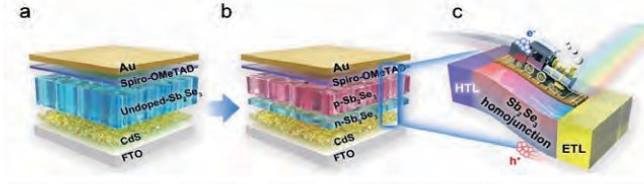


中国科大提出钙基太阳能电池内嵌同质结构设计制备方法

本报讯 近日，中国科大化学与材料科学学院陈涛教授研究组在钙基薄膜光伏领域取得重要研究进展。研究小组围绕Sb₂Se₃太阳能电池开路电压损失严重这一关键瓶颈问题，提出了一种基于成分调控的载流子极性控制策略，在Sb₂Se₃吸收层内部构建p-n同质结构，显著增强器件内建电场并有效抑制非辐射复合，实现了器件性能的协同提升。相关成果发表在《自然·光子学》杂志上。

Sb₂Se₃作为一种新兴的薄膜光伏材料，具有近理想带隙(1.1-1.3eV)、高吸收系数以及优异的热稳定性和化学稳定性，被认为是极具潜力的下一代光伏吸收层材料。然而，目前器件效率仍落后于CdTe和Cu(In,Ga)Se₂等成熟技术，其中开路电压损失大是制约其性能提升的核心问题。这主要源于器件内部内建电场较弱，难以提供足够的载流子分离驱动力，同时吸收层存在界面缺陷，导致严重的非辐射复合损失。

针对上述问题，研究团队发展了一种成分驱动的内建电场调控策略，通过在热蒸发过程中精确调控Se与Sb的化学势，实现了Sb₂Se₃薄膜导电类型在n型与p型之间的可控转变，并获得了超



过10¹⁹cm⁻³的载流子浓度。在此基础上，团队采用顺序沉积方法，在吸收层内部构建了n型/p型Sb₂Se₃同质结构。该内部同质结构在器件中引入额外内建电场，拓宽耗尽区宽度，从而显著增强载流子分离能力，并有效降低缺陷态密度，抑制非辐射复合过程。

进一步地，研究团队结合密度泛函理论计算、超快光谱表征以及深度分辨模拟，对载流子动力学行为进行了系统研究。结果表明，该同质结构在吸收层内部形成额外的内建电势梯度，显著加快载流子传输过程，并将复合损失降低超过一个数量级，从机理层面揭示了器件性能提升的内在原因。

基于上述结构设计，研究团队成功制备出

高性能Sb₂Se₃太阳能电池，实现了10.15%的光电转换效率，并获得0.459V的超低开路电压损失，达到了该体系的先进水平。该工作从载流子极性调控与内部结构设计工程出发，为解决Sb₂Se₃太阳能电池电压损失问题提供了一条全新路径，也为钙基硫族化合物光伏材料的性能优化与器件设计提供了重要参考。

我在校化学与材料科学学院博士生杨俊杰、硕士生李健宇、博士生蔡志远，以及合肥微尺度物质科学国家研究中心盛淑伟完成了论文的核心理论工作。化学与材料科学学院陈涛教授、唐荣凤博士（现合肥工业大学教授）为论文共同通讯作者。（化学与材料科学学院 科研部）

中国科大发展半透明钙钛矿太阳能电池高效界面调控与热管理新方法

本报讯 中国科大工程科学学院热科学和能源工程系李桂强教授团队联合香港城市大学叶轩立教授，在半透明钙钛矿太阳能电池界面调控与热管理研究中取得新进展。团队借鉴药物化学中的“药效团”设计思想，提出一种用于半透明钙钛矿太阳能电池的界面分子设计策略，实现了在电荷提取与热耗散的协同优化，在保证较高透光率的同时显著提升了器件效率与稳定性。相关成果发表在《先进功能材料》。

针对半透明钙钛矿太阳能电池中超薄吸收层易引发界面缺陷累积、电荷提取受阻和热积累加剧等问题，研究团队提出了一种药效团引导的界面分子设计策略。该策略选用具有刚性骨架的Desamethone (Dex) 作为界面配体，利用其羰基、羟基和π-π共轭体系的协同作用，在钙钛矿/界面层实现多位置识别、缺陷钝化和界面调控，从而同步优化界面能级匹配与载流子选择性提取。

