

## 编者按

以清洁低碳、安全高效作为底色的新一轮能源革命悄然到来。如何更好地获取清洁低碳能源并实现高效利用,是当前人类面临的重大挑战。能够高效实现

光电互相转换的光电材料,吸引了全球科学家的目光。自2011年以来,中国科学家在国家自然科学基金重大研究计划“面向能源的光电转换材料”的

持续支持下开展系列科研攻关,在理论和实验的源头创新上同时发力,在有机发光二极管、有机光伏材料及无机光电材料等方面取得了丰硕成果,提高了我国在该领域的国际影响力。

## 追光“换”电,助力能源革命

——记国家自然科学基金重大研究计划“面向能源的光电转换材料”

在能源与环境问题成为人类所面临的重大挑战的今天,以清洁低碳、安全高效为关键的新一轮能源革命悄然到来。如何更好地获取清洁低碳能源并实现高效利用,是亟待解决的难题。能够实现高效光电互相转换的光电材料,吸引了全球科学家的目光。

2011年,国家自然科学基金委员会(以下简称自然科学基金委)启动“面向能源的光电转换材料”重大研究计划(以下简称重大研究计划)。在项目执行期,重大研究计划在理论和实验的源头创新上实现了突破,取得了多项高水平研究成果,提高了我国在光电材料与器件研究领域的整体创新能力和国际影响力。

“要敢于尝试由重大战略目标牵引的探索研究,更要把科学研究聚焦到国家重大战略和人类生存的迫切需求上。”该重大研究计划指导专家组组长、中国科学院院士许宁生接受《中国科学报》采访时表示,这是整个研究计划的首要“主张”。

## 酝酿:十年又十年

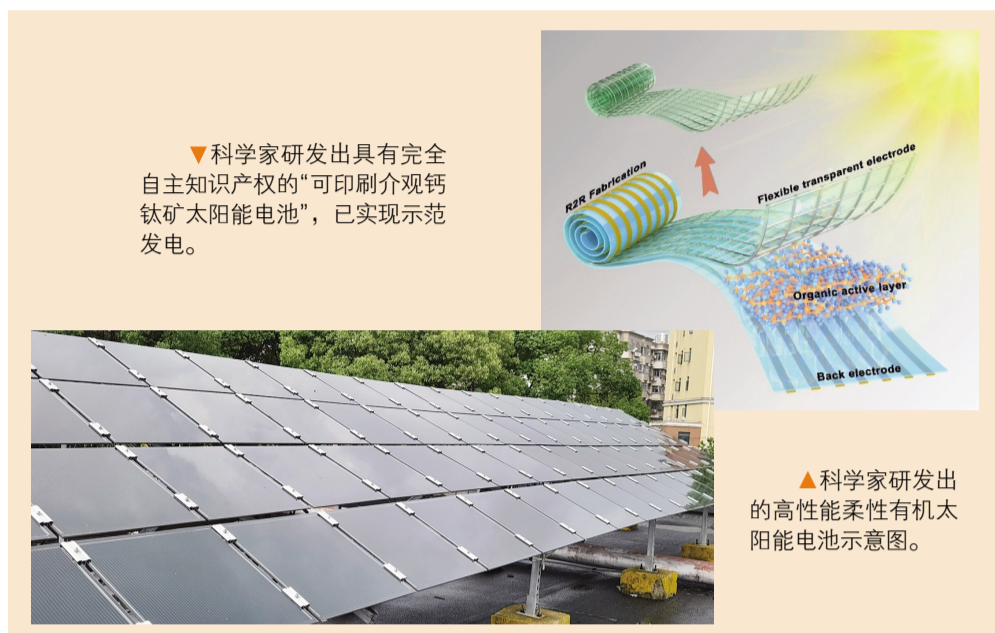
光电材料与器件的开发是科学前沿难题,但其成功研发能造福人类。

太阳能电池、电子显示屏等生活中随处可见的设备都是光电材料的实际应用。鉴于这种材料的重要性,国际上不少发达国家和地区对太阳能电池与半导体照明材料和器件的研究给予了长期支持。

20世纪90年代末,许宁生作为年轻科学家受邀参加“光电信息功能材料”相关项目的重要性与可行性论证研讨,有机会学习老一辈科学家和同行们在重要科学前沿不断进取的精神。很快,科学家们在科学问题上达成共识,并于2001年启动了“光电信息功能材料”重大研究计划。这是自然科学基金委启动的首个重大研究计划。

