生长活化能**，使晶体生长缓慢，并提供有效的缺陷钝化，从而**减少非辐射复合**”。陈炜、徐保民、周欢萍等多位钙钛矿领域

知名学者联合撰写的综述文章 (*Mater. Futures*, 2024, 3(2): 022102.) 中赞扬了申请人的工作, 指出“Xu 等人报道的聚合物添加剂可以增强 **PSC 的空气稳定性和器件柔韧性**, 其聚集在晶粒边界和薄膜表面, 通过形成化学键来固定 Pb 离子”。国家杰出青年基金获得者葛子义教授在综述文章 (*Adv. Mater.*, 2024, 36(37): 2311473.) 中引用了代表性论文 1 的原图并大篇幅介绍了申请人的研究工作。

代表性论文 1 关于聚合物与钙钛矿的氢键相互作用的研究结论被欧洲科学院院士 Mohammad Khaja Nazeeruddin 教授 (*Adv. Funct. Mater.*, 2024, 34(30): 2314529.)、欧洲科学院外籍院士任广禹教授 (*Adv. Funct. Mater.*, 2025, 35(16): 2418798.)、东京大学 Takao Someya 教授 (*Science Advances*, 2024, 10(41): eadq5778.)、首尔大学 Tae-Woo Lee 教授 (*Nat. Commun.*, 2024, 15(1): 6245.) 以及上海交通大学韩礼元教授 (*Nat. Commun.*, 2025, 16(1): 5746.) 等多位钙钛矿太阳能电池领域的知名学者借鉴和引用。

科学发现点二：低温溶液法制备高性能氧化物电荷传输层

代表性论文 2：2023 年诺贝尔化学奖得主、美国国家科学院院士 Mounqi G. Bawendi 教授在综述文章 (*Nat. Rev. Methods Primers*, 2025, 5(1): 3. IF=50.1) 中正面引用了申请人的工作, 指出“NiO_x 的合成和制备影响器件性能。溶液法, 例如旋涂等, 可用于沉积 NiO_x”。德国科学院院士 Michael Grätzel 教授、英国皇家科学院院士 Richard H. Friend 教授在综述文章 (*Adv. Energy Mater.*, 2020, 10(13): 1903090.) 中高度评价和肯定了该工作的创新性和重要性, 认为“低温溶液自燃烧法制备的 NiO_x 空穴传输材料比高温溶胶凝胶法制备的 NiO_x 具有**更优的结晶质量**, 与钙钛矿活性层呈**更好的能级匹配**。低温工艺制备的器件表现出**高的能量转换效率和优异的空气稳定性**”。阿卜杜拉国王科技大学 Stefaan De Wolf 教授的综述文章 (*Adv. Mater.*, 2019, 31(25): 1900428.) 中基于 NiO_x 的钙钛矿太阳能电池的统计结果表明申请人的器件效率是**同期报道的最高值**。其在 (*Adv. Energy Mater.*, 2021, 11(40): 2101662.) 的文章中指出“溶液燃烧辅助沉积法有助于 NiO_x 广泛应用于各种光伏技术中的空穴传输层”。中国科学院院士刘忠范教授在 (*Nano Energy*, 2019, 60: 247-256) 的文章中采用了申请人报道的低温 NiO_x 以及钙钛矿制备工艺, 并获得了优异的器件性能。

代表性论文 4：钙钛矿太阳能电池的发现者 Tsutomu Miyasaka 教授在文章 (*ACS*

Energy Lett., 2020, 5(4): 1292-1299) 中高度评价申请人的工作, 指出: “**界面能级对准**和缺陷钝化对全无机钙钛矿太阳能电池的进一步发展**很重要**”。中国科学院院士褚君浩教授在综述文章 (Small, 2024, 20(26): 2400807.) 中赞同基于 ZnO 的改性在 PSC 应用中的多样化潜力。国家级人才刘生忠教授在综述文章 (Angew. Chem. Int. Ed., 2024, 136(29): e202405878.) 中肯定了申请人的工作, 指出: “晶格失配是由于衬底和其外延层之间的晶格常数差异引起的一种关键现象”。意大利帕维亚大学 Giulia Grancini 教授在国际顶级期刊 (Adv. Energy Mater., 2021, 11(23): 2100672.) 中正面引用和肯定申请人的相关工作, 并指出: “探索快速、一步、低温工艺制备平坦无孔洞、大晶粒的全无机钙钛矿薄膜是**非常重要的**”。