机理研究表明，Dex倾向于以双位点锚定方式吸附在钙钛矿表面，并形成有利于空穴抽取的定向界面偶极。结合理论计算、能谱和瞬态动力学表征，研究人员发现该分子不仅有效抑制了界面非辐射复合，还改善了超薄钙钛矿薄膜的表面质量与界面接触状态。进一步的红外热成像和光-电-热耦合分析表明，Dex处理后器件的热积累降低、散热加快，说明该策略能够实现电荷传输调控与热管理增强的协同优化。

基于该策略，团队制备的半透明器件在约150nm超薄吸收层条件下，实现了1.165V的开路电压、15.26%的光电转换效率和20.88%的平均可见光透过率，对应光利用效率约3.19%；同时器件在80℃氮气环境下的T80>1000小时，表现出优异的效率-透光率-稳定性平衡。该工作为半透明钙钛矿太阳能电池中界面调控与热管理的一体化设计提供了新思路。

工程科学学院热科学和能源工程系硕士研究生王稼鹏和博士研究生王龙祥为论文共同第一作者。本文的通讯作者为我校工程科学学院热科学和能源工程系李桂强教授、叶轩立教授为共同通讯作者。（工程科学学院 科研部）

中国科大发展应变工程调控自旋极化新方法

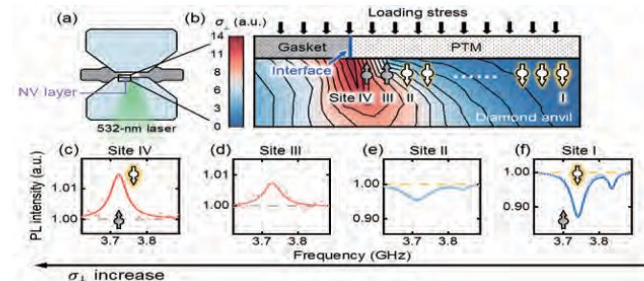
本报讯 中国科大自旋磁共振实验室王亚、王孟祺团队在高压物理与量子传感的交叉前沿领域取得重要进展。团队针对极高压下金刚石氮空位(NV)色心量子探针的失效机理开展研究，首次通过实验揭示了应变对自旋-光动力学调控机制，并基于该机制在纳米尺度实现了自旋极化反转。研究成果于4月6日发表在《物理评论快报》上。

极高压是调控物质状态的关键热力学手段，在发现新物态、揭示新物理规律方面发挥着重要作用。然而，高压环境下原位微观测表征技术的匮乏，长期制约着研究者对材料磁性质、超导转变等量子行为的微观理解。

金刚石NV色心因其与金刚石顶砧(产生极高压力的核心装置)的高度兼容性，以及纳米尺度的磁探测能力，成为近年来高压原位表征的重要工具。中国科大团队长期致力于高性能量子传感器的技术研发与高压科学前沿交叉应用，于2024年发展出应变工程调控关键技术，首次将该类量子传感器的稳定工作压力提升至上百万大气压(100GPa)以上，同步发展超灵敏成像技术，揭示了矿物在高压下的磁性转变。

随着压力提升，金刚石对顶砧面应力环境更为复杂。在复杂应力下理解NV色心量子探针磁探测性能退化乃至失效的微观机制，成为发展下一代高压量子传感器的核心基础，也必将为应变工程发展为突破传统光学调控方法的局限的普适性手段。

为此，研究团队创新发展了光探测磁共振局域应力场测量与皮秒精度荧光动力学测量的



图：(a) 金刚石对顶砧高压装置。(b) 破坏对称性的应力梯度下的自旋极化反转现象示意图。(c)-(f) 不同应力区域NV色心的ODMR光谱。

协同表征技术，系统阐明了应变对NV色心自旋-光动力学的调控机制。研究证实，强对称性破缺应变像一双“无形的手”，从两个方向协同“推动”自旋极化的方向：1) 激发态自旋混合；应变抑制激发态上系间穿越(ISC)过程的自旋选择性，相当于松开了自旋极化的“原有固定”；2) 单重态跃迁分支改变；应变显著改变单重态回到基态的ISC跃迁分支比，使系统更倾向于向极化反转状态布居，相当于自旋极化“重新定向”。两个效应协同作用，最终实现NV色心光泵浦后实现自旋极化的反转。