依托“光电信息功能材料”重大研究计划,我国搭建起一个以“光电信息功能材料”为中心的学科交叉研究平台,研发获得一批拥有自主知识产权的光电材料和技术,稳定支持了具有创新意识、活跃思维的中青年人才队伍,为发展拥有自主核心技术的产业提供了技术、知识和人才储备。

“这一重大研究计划持续资助了8年,使我国在该领域具备了一定的研究基础,但总体上还是呈‘跟跑’状态。”许宁生告诉《中国科学报》,当时,指导专家组一致认为,科学家们还得继续干。大约从2008年开始,新一轮重大研究计划



▼科学家研发出具有完全自主知识产权的“可印刷观钙钛矿太阳能电池”,已实现示范发电。

▲科学家研发出高性能柔性有机太阳能电池示意图。

划进入“酝酿期”。科学家们注意到时代发展带来的新变化:由于燃煤发电给城市带来了严重的环境污染问题,热电厂从城市迁出;化石能源燃烧导致温室气体排放,加速全球变暖,清洁低碳能源成为人类可持续发展的必然选择;能源消费结构正在发生变化,例如大面积的太阳能电池发电应用越来越多。总之,能源与环境问题越来越严峻,如何发展清洁能源成为人类社会面临的重大挑战。

“我们要把光电材料的科学研究聚焦到国家重大战略和人类生存的迫切需求上来。”许宁生这样说。这一理念得到了同行一致赞同。

经过两年多的研讨论证,2011年,自然科学基金委启动了“面向能源的光电转换材料”重大研究计划,由许宁生等科学家组成专家团队。从前辈科学家手中接过“接力棒”,聚焦能源领域,助力国家把能源安全牢牢掌握在自己手中。

如今,团队科学家们欣喜地看到,当年的这一研究布局极具前瞻性,为我国实现“双碳”目标奠定了坚实基础。

## 难题:光与电的转换效率

太阳能取之不尽,用之不竭,是储量最大的清洁能源。太阳能电池发电是利用太阳能电池将太

阳光能直接转化为电能的技术。“发电更光伏,发光更省电。”这是许宁生一直以来的理念,也是期待。

根据国家发展改革委能源研究所预测,2050年光伏发电将成为我国第一大电力来源,占当年全国用电量的40%左右,2021年这一数字仅为4%。然而,光电转换效率是太阳能光伏应用的瓶颈之一。

光电材料主要包括两大类,即实现太阳能高效获取的光伏材料和实现能源高效利用的发光与照明材料,这恰好对应着能源的“开源”和“节流”两个方面。开源,即获取能源;节流,即高效利用能源。事实上,当前世界各国正从这两方面推动新一轮能源变革。

在能源获取方面,太阳能光伏逐渐成为世界能源供应的重要组成部分,开发低成本、环境友好、资源丰富、光伏电池是太阳能光伏的目标;在能源高效利用方面,开发绿色环保、长寿命和节能的半导体照明技术,是实现节能降耗、保护环境的重要途径。

“核心难题是光电转换效率。”许宁生告诉《中国科学报》,一方面是如何提高太阳能转化为电能效率,另一方面是如何提高电能转化为光能的效率,而解决这两个难题,依赖于光电材料这个媒介。

难题摆在面前,不同学科背景的专家多次研讨凝练,提出了重大研究计划的总体科学目

标:瞄准学科前沿,面向当前的能源短缺和环境污染等重大战略问题,以高效光-电和电-光转换为核心,以材料设计和制备为基础,解决高性能光电转换材料与器件制备方面的关键科学与技术问题,在理论和实验的源头创新上取得突破,提高了我国在光电材料与器件研究领域的整体创新能力和国际影响力。

同时,该重大研究计划聚焦三大关键科学问题:光-电/电-光转换基本过程与新原理,高效、稳定光电转换材料的理性设计与可控制备,以及光电材料与器件中的结构和表界面设计与调控。

## 突破:用之于民的科学研究

“基础研究和应用基础研究一定要扎实,研究成果要能实现转化,只有转化才能对社会有贡献,老百姓才能受益。”许宁生说。

10余年来,科学家们努力攻关,取得了一系列具有国际影响力的重大突破和原创性成果,在光伏和发光领域的若干方向上实现了从“跟跑”到“领跑”的跨越式发展,部分领域长期引领国际前沿和发展方向,极大提高了我国在这些领域的整体创新能力和国际影响力,为我国能源光电材料产业的发展升级提供了理论支撑和技术储备。