科学发现点三: 无机缓冲层调控钙钛矿太阳能电池异质界面

代表性论文 3: 英国剑桥大学 Samuel D. Stranks 教授在研究论文 (Nat. Mater., 2021, 20(10): 1337-1346.) 中肯定了界面应力的重要性, 指出: “衬底和钙钛矿薄膜间的晶格失配会产生一个拉伸或收缩的应力, 其取决于衬底和钙钛矿晶格参数。当晶格失配严重时, 钙钛矿结晶会在衬底上随意堆叠, 导致钙钛矿晶格扭曲严重”。欧洲科学院院士 Mohammad Khaja Nazeeruddin 教授在文章 (Adv. Mater., 2023, 35(31): 2211324.) 中重点介绍了申请人的工作, “Zhang 等人在 NiO_x 和钙钛矿层之间引入无机 CsBr 缓冲层, 以减轻晶格失配引起的界面应力。CsBr 缓冲层**优化了钙钛矿和 NiO_x 之间的界面, 减少了界面陷阱态, 促进了空穴提取注入**”。钙钛矿太阳能电池奠基人之一 Nam-Gyu Park 教授在文章 (Adv. Mater. Interfaces, 2023: 2300751.) 中赞扬申请人的工作, 指出 “为了减少晶格错配引起的界面缺陷, 在钙钛矿和 NiO 之间加入 CsBr 等作为界面层”。中国科学院院士黄维教授在综述文章 (Small, 2024, 20(6): 2307645. 和 J. Mater. Chem. C, 2022, 10(37): 13611-13645.) 中引用了代表性论文 3 的原图并着重介绍, 指出 “外部应力由基底和钙钛矿薄膜间的晶格失配引起”、“CsBr 处理**减轻晶格不匹配引起的界面应力, 界面缺陷密度大幅降低, 实现了空穴的快速提取/转移**”。

代表性论文 5: 钙钛矿太阳能电池的发现者 Tsutomu Miyasaka 教授在综述文章 (Energy Environ. Sci., 2022, 15(8): 3171-3222.) 中肯定了申请人的工作, 指出: “ MoO_3 薄层被引入 Spiro-OMeTAD 与 Ag 电极之间来降低 CsPbI_2Br 电池中的电压损失和载流子复合, MoO_3 更匹配的能级**促进空穴转移并且阻挡电子, 最大限**

度地减少阳极的电荷复合损失”。洛桑联邦理工学院 Wolfgang Tress 教授在综述性文章（Angew. Chem. Int. Ed., 2021, 60, 26440）中着重引用申请人的工作：“MoO₃ 界面缓冲层实现界面处能级匹配，有效地促进空穴从钙钛矿层到金属电极的界面传输。其高功函在界面处形成势垒层，阻碍界面电荷在金属界面处的非辐射性复合”。清华大学易陈谊教授在其发表于本领域国际权威期刊的研究文章（Nano Energy, 2022, 95: 107036.）中采用了申请人提出的 MoO₃ 界面缓冲层来调控界面功函数匹配，取得了器件效率的提升。

五、代表性论文专著目录

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	Perovskite Films Regulation via Hydrogen-Bonded Polymer Network for Efficient and Stable Perovskite Solar Cells	Angewandte Chemie-International Edition	Yumeng Xu, Xing Guo, Zhenhua Lin, Qingrui Wang, Jie Su, Jincheng Zhang, Yue Hao, Keke Yang, and Jingjing Chang	2023 年 62 卷 e202306229 页	2023 年 07 月 04 日	Keke Yang, Jingjing Chang	Yumeng Xu	徐雨萌 郭兴 林珍华 王庆瑞 苏杰 张进成 郝跃 杨科珂 常晶晶	132	SC I	是

