



中国科学院大学
University of Chinese Academy of Sciences

博士学位论文评阅书

论文题目 非铅钙钛矿材料光伏性能的理论研究

作者姓名 毛鑫

学位类别 理学博士

学科（专业） 物理化学

研究所（院系） 中国科学院大连化学物理研究所

中国科学院大学制

学术道德评价

(一票否决)

评价要素	评价意见 (请在相应栏内划“√”)
是否存在剽窃他人成果、伪造数据、由他人代写等严重作假行为	<input type="checkbox"/> 是 (具体说明存在的问题)
	<input checked="" type="checkbox"/> 否

评阅意见

评 价 要 素			权重	具体得分 (百分制)
1	论文选题	选题的理论意义、实用价值	10%	9
2	文献综述	反映该学科及相关领域的前人成果和前沿动态	15%	14
3	创新成果	论文成果创新性，对学科发展、技术进步、经济建设、国家安全等方面产生的影响和贡献	40%	36
4	基础理论和专门知识	基础理论的宽厚度、坚实度，专门知识的系统性、深入性	10%	9
5	科研能力	论文体现科研潜质与独立科研能力	15%	14
6	论文写作	论文结构、撰写规范性；文字表达准确、清晰和流畅性；引文严谨、规范性	10%	9
总体评价			总分	91

注：“分数”栏每项均按百分制整数评分，各项满分均为 100 分。评分分为四档：大于等于 90 分为优秀；大于等于 75 分小于 89 分为良好；大于等于 60 分小于 74 分为一般；小于 60 分为差。

对学位论文的学术评语：（请对论文的学术水平、创新性做出简要评述，包括选题意义，文献资料的掌握，论文创新之处，写作规范和逻辑性等。还须明确指出论文中存在的问题和不足之处。可另附页）

论文题目： 非铅钙钛矿材料光伏性能的理论研究

作者姓名： 毛 鑫

非铅钙钛矿材料光伏性能研究对光催化、表界面催化等领域具有重要的科学意义。该论文工作主要分为三部分。首先，研究了全无机卤素非铅钙钛矿，发现立方相的 KSnCl_3 ， RbSnCl_3 和三方相的 NaGeBr_3 ，具有理想的光伏带隙（1.24-1.44 eV），有望应用于光伏领域。其次，研究了三维非铅混合阴离子钙钛矿体系，发现带隙与负离子平均电负性呈正相关关系，且阴离子对带边态的贡献与电子亲和力和结构参数有关，发现 CsInOBr_2 具有合适的直接带隙（1.3eV），有望应用于光伏发电。最后，研究了基于过渡金属的卤素钙钛矿，发现 ACuX_3 和 A_2PdX_6 体系不适合用于光催化分解水。

该论文选题具有创新性，属于国际前沿科学。研究方案设计合理，数据翔实，论据充分。全文行文流畅，逻辑缜密。作者具有扎实的理论基础和系统的专业知识以及独立从事科研工作的能力。

是否同意组织学位论文答辩
（请在相应栏内划“√”）

☒同意答辩

☐修改后答辩

☐不同意答辩

学术道德评价

(一票否决)

评价要素	评价意见 (请在相应栏内划“√”)
是否存在剽窃他人成果、伪造数据、由他人代写等严重作假行为	<input type="checkbox"/> 是 (具体说明存在的问题)
	<input type="checkbox"/> 否 <input checked="" type="checkbox"/>

评阅意见

评 价 要 素			权重	具体得分 (百分制)
1	论文选题	选题的理论意义、实用价值	10%	95
2	文献综述	反映该学科及相关领域的前人成果和前沿动态	15%	94
3	创新成果	论文成果创新性,对学科发展、技术进步、经济建设、国家安全等方面产生的影响和贡献	40%	92
4	基础理论和专门知识	基础理论的宽厚度、坚实度,专门知识的系统性、深入性	10%	92
5	科研能力	论文体现科研潜质与独立科研能力	15%	93
6	论文写作	论文结构、撰写规范性;文字表达准确、清晰和流畅性;引文严谨、规范性	10%	91
总体评价			总分	93

