

中国科学院大连化学物理研究所

优秀博士后支持计划申请表

申请人: 蒋晓庆

研究组: 503组

学科专业: 物理化学

合作导师: 李灿

填表日期: 2019年5月1日

中国科学院大连化学物理研究所制

姓名	蒋晓庆		性别	男
出生日期	1988. 1. 5		民族	汉
学历/学位	博士		专业技术职务	博士后
毕业院校	大连理工大学		专业	精细化工
(拟) 进站时间	2019. 3. 7		进站性质	<input type="checkbox"/> 统招统分 <input type="checkbox"/> 在职人员
学习 简历	起止年月	所在单位/专业		所获学位
	2015. 9-2019. 3	大连理工大学		博士
	2012. 9-2015. 6	华东理工大学		硕士
	2008. 9-2012. 6	青岛大学		学士
工作 经历	起止年月	所在单位		职务
	2019. 3-至今	中科院大连化学物理研究所		博士后
博士 学位 论文 摘要	博士论文题目	新型铜酞菁衍生物空穴传输材料在钙钛矿太阳能电池中的应用		
	指导教师姓名	孙立成		
	<p>(限 800 字)</p> <p>有机无机杂化钙钛矿太阳能电池的效率在 10 年内，由最初 3.8% 上升到现在认证的 23.3%，引起了各国科学家的广泛关注和研究。从性能上看，有机无机杂化钙钛矿薄膜具有载流子迁移速率高、扩散距离长、摩尔消光系数高及光谱吸收宽等优点。从制备工艺和成本上看，它具有工艺简单、生产成本低等优势。因此，钙钛矿太阳能电池是第三代太阳能电池中的佼佼者。但是钙钛矿器件仍然有一些明显缺点制约着钙钛矿电池工业化的发展。例如：钙钛矿薄膜本身对水、热、光不稳定，还有作为电池重要组成部分的空穴传输材料的合成工艺复杂、稳定性差、成本过高以及对电极使用的贵金属价格昂贵等问题。</p> <p>因此，探索研究合成工艺简单、成本低廉，稳定性好的新型空穴传输材料以取代昂贵、不稳定的 Spiro-OMeTAD 等空穴传输材料具有重要意义。</p> <p>本文将正丁基苯氧基团和正丁氧基苯氧基团两种不同的基团修饰在铜酞菁的分子上，得到了两种全新的铜酞菁衍生物 CuPc-Bu 和 CuPc-OBu，通过研究不同取代基团对铜酞菁分子的分子堆积和界面堆积的影响发现 CuPc-OBu 的分子间的 H 堆积和分子与界面间的 face-on 堆积有利于电荷的传导。再结合界面工程将 2D 钙钛矿材料修饰到 3D 钙钛矿材料上，利用 2D 钙钛矿的宽能带抑制界面电子的复合。CuPc-OBu 材料本身具有疏水性，从而提高了钙钛矿电池器件整体的稳定性。基于非掺杂的 CuPc-OBu 为空穴传输材料的钙钛矿太阳能电池获得的光电转换效率为 17.6%。</p>			
1、主持或参与项目情况：				

入站前期科研情况简介	序号	项目名称	项目来源	项目金额	起止年度	角色
	1	基于功能化空穴传输材料的高效稳定的钙钛矿电池的研究	国家自然科学基金	266万元	2017.1.1	参与
	2	无机空穴传输材料碘化亚铜的新型制备方法在钙钛矿太阳能电池中的	国家自然科学基金	20万元	2017.1.1	参与
	2、论文发表情况：（已发表或已接收发表）					
	序号	论文题目	期刊名	影响因子	发表年度/卷期/页码	排序
	1	Molecular Engineering of Copper (II) Phthalocyanines: A Strategy in Developing Dopant-Free Hole-Transporting Materials for Efficient and Ambient-Stable Perovskite Solar	Advanced Energy Materials	21.80	2018/ 1803287/1-9	1
	2	High-Performance and Stable Mesoporous Perovskite Solar Cells via Well-Crystallized FA0.85MA0.15Pb(I0.8Br0.2)3	ACS Applied Materials & Interfaces	8.10	2018/11/ 2989–2996	1
	3	A solution-processable copper(II) phthalocyanine derivative as a dopant-free hole-transporting material for efficient and Stable carbon counter electrode-based perovskite solar cells	Journal of Materials Chemistry A	9.93	2017/ 5/17862-17866	1
4	Interfacial Engineering of Perovskite Solar Cells by Employing a Hydrophobic Copper Phthalocyanine Derivative as Hole - Transporting Material with Improved Performance and Stability	ChemSusChem	7.40	2017/10/1838– 845	1	
5	A cucurbit[5]uril analogue from dimethylpropanediurea–formaldehyde condensation	Chemical Communications	6.30	2015/51/2890-2892	1	
6	High-Performance Regular Perovskite Solar Cells Employing Low-Cost Poly(ethylenedioxythiophene) as a Hole-Transporting Material	Scientific reports	4.10	2017/7/42564	1	