基于这一全新的物理机制，团队通过精准构筑局域应变梯度场，在突破光学衍射极限的

纳米尺度区域内，成功实现了应力梯度诱导的可控自旋极化“扭转”。

这一成果突破了传统光学调控方案(如Purcell微腔、光子晶体腔等)仅能调控量子光源自发辐射通量、无法对局域非辐射跃迁过程实现精准操控的技术瓶颈，为自旋系统的局域量子操控与纳米尺度量子相干调控提供了全新的实验方法与技术路径，也为极高压下设计应力调控的高性能量子探测手段奠定了关键基础。

我校博士研究生刘志贤、孙家豪、徐甘雨为论文共同第一作者，王亚教授、王孟祺副教授为论文共同通讯作者。(物理学院 合肥微尺度物质科学国家研究中心 科研部)

中国科大实现大气中极稀有同位素氩-42的直接探测

本报讯 近日，卢征天、蒋蔚研究团队与中国科学院近代物理研究所孙良亭团队合作，成功实现了对大气中极稀有放射性同位素氩-42(⁴²Ar)的直接探测。氩-42在大气中的同位素丰度极低，仅约为十亿亿分之一(10⁻²¹)量级。此次突破将现有方法的探测灵敏度提升了约4-5个数量级，为超低丰度同位素的精密测量开辟了新路，标志着单原子灵敏探测技术迈入新台阶。相关成果于4月14日发表在《自然·物理》上。

研究团队采用自主发展的“原子阱痕量分析”(Atom Trap Trace Analysis, ATTA)技术，实现了对氩-42的单原子探测。该方法利用共振激光将目标原子减速、冷却并俘获在磁光阱中，通过荧光探测实现单原子的成像与计数。由于只有目标同位素能够满足共振条件，该技术从原理上消除了不同元素及分子的干扰，具有极高的选择性和灵敏度。

鉴于氩-42在自然界中的极低丰度，直接探测速率过低，预计每月仅能捕获约一个原子。为提高测量工作效率，研究团队引入了同位素预富集步骤。由中国科学院近代物理研究所研制的强流电磁质谱装置首先去除绝大多数氩-40同位素，同时收集氩-42及作为参考的稳定同位素氩-38。预富集后的样品再进入原子阱系统进行单原子探测。研究团队在43天内累计观测到204个氩-42原子，最终测得大气中氩-42的同位素丰度为(6.1±0.5)×10⁻²¹。

原子阱痕量分析技术近年来已成功应用于极地冰芯与青藏高原冰川年代学，以及全球范围地下水年龄示踪等研究。此次与预富集技术的结合，将其探测能力拓展至更低的同位素丰度范围。未来，该方法有望应用于更多极稀有同位素的测量，为基础物理、地球与环境科学研究提供新的精密工具。

万兆丰博士和博士研究生梁佳伟为论文的共同第一作者。(物理学院 合肥微尺度物质科学国家研究中心 科研部)

我国科学家成功创制出两种全新常压镍基超导材料

我国科学家在镍基高温超导研究领域再获重要突破。南方科技大学量子功能材料国家重点实验室和物理系、粤港澳大湾区量子科学中心薛其坤-陈勇团队，与中国科大沈伟团队等合作，近日在国际学术期刊《自然》发表最新研究成果：团队在极高压条件下，通过人工设计原子堆叠序列，成功创制出两种全新的常压镍基高温超导材料；与此同时，借助角分辨光电子能谱技术，研究人员识别出与超导态密切相关的关键电子能带结构，为揭示镍基高温超导机理提供了重要实验依据。

像“搭积木”一样
在原子层面设计并构造全新超导体

超导，是指材料在特定条件下电阻完全消失、电流可以无损耗流动的现象。高温超导研究则是凝聚态物理领域最重要的前沿问题之一。继铜基、铁基高温超导体之后，镍基材料被认为是有望帮助科学家进一步理解高温超导机理的第三类重要体系。对这一体系的深入研究，不仅关系基础科学前沿，也被认为将为未来能源运输、精密探测、信息技术和量子计算等领域带来重要变革。