注:“分数”栏每项均按百分制整数评分,各项满分均为100分。评分分为四档:大于等于90分为优秀;大于等于75分小于90分为良好;大于等于60分小于75分为中;小于60分为差。

对学位论文的学术评语：（请对论文的学术水平、创新性做出简要评述，包括选题意义，文献资料的掌握，论文创新之处，写作规范和逻辑性等。还须明确指出论文中存在的问题和不足之处。可另附页）

作者采用第一性原理计算了三种类型非铅钙钛矿体系的带隙与结构参量，从 400 多种非铅钙钛矿材料中筛选出几种适合于用作光伏器件（太阳能电池）的材料，为实验合成光伏材料提供了理论参考和依据。论文选题具有重要的科学意义和应用背景。

该博士学位论文包含三部分研究内容：（1）针对全无机卤素非铅钙钛矿 ABX_3 类型，计算了 260 种卤素非铅钙钛矿的带隙结构和相关参量，研究了带隙与阴离子半径及结构对称性之间的关系。从中筛选出三种卤素非铅钙钛矿（ $KSnCl_3$, $RbSnCl_3$ 和 $NaGeBr_3$ ），可用作光伏材料。（2）针对三维非铅混合阴离子卤素钙钛矿 $ABX'X''_2$ 类型，计算了 192 种材料的带隙结构和有关参量，分析了带隙与阴离子平均电负性之间的关系。从中筛选出 $CsInOBr_2$ 适合于用作光伏材料。（3）针对过渡金属卤素钙钛矿 $ACuX_3$ 和 A_2BX_6 两种体系，计算了带隙结构及相关参量，分析了用作光伏材料和光催化分解水材料的可行性。上述研究工作为实验合成光伏材料提供了重要的理论参考，具有重要的学术价值和创新性。

作者阅读了大量的相关文献资料。工作量饱满。作者具有较扎实的基础知识及专业知识，具有独立从事科学研究工作的能力。该论文是一篇优秀的博士学位论文。

论文的不足之处：存在少量的错别字和不通顺的语句（包括中文摘要和论文正文），建议作者在答辩之前仔细检查和修改。

<p>是否同意组织学位论文答辩</p> <p>（请在相应栏内划“√”）</p>	<p><input checked="" type="checkbox"/> 同意答辩 √</p> <p><input type="checkbox"/> 修改后答辩（论文需通过小的修改后答辩）</p> <p><input type="checkbox"/> 修改后评阅（论文需通过大的修改后再评阅）</p> <p><input type="checkbox"/> 不同意答辩</p>
---	--

学术道德评价

(一票否决)

评价要素	评价意见 (请在相应栏内划“√”)
是否存在剽窃他人成果、伪造数据、由他人代写等严重作假行为	<input type="checkbox"/> 是 (具体说明存在的问题)
	√ 否

评阅意见

评 价 要 素			权重	具体得分 (百分制)
1	论文选题	选题的理论意义、实用价值	10%	95
2	文献综述	反映该学科及相关领域的前人成果和前沿动态	15%	90
3	创新成果	论文成果创新性, 对学科发展、技术进步、经济建设、国家安全等方面产生的影响和贡献	40%	92
4	基础理论和专门知识	基础理论的宽厚度、坚实度, 专门知识的系统性、深入性	10%	92
5	科研能力	论文体现科研潜质与独立科研能力	15%	90
6	论文写作	论文结构、撰写规范性; 文字表达准确、清晰和流畅性; 引文严谨、规范性	10%	90
总体评价			总分	91.5

注：“分数”栏每项均按百分制整数评分，各项满分均为 100 分。评分分为四档：大于等于 90 分为优秀；大于等于 75 分小于 90 分为良好；大于等于 60 分小于 75 分为中；小于 60 分为差。

对学位论文的学术评语：（请对论文的学术水平、创新性做出简要评述，包括选题意义，文献资料的掌握，论文创新之处，写作规范和逻辑性等。还须明确指出论文中存在的问题和不足之处。可另附页）