例如,我国学者原创设计新型有机光伏材料体系,将国际有机光伏领域全面引入“小分子受体”时代,频繁刷新有机光伏电池效率大于19%的世界纪录;创造了热活化延迟荧光(TADF)材料红、蓝、绿光有机发光半导体性能的世界纪录;提出的稳定性提升策略推动了我国在钙钛矿光伏稳定性方面达到国际先进水平;阐明量子点发光机制,创造了量子点发光二极管(QLED)性能的世界纪录,夯实了QLED的科学基础……

在理论创新、材料制备、器件设计的研究基础上,科学家们还取得了成果转化的多项突破。开发的理论模拟和材料性能预测的商业化软件,被国内外几十家国际知名公司和学术机构采购;有机光伏成果开始转化,初步建成5000平方米中试产线,相关产品实现销售额数千万元等。

丰硕的研究成果远超预期,这给科学家们带来极大的信心。

接受《中国科学报》采访时,许宁生谈到了重大研究计划的第二个“主张”,即把国家战略目标与重大科学问题研究紧密结合在一起。他表示,重大研究计划在实施过程中一直坚持探索如何

做好这一点。

在重大研究计划实施过程中,科研工作者们胸怀祖国、服务人民、潜心研究,提出了光伏前沿领域系列理论,实现了多种材料和器件的性能突破,努力为社会发展作贡献。

## 合作:有组织科研与自由探索结合

光电材料是多学科交叉的前沿,涉及材料、化学、物理、电子、数学、生物等学科,合作是必须的。

“尽管有自由探索,但自由不是漫无边际。整体上,我们开展有组织的重大科学问题的研究。”许宁生表示,在重大研究计划执行期间,他们有意地探索了“有组织的科研组织”模式。

“有组织的科研组织”推动了多学科深度融合集成创新:有机合成化学、高分子科学与材料学的交叉融合;凝聚态物理学、半导体物理学与新兴的有机半导体科学的交叉融合;物理建模与化学结构模拟的交叉融合;半导体器件物理和新兴的印刷电子学的交叉融合。

科研不止,创新无尽。谈及未来计划,许宁生已有思考,光电转换的效率还需要进一步在理论上突破,技术上要抓住不同性能材料形成的“结”这个“牛鼻子”,合成更多新材料。这里的“结”可以通俗理解为在微纳尺度上将不同电子结构的材料拼在一起形成的界面,材料之间会发生相互作用,并产生单一材料所不具备的新性质。例如,半导体的“PN结”,即P型半导体过渡到N型半导体的交界面。同时,工程上要做大面积、更柔性的太阳能电池板;经济上要更便宜,才能更好地推进产业应用。

此外,值得一提的是,为保证项目评审客观公正,避免“干扰杂音”,重大研究计划也做出了创新探索和协同努力:在评审机制保障上,根据指导专家组和管理工作组的职责,建立了分工不同、相互协调、相互制约的有序工作关系,会议评审采取听取答辩的方式,资助项目须获得半数以上赞成票,集成项目会评投票采取记名投票。

在项目管理上,指导专家组对重大研究计划项目实施动态管理并进行学术指导,不定期组织部分项目专题研讨,选择有突出进展或存在问题的项目进行实地考察。同时,指导专家组可中止实施过程中存在严重问题的项目。此外,年度学术交流活动,有助于做好战略调研与规划,既可交流学术,也可相互监督,保障公平性。

## 基于新原理的高性能有机发光材料研发成功

有机发光二极管(OLED)是新一代信息显示技术,具有低能耗、柔性轻薄、超感官体验等优势,可满足丰富的场景化应用,为可穿戴、车载、教育、医疗等智能终端提供了新的可能。

在国家自然科学基金重大研究计划“面向能源的光电转换材料”支持下,科学家提出了突破现有发光理论框架的新发光机制,制备出大面积柔性白光OLED照明器件,在国际上首次实现了晶圆级有机半导体单晶制备。

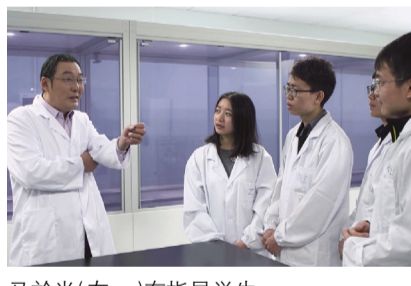
高效率OLED是提升能源利用效率,实现绿色低碳及实施“双碳”战略的重要助力。当前,在有机半导体发光材料体系发展中,第二代磷光材料和第三代TADF材料的核心技术专利均被日本、美国、德国等外国公司所掌握,关键的OLED发光材料及器件制备设备的国产化程度还很低。