2	High-Performance Planar Perovskite Solar Cells Using Low Temperature, Solution-Combustion-Based Nickel Oxide Hole Transporting Layer with Efficiency Exceeding 20%	Advanced Energy Materials	Ziye Liu, Jingjing Chang,Zh enhua Lin, Long Zhou, Zhou Yang, Dazheng Chen, Chunfu Zhang, Shengzhong (Frank) Liu, Yue Hao	2018年8卷1703432页	2018年7月5日	Jingjing Chang	Ziye Liu	刘子烨 常晶晶 林珍华 周龙 杨周 陈大正 张春福 刘生忠 郝跃	229	SCI	是
3	NiO/Perovskite Heterojunction Contact Engineering for Highly Efficient and Stable Perovskite Solar Cells	Advanced Science	Bingjuan Zhang, Jie Su, Xing Guo, Long Zhou, Zhenhua Lin, Liping Feng, Jincheng Zhang, Jingjing Chang,Yue Hao	2020年7卷1903044页	2020年4月17日	Zhenhua Lin,Jingjing Chang	Binjuan Zhang	张冰娟 苏杰 郭兴 周龙 林珍华 冯丽萍 张进成 常晶晶	171	SCI	是

4	Improve the Oxide/Perovskite Heterojunction Contact for Low Temperature High Efficiency and Stable All-inorganic CsPbI ₂ Br Perovskite Solar Cells	Nano Energy	Jing Ma, Jie Su, Zhenhua Lin, Long Zhou, Jian He, Jincheng Zhang, Shengzhong Liu, Jingjing Chang, Yue Hao	2020年67卷1042-41页	2020年1月9日	Jingjing Chang	Jing Ma	马靖 苏杰 林珍华 周龙 贺健 张进成 刘生忠 常晶晶 郝跃	73	SCI	是
5	Interface Engineering of Low Temperature Processed All-Inorganic CsPbI ₂ Br Perovskite Solar Cells toward PCE Exceeding 14 %	Nano Energy	Long Zhou, [#] Xing Guo, [#] Zhenhua Lin, Jing Ma, Jie Su, Zhaosheng Hu, Chunfu Zhang, Shengzhong (Frank) Liu, Jingjing Chang, and Yue Hao	2019年60卷583-590页	2019年6月4日	Zhenhua Lin, Jingjing Chang	Long Zhou, Xing Guo	周龙 郭兴 林珍华 马靖 苏杰 胡赵胜 张春福 刘生忠 常晶晶 郝跃	105	SCI	是
合 计									710		

六、主要完成人情况

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
常晶晶	1	柔性电子研究中心主任	教授	西安电子科技大学	西安电子科技大学	项目主要完成人之一,在重要科学发现 1、2、3 做出了创造性贡献。作为项目负责人参与该项目的方案设计及技术实现,提出了氢键聚合物网络调控策略、氧化物传输层低温制备方法、钙钛矿太阳能电池异质界面调控策略等。代表性论文 1、2、3、4、5 的通讯作者。
林珍华	2	无	教授	西安电子科技大学	西安电子科技大学	项目主要完成人之一,在重要科学发现 2、3 做出了创造性贡献,参与提出了氧化物传输层低温制备方法、钙钛矿太阳能电池异质界面调控策略等。代表性论文 3、5 的通讯作者。
郭兴	3	无	讲师	西安电子科技大学	西安电子科技大学	项目的主要完成人之一,在核心创新点 3 做出了创造性贡献。参与了聚合物调控钙钛矿薄膜及钙钛矿太阳能电池异质界面调控等相关的器件制备及表征工作。代表性论文 1、3 的参与者,代表性论文 5 的共同第一作者。
周龙	4	无	副教授	西安电子科技大学	西安电子科技大学	项目主要完成人之一,在重要科学发现 3 做出了创造性贡献。参与了氧化物传输层低温制备、钙钛矿太阳能电池异质界面调控等相关器件的制备和表征工作。代表性论文 4 的参与者,代表性论文 5 的第一作者。

苏杰	5	无	教授	西安电子科技大学	西安电子科技大学	项目主要完成人之一,在重要科学发现2、3做出了创造性贡献。参与了氧化物传输层、钙钛矿太阳能电池异质界面调控等相关的理论研究工作。代表性论文1、3、4、5的参与者。
徐雨萌	6	无	无	西安电子科技大学	西安电子科技大学	项目主要完成人之一,在重要科学发现1做出了创造性贡献。实施了氢键聚合物网络调控策略,参与了相关器件的制备及表征工作。代表性论文1的第一作者。