本论文针对光伏材料中卤素钙钛矿材料发展中所遇到的铅的毒性和材料本征不稳定性的瓶颈问题，通过基于密度泛函理论的第一性原理计算，大规模筛选了 260 种三维全无机卤素非铅钙钛矿、192 种三维非铅混合阴离子卤素钙钛矿、过渡金属卤素钙钛矿这三类非铅钙钛矿体系。获得了立方相的 KSnCl_3 、立方相的 RbSnCl_3 等多种具有合适光学带隙有望用于太阳能电池的材料，这将为实验提供良好的指导。

该论文的选题致力于解决传统铅基钙钛矿的环境污染问题，寻找新型环境友好的钙钛矿太阳能电池材料，在环境和能源邻域具有重要的学术意义和应用价值。论文的文献综述详尽、写作规范、逻辑缜密、结果数据严谨。论文计算所用的 GLLB-SC 泛函在带隙预测上准确高效，从而可以大规模对钙钛矿材料进行筛选，具有创新性。所选取的三类钙钛矿候选体系也很新颖。毛鑫同学的理论基础扎实，具有独立从事科研工作的能力。综上所述，这是一篇优秀的博士毕业论文，同意组织学位论文答辩。

<p>是否同意组织学位论文答辩</p> <p>（请在相应栏内划“√”）</p>	<p><input checked="" type="checkbox"/> 同意答辩</p> <p><input type="checkbox"/> 修改后答辩（论文需通过小的修改后答辩）</p> <p><input type="checkbox"/> 修改后评阅（论文需通过大的修改后再评阅）</p> <p><input type="checkbox"/> 不同意答辩</p>
---	--

学术道德评价

(一票否决)

评价要素	评价意见 (请在相应栏内划“√”)
是否存在剽窃他人成果、伪造数据、由他人代写等严重作假行为	<input type="checkbox"/> 是 (具体说明存在的问题)
	√ 否

评阅意见

评 价 要 素			权重	具体得分 (百分制)
1	论文选题	选题的理论意义、实用价值	10%	95
2	文献综述	反映该学科及相关领域的前人成果和前沿动态	15%	90
3	创新成果	论文成果创新性, 对学科发展、技术进步、经济建设、国家安全等方面产生的影响和贡献	40%	95
4	基础理论和专门知识	基础理论的宽厚度、坚实度, 专门知识的系统性、深入性	10%	95
5	科研能力	论文体现科研潜质与独立科研能力	15%	90
6	论文写作	论文结构、撰写规范性; 文字表达准确、清晰和流畅性; 引文严谨、规范性	10%	85
总体评价			总分	92.5

注：“分数”栏每项均按百分制整数评分，各项满分均为 100 分。评分分为四档：大于等于 90 分为优秀；大于等于 75 分小于 90 分为良好；大于等于 60 分小于 75 分为中；小于 60 分为差。

对学位论文的学术评语：（请对论文的学术水平、创新性做出简要评述，包括选题意义，文献资料的掌握，论文创新之处，写作规范和逻辑性等。还须明确指出论文中存在的问题和不足之处。可另附页）

铅基钙钛矿太阳能电池虽然效率高，但铅的毒性会造成巨大的环境污染，寻找性能优异的非铅钙钛矿材料成为当今材料领域的研究热点。本论文围绕三类非铅卤素钙钛矿体系，即三维全无机的锡锗钙钛矿、三维混合阴离子钙钛矿和过渡金属卤素钙钛矿，基于第一性原理计算，结合稳定性和结构因子等因素实现大规模的光伏材料筛选,并提出了多种具有合适光学带隙的非铅钙钛矿体系。同时，作者还探讨了零维钙钛矿 A_2PdX_6 在光催化分解水方面应用的可行性。以上工作具有创新性。

该论文理论方法和研究路线合理，数据翔实，结果分析可靠，说明作者在本学科已具有较扎实的专业理论基础，具有较强的独立从事科研工作的能力。论文思路清晰，文笔通顺，表述清楚，逻辑合理，图文规范，达到博士学位论文水平。