7	Improved Performance and Air Stability of Perovskite Solar Cells Based on Low-Cost Organic Hole-Transporting Material X60 by Incorporating Its Dicationic Salt	Science China Chemistry	4.40	2017/61/ 172–179	1
8	Efficient perovskite solar cells employing a solution-processable copper phthalocyanine as a hole-transporting material	Science China Chemistry	4.40	2017/60/ 423–430	1
3、专利情况：					
序号	专利名称	授权/申请	授权/申请号	起始日期	排序
4、获奖情况：					
序号	奖励名称	奖励等级	授奖单位	奖励年度	排序
1	2019 届辽宁省优秀毕业生	省级	辽宁省教育厅	2018	1
2	博士研究生国家奖学金	校级	大连理工大学	2017	1
3	大连理工大学优秀研究生	校级	大连理工大学	2017	1
博士后研究题目：基于功能化双季铵盐修饰的高效稳定钙钛矿太阳能电池的探究					

(简述研究计划的可行性、先进性和创新性，理论和现实意义)

可行性分析

1. 理论意义:

有机-无机杂化钙钛矿太阳能电池自从2009年被研究以来,已经取得了突飞猛进的进步,其最高光电转换效率已达到23.7%。钙钛矿材料有着优异的吸光范围、较高的光电转换效率、较高的电荷迁移率等优点,适合作为光敏层应用到太阳能电池上。但是钙钛矿电池的缺点也是很明显的,在自然环境下容易分解,从而影响器件长期的稳定性。其中一个重要原因是组成钙钛矿电池核心的钙钛矿材料晶界面积较大,这样就会导致水分子、氧分子通过晶界进入钙钛矿内部破坏钙钛矿材料的结构,从而导致电池器件稳定性下降。为了解决这个问题可以利用两端都带有功能基团的材料将钙钛矿晶界缝合起来。根据季铵盐可以与碘化铅反应的原理,所以它就是可以通过与钙钛矿晶界处未配位的碘化铅反应而将钙钛矿晶粒缝合的合理功能基团。本计划设计合成含有双季铵盐的功能化材料就是解决这个问题的理想材料。这样双季铵盐材料中间疏水性的桥段还可以用来阻挡水分子、氧分子通过晶界进入钙钛矿内部破坏钙钛矿材料的结构,从而提高电池器件的稳定性。

2. 先进性、创新性:

本课题通过双季铵盐修饰与钙钛矿晶粒间未配位的碘化铅反应将钙钛矿晶粒的缝隙进行缝合,利用双季铵盐中间疏水性的桥段来阻挡水分子、氧分子通过晶界进入钙钛矿内部破坏钙钛矿材料的结构,对提升钙钛矿电池器件长期耐热耐湿性具有重要意义。

本课题通过双季铵盐修饰不仅可以钝化钙钛矿界面缺陷态,而且可以通过分子工程在双季铵盐的桥段上修饰利于空穴传输的三苯胺基团和利于电子传输的萘酰亚胺基团来减少电荷在钙钛矿晶界面的传输的损失,对提升钙钛矿材料整体的光电转化效率具有指导意义。

3. 可行性分析:

基于申请人和研究团队报道的工作的基础上拟合成的烷基链、三苯胺、萘二酰亚胺等功能化双季铵盐具有合成路线成熟、合成步骤简短的特点,所以在合成上是可行的。

根据功能化双季铵盐上的功能基团季铵盐可以与钙钛矿晶粒界面未配对的碘化铅反应,所以将功能化的季铵盐修饰到钙钛矿晶界是可行的。

功能化双季铵盐可以将晶界缝合起来以减少外界水分子和氧分子通过钙钛矿晶界处进入钙钛矿内部对钙钛矿材料进行破坏。所以用功能化双季铵盐提高器件长期耐

热耐湿性能是可行的。双季铵盐修饰钙钛矿界面还可以钝化钙钛矿晶界处的缺陷态减少电荷在晶界传输过程中的能量损失,所以用功能化双季铵盐来提升器件的光电转化性能是可行的。

4. 现实意义:

石油、煤、天然气等化石能源给人类赖以生存的环境造成了巨大的破坏。为了解决发展和环境保护的均衡问题,人类提出了可持续发展战略。具体到能源领域就是发展可再生绿色能源。

地球上所有的生命活动都离不开太阳能,太阳每秒辐射到地球上的能量当于 5.9×10^6 吨煤燃烧产生的能量。所以如何合理地开发和利用太阳能就成为人类研究的重点。根据《BP世界能源统计年鉴》2017版的能源分析报告,中国已经是全球最大的能源消费国,巨大的能源需求同时带来巨大的环境问题,甚至是经济安全问题。