七、主要完成单位情况

单位名称	西安电子科技大学	排名	1
<p>对本项目主要学术贡献:</p> <p>该项目面向我国“双碳”战略目标以及能源结构转型的重大需求,围绕高性能钙钛矿光伏器件开展研究。针对钙钛矿光伏器件关键功能层设计及其异质界面调控等关键问题,创新性地提出氢键聚合物网络调控钙钛矿薄膜结晶及缺陷钝化策略,发展了高质量氧化物电荷传输层低温制备工艺,揭示了钙钛矿太阳能电池异质界面调控机理,最终实现了钙钛矿太阳能电池效率和稳定性的提升,多项器件指标达到同期国际领先水平。项目主要研究成果发表在钙钛矿太阳能电池领域国际一流期刊上,受到了国内外著名学者及研究机构的高度评价。项目研究成果对于提升钙钛矿光伏器件性能、推动其大规模应用具有重要意义。</p> <p>西安电子科技大学作为本项目第一完成单位,全面负责项目的总体规划、设计、实施与组织,为本项目提供了大力支持和充分保障,确保了项目的顺利进行。</p>			

八、完成人合作关系说明

项目第一完成人常晶晶、第二完成人林珍华均毕业于新加坡国立大学，之后又入职西安电子科技大学。共同提出了无机界面缓冲层调控钙钛矿太阳能电池氧化物/钙钛矿界面和传输层/电极界面，揭示了器件异质界面调控机理。作为共同通讯作者发表 2 篇学术论文，见代表性论文 3、5。

项目第三完成人郭兴在 2016 - 2021 年期间作为第一完成人常晶晶的博士生，于 2021 年 7 月加入第一完成人的研究团队。负责项目中氢键聚合物网络调控及无机界面缓冲层相关的器件制备和材料表征。以第一作者发表学术论文 1 篇，论文通讯作者为第一完成人常晶晶和第二完成人林珍华，见代表性论文 5。

项目第四完成人周龙在 2016 - 2021 年期间在第一完成人常晶晶的指导下攻读博士学位，2022 年起加入第一完成人的研究团队。负责项目中氧化物缓冲层调控异质界面相关的器件制备和材料表征工作。以第一作者发表学术论文 1 篇，论文通讯作者为第一完成人常晶晶和第二完成人林珍华，见代表性论文 5。

项目第五完成人苏杰于 2017 年 12 月加入第一完成人常晶晶的研究团队。负责项目中钙钛矿太阳能电池异质界面调控相关的理论计算工作。作为共同作者发表 4 篇学术论文，见代表性论文 1、3、4、5。

项目第六完成人徐雨萌在 2019 - 2025 年期间作为第一完成人常晶晶的博士生，参与了项目中聚合物网络调控相关的器件制备和材料表征工作。以第一作者发表学术论文 1 篇，论文通讯作者为第一完成人常晶晶，见代表性论文 1。

完成人合作关系情况汇总表

序号	合作方式	合作者/项目排名	合作起始时间	合作完成时间	合作成果	证明材料
1	论文合著	常晶晶/1 林珍华/2 郭兴/3 周龙/4 苏杰/5 徐雨萌/6	2019.09	2023.07	Perovskite Films Regulation via Hydrogen-Bonded Polymer Network for Efficient and Stable Perovskite Solar Cells	代表性论文 1
2	论文合著	常晶晶/1 林珍华/2 周龙/4	2016.09	2018.07	High-Performance Planar Perovskite Solar Cells Using Low Temperature, Solution-Combustion-Based Nickel Oxide Hole Transporting Layer with Efficiency Exceeding 20%	代表性论文 2
3	论文合著	常晶晶/1 林珍华/2 郭兴/3 周龙/4 苏杰/5	2016.09	2020.04	NiO/Perovskite Heterojunction Contact Engineering for Highly Efficient and Stable Perovskite Solar Cells	代表性论文 3
4	论文合著	常晶晶/1 林珍华/2 周龙/4 苏杰/5	2016.09	2019.10	Improve the oxide/perovskite heterojunction contact for low temperature high efficiency and stable all-inorganic CsPbI ₂ Br perovskite solar cells	代表性论文 4
5	论文合著	常晶晶/1 林珍华/2 郭兴/3 周龙/4 苏杰/5	2016.09	2019.03	Interface engineering of low temperature processed all-inorganic CsPbI ₂ Br perovskite solar cells toward PCE exceeding 14%	代表性论文 5