<p>是否同意组织学位论文答辩</p> <p>（请在相应栏内划“√”）</p>	<p><input checked="" type="checkbox"/> 同意答辩</p> <p><input type="checkbox"/> 修改后答辩（论文需通过小的修改后答辩）</p> <p><input type="checkbox"/> 修改后评阅（论文需通过大的修改后再评阅）</p> <p><input type="checkbox"/> 不同意答辩</p>
---	--

学术道德评价

(一票否决)

评价要素	评价意见 (请在相应栏内划“√”)
是否存在剽窃他人成果、伪造数据、由他人代写等严重作假行为	<input type="checkbox"/> 是 (具体说明存在的问题)
	√否

评阅意见

评 价 要 素			权重	具体得分 (百分制)
1	论文选题	选题的理论意义、实用价值	10%	90
2	文献综述	反映该学科及相关领域的前人成果和前沿动态	15%	90
3	创新成果	论文成果创新性, 对学科发展、技术进步、经济建设、国家安全等方面产生的影响和贡献	40%	85
4	基础理论和专门知识	基础理论的宽厚度、坚实度, 专门知识的系统性、深入性	10%	95
5	科研能力	论文体现科研潜质与独立科研能力	15%	90
6	论文写作	论文结构、撰写规范性; 文字表达准确、清晰和流畅性; 引文严谨、规范性	10%	90
总体评价			总分	88.5

注：“分数”栏每项均按百分制整数评分，各项满分均为 100 分。评分分为四档：大于等于 90 分为优秀；大于等于 75 分小于 90 分为良好；大于等于 60 分小于 75 分为中；小于 60 分为差。

对学位论文的学术评语：（请对论文的学术水平、创新性做出简要评述，包括选题意义，文献资料的掌握，论文创新之处，写作规范和逻辑性等。还须明确指出论文中存在的问题和不足之处。可另附页）

钙钛矿太阳能电池材料是目前国际上能源材料领域的研究热点。而非铅钙钛矿材料的开发，是其中重要的研究方向。利用量子化学计算方法可以帮助预测和筛选潜在的新型钙钛矿材料。

该论文中，作者采用密度泛函理论计算方法对三大类数百种非铅钙钛矿体系进行了材料性质的理论研究，取得了以下的创新成果：

1. 通过对 260 种全无机卤素非铅钙钛矿的理论计算，发现随着卤素阴离子半径的减小和结构对称性的降低，材料带隙增大。筛选出三种潜在的可用于光伏领域的全无机非铅卤素钙钛矿材料。
 2. 作者在钙钛矿八面体结构单元中引入一个硫族元素以提高体系的湿稳定性，对 192 种三维非铅混合阴离子钙钛矿体系进行了理论计算，发现带隙与负离子平均电负性呈正相关关系，且阴离子对带边态的贡献与电子亲和力和结构参数有关。其中 CsInOBr_2 是一种潜在的光伏材料。
 3. 通过理论计算，优化出一系列具有三维晶体结构的全无机 Cu 基钙钛矿，发现其均为金属性，不适合光伏应用。对于 A_2BX_6 体系，X 离子半径越小，带隙越大；A 离子体积越大，带隙越大，且 X 离子半径对于带隙的影响幅度大于 A 离子体积的影响。
- 论文写作较规范，文献综述全面，结论明确，具有较好的创新性。不足之处在于，作者所预测的多种新型钙钛矿材料还需要实验的验证；论文格式还需要进一步修订统一，其中还存在多处表述不准确的地方，需要作者进一步修改。
- 该论文达到了博士学位论文的要求，同意进行博士论文答辩。

<p>是否同意组织学位论文答辩</p> <p>（请在相应栏内划“√”）</p>	<p><input checked="" type="checkbox"/> 同意答辩</p> <p><input type="checkbox"/> 修改后答辩（论文需通过小的修改后答辩）</p> <p><input type="checkbox"/> 修改后评阅（论文需通过大的修改后再评阅）</p> <p><input type="checkbox"/> 不同意答辩</p>
---	--