中国科学院院士、华南理工大学教授马於光表示,应当首先探索新发光原理、发展新研究方法,并基于此开发系列新材料,从源头上创新,突破国外核心专利壁垒。

科研人员突破现有物理理论框架,利用“高能反系间穿越”的原理,实现100%单线态激子发光的“热激子”机制,研制出拥有自主知识产权的有机发光材料新体系,为新一代低成本白光材料的设计制备提供了全新路径。

基础研究促进产业发展。基于该机制的热激子蓝光材料在主要性能上优于现有产线材料,已开始在京东方、华星光电等企业开展产线上验证,并成立东莞伏安光电科技有限公司推进量产应用。

同时,他们发现一类全新的高稳定性、高光效率自由基发光材料体系。其具有双线态特征,从而在源头



马於光(左一)在指导学生。

上规避了暗态(T)的形成,并由此提出了“自由基双线态发光”这一全新原理。基于此类材料设计的新器件在性能上取得重大突破,是当时报道中效率最高的红光材料。

科研人员发现了激活T的聚集态结构及室温磷光材料,建立和发展了室温磷光的理论模型,引领了纯有机室温磷光研究方向。

此外,科研人员还提出了“H聚集态三线态激子”的分子设计策略,实现纯有机分子三线态激子的高效利用,开发出单一有机晶体材料下的多彩长余辉显示,创制出首例多彩有机“夜明珠”。

白光OLED作为新一代固体照明光源,具有高效、绿色环保、面光源、发光均匀、光线柔和、色温可调、低成本、大面积、可实现柔性化等优点。然而,高效率、大面积、柔性白光OLED照明器件集成是发展白光OLED照明器件面临的挑战。

对此,科研人员通过合作攻关,研制出大面积、高导电率、高透光性的银柔性透明电极,实现了纳米尺度的光学耦合调控,最终将柔性透明电极与光学器件耦合集成,获得了创纪录的高效率白光照明器件。

## 高效有机光伏材料与器件成功制备

有机太阳能电池利用有机半导体光伏活性材料实现太阳能向电能转化利用,是具有重要应用潜力的新型光伏技术,包含大量的基础科学与技术问题,也是国际竞争最为激烈的研究前沿之一。

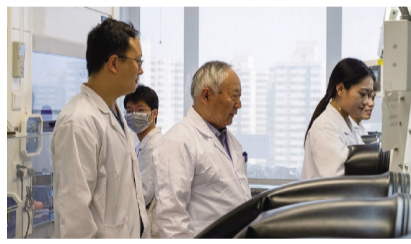
其中,给体、受体光伏材料和电极界面修饰层材料是有机太阳能电池的关键材料,而如何提升光-电能量转换效率是材料研究的核心问题。

在国家自然科学基金重大研究计划“面向能源的光电转换材料”支持下,我国科学家设计合成了系列新型高效有机光伏材料,制备了高效有机太阳能电池器件。

中国科学院院士、中国科学院化学研究所研究员李永航表示,研发新型电子受体材料以及与之匹配的新型聚合物电子给体材料,优化相应活性层形貌,从而提升器件光伏性能,是该领域的迫切需求。重大研究计划立项之初,富勒烯衍生物在有机受体光伏材料中占有支配性地位。但是,这类受体材料的光吸收性能较差、电子能级难以调控、能量损失大,这导致有机太阳能电池的能量转换效率最高只能达到12%。

为攻克富勒烯衍生物受体存在的问题,我国科研人员于2015年原创开发了具有稠环给电子(D)中心单元和强吸电子(A)末端的A-D-A型有机小分子受体光伏材料。这类受体材料具有窄带隙、宽吸收、合适的电子能级和易加工制备等突出优点。基于这类小分子受体和宽带隙聚合物给体材料的有机太阳能电池能量转换效率达到了11%~14%的水平。

在此基础上,科研人员进一步合成了A-DA'D-A结构的新型小分子受体光伏材料,尤其是以苯并噻二唑为A'单元的受体Y6,吸收边红移至900多纳米,还具有合适的电子能级、强的聚集性能、低的激子束缚能。基于Y6及其衍生物受体的有机太