不过，镍基超导材料的研究长期面临一个核心难题：实现超导所必需的高氧化状态，与材料稳定生长所需要的条件彼此冲突。这就

好比要同时烧制瓷器的瓷胎和釉面——瓷胎成型需要温和稳定的环境，釉面显色则需要强氧化、两道工序的条件针锋相对，传统方法很难实现。

针对这一难题，研究团队自主研发出“强氧化原子逐层外延”技术。该技术能够在超氧化环境下，对材料生长过程进行原子级精准操控，使薄膜在生长过程中同时完成结构构建与充分氧化。这如同在纳米世界中，逐层搭建“原子积木”，科学家可以按照预先设计好的蓝图，精确排列铜、镍、钴等原子，从而构建出一系列高质量镍基氧化物薄膜。研究人员表示，这种在极高压条件下实现原子级工程操控的能力，不仅为镍基超导研究提供了独特的实验平台，也为破解多类氧化物材料的缺氧难题提供了新的解决思路。

凭借这一技术，团队先将此前发现的纯双层结构镍基薄膜的常压超导起始温度从45开尔文提升到63开尔文；随后，又按人工设计的原子堆叠方案，精确合成出三种全新的镍基超导材料，其中两种材料，在常压下实现了高温超导，起始转变温度分别达到50开尔文和46开尔文。这意味着，研究团队不仅提升了已知材料的性能，还进一步创制出自自然界中原本不存在的新型超导材料。

“理清”超导电子的能量动量结构
为破解高温超导难题提供关键钥匙

发现新材料只是第一步，理解“为什么会超导”才是更关键的科学问题。为此，研究团队将原子级精准结构控制与角分辨光电子能谱技术相结合，对四种不同堆叠结构的镍基氧化物薄膜开展系统比较研究。

角分辨光电子能谱可以直接观测材料中电子的能量和动量分布，被形象地称为给电子运动拍“照片”的“超级相机”。研究发现，在能够超导的几种结构中，布里渊区顶部附近都存在一个由γ能带形成的费米口袋；而在不超导的结构中，这一关键特征并不存在。

这一发现从实验上表明了原子堆叠构型、电子能带与超导电性之间的关联，识别出了决定超导发生与否的“电子基因”，为揭示镍基高温超导的微观机制提供了明确的实验证据。

研究人员认为，镍基、铜基、铁基三类高温超导体具有不同的电子结构特征，对它们进行系统比较研究，将有助于人类最终破解高温超导这一重大科学难题，并为能源、信息和量子计算等未来科技发展奠定科学基础。

(原载于央视网 2026年4月9日 记者 张春玲 朱平)

《化学教育》杂志封面报道我校机器学习结合红外光谱实验教学研究成果

本报讯 近日，美国化学会旗下的Journal of Chemical Education(以下简称JCE)发表我校数字化实验教学研究成果“Machine Learning-Enabled Quantification of Characteristic Carbonyl Peak Shifts in Infrared Spectra: An Instrumental Analysis Laboratory Experiment for Upper-Division Undergraduates”(J. Chem. Educ. 2026, 103, 4, 2158-2168)。这是我首次在该期刊发表数字化实验教学研究成果，并入选本期封面。JCE于1924年创刊，是化学教育国际顶级期刊。

该工作创新性地将机器学习方法引入红外光谱实验教学，以红外光谱中具有代表性的羰基(C=O)特征吸收峰为研究对象，指导学生

在传统红外光谱实验基础上构建包含百余种羰基化合物的光谱数据库，运用线性回归、随机森林回归和支持向量回归三种机器学习模型对吸收峰波数进行建模预测，并进一步利用SHAP(沙普利加性解释)方法对模型进行分析，成功量化了氢、氨基、甲基、羟基等不同取代基对羰基特征峰位移的影响，其定量结果

与教科书中的经典理论(如诱导效应、共轭效应)高度吻合，初步实现了从定性描述到可视化定量分析的跨越。

文章第一作者为化学与材料科学学院周强，通讯作者为化学与材料科学学院朱平平、胡万群、周强及工程科学学院董旭伦。(化学与材料科学学院)