李永航(前排左二)和器件制备的科研人员进行讨论。

阳能电池的能量转换效率已从2019年报道的15.7%迅速提升至最近的超过19%,达到了可以向实际应用发展的水平。这类新型窄带隙有机小分子受体光伏材料得到了国际同行的普遍认可,并被广泛使用,引领和推动了有机光伏领域的发展。

此外,开发与窄带隙受体匹配的高效聚合物给体光伏材料对提升有机太阳能电池的能量转换效率十分重要。科研人员原创设计了多种基于噻吩吩吡咯侧链的苯并噻吩给体光伏材料,与受体高度匹配,获得了优异的有机光伏性能。尤其值得一提的是,2018年报道的具有简单结构的低成本聚合物给体PTQ10,其二元有机太阳能电池的能量转换效率超过18.5%,三元器件的能量转换效率超过19%。

基于聚合物给体和聚合物受体的全聚合物太阳能电池具有成膜性好、柔韧性好和稳定性好的突出优点。然而,早期的全聚合物太阳能电池由于缺少高效的聚合物受体,效率较低。2017年,科研人员提出了窄带隙小分子受体高分子化的策略,基于A-D-A型和A-DA'D-A型小分子受体材料制备了高效聚合物受体光伏材料,尤其是基于A-DA'D-A型小分子受体的聚合物受体光伏材料,使全聚合物太阳能电池的能量转换效率超过18%。

## 科学家制备出新一代无机光电关键材料

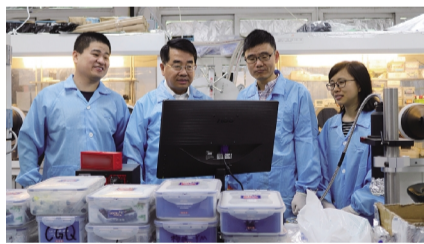
新一代无机光电材料具有低成本、高性能的优势,在光伏发电及柔性显示与照明领域应用潜力巨大。在国家自然科学基金重大研究计划“面向能源的光电转换材料”支持下,科学家基于溶液法制备出新型无机光电材料,并探索新机制、新结构,实现高效、稳定、可大面积制备的光电器件。

钙钛矿是新兴的变革性光伏材料来源,避免了由湿法工艺带来的材料晶体质量低、缺陷密度大的问题。在专家们看来,获得高稳定、高效率、大面积器件是钙钛矿光伏产业化的关键。科研人员提出了新原理、新工艺、新器件结构,多次实现器件性能重大突破,使我国钙钛矿光伏在稳定性与效率方面均处于世界先进水平。

科研人员提出了钙钛矿材料的取向生长及缺陷钝化方法,实现了组分、相态、维度、生长过程、缺陷密度以及半导体特性的调控;通过调控钙钛矿材料的半导体性质,创造了反式结构钙钛矿光伏器件效率的世界纪录;基于循环“氧化还原修复”的策略,实现缺陷的可循环修复,极大延长了铅卤钙钛矿材料及器件在工况条件下的本征稳定性。

同时,科研人员还研制出基于印刷工艺及低成本原材料的空穴传输材料型可印刷钙钛矿太阳能电池,大大提升了钙钛矿电池的稳定性。

南京工业大学教授王建浦表示,当前发展发光二极管(LED)器



王建浦(右二)和同事们探讨研究亚微米尺度的散点型钙钛矿薄膜。

件面临的挑战是厘清材料维度与性能的构效关系,制备低缺陷、高发光产率薄膜,实现高效、稳定的发光器件。

对此,科研人员提出了材料维度调控与自发形成微结构的光场调控等研究思路,多次刷新器件性能纪录,使我国在钙钛矿LED领域长期领跑世界。科研人员利用添加剂自组装形成低缺陷、亚微米结构的钙钛矿薄膜,提高了器件光提取效率,刷新了钙钛矿LED效率的世界纪录。

此外,量子点是人类迄今发现最好的发光材料之一,基于量子点的电发光则是下一代显示技术的未来之星。针对现存的技术瓶颈难题,科研人员提出“量子点激发态合成控制”和“适配体”模型,解决了量子点墨水稳定性难题,制备了可满足大屏幕应用需求的高稳定量子点发光二极管(QLED)原型器件。如今,量子点激发态合成控制技术成果已全面实现转化,建成了全球最大的量子点材料生产基地,总销售额超过3亿元。

(本版文章由本报记者杨海周采访,图片均由研究团队提供)