

受理编号: c23140500000569

项目编号: 2023A1515011916

文件编号: 粤基金字(2023)2号

# 广东省基础与应用基础研究基金项目

## 任务书

项目名称: 新型氮杂酰亚胺基聚合物电子传输材料助力高效、稳定的钙钛矿太阳能电池

项目类别: 广东省自然科学基金-面上项目

项目起止时间: 2023-01-01 至 2025-12-31

管理单位(甲方): 广东省基础与应用基础研究基金委员会

依托单位(乙方): 南方科技大学

通讯地址: 广东省深圳市南山区广东省深圳市南山区西丽学苑大道1088号

邮政编码: 518055

单位电话: 0755-88010000

项目负责人: 安明伟

联系电话: 0755-88018307



(广东科技微信公众号)



(查看任务书信息)



(受理纸质材料二维码)

广东省基础与应用基础研究  
基金委员会  
二〇二〇年制

## 填写说明

一、项目任务书内容原则上要求与申报书相关内容保持一致，不得无故修改。

二、项目承担单位通过广东省科技业务管理阳光政务平台下载项目任务书，按要求完成签名盖章后扫描上传到广东省科技业务管理阳光政务平台。

三、签名盖章说明。请分别在单位工作分工及经费分配情况页、人员信息页、签约各方页等地方按要求签字或盖章，签章不合规或错漏将不予受理。其中，人员信息页要求所有参与人员本人亲笔签名，代签或印章无效，漏签将不予受理。

四、本任务书自签字并加盖公章之日起生效，各方均应负本任务书的法律责任，不应受机构、人事变动影响。

五、根据《广东省科学技术厅广东省财政厅关于深入推进省基础与应用基础研究基金项目经费使用“负面清单+包干制”改革试点工作的通知》（粤科规范字[2022]2号），2022年度及以后立项资助的全部省基金项目（包括省自然科学基金、省市联合基金、省企联合基金项目等）均适用“负面清单+包干制”，项目提交申请书和任务书时无需编制费用明细科目预算。

## 一、主要研究内容和要达到的目标

主要研究内容： 本项目拟利用位阻较小的噻唑衍生物和吡嗪缺电子内核构筑新型酰亚胺受体单元，通过理论模拟与筛选设计合成一系列具有深LUMO能级、低空间位阻的稠环芳香酰亚胺溴化单体，与锡化的BTI/BSeI单体共聚构建能级深、平面性好、钝化基团丰富和结构稳定的新型A-A型酰亚胺基聚合物电子传输材料。通过调节内核缺电子强度和侧链等方法，优化聚合物能级、电子传输性质和聚集态形貌；制备并优化钙钛矿太阳能电池性能，总结分子结构与器件效率和稳定性间的构效关系。主要包括分子的理论模拟、设计合成及器件制备与表征三部分，具体内容如下： 1. 新型酰亚胺基构建单元的分子前线轨道理论模拟与筛选； 2. 新型酰亚胺基受体-受体型聚合物电子传输材料的合成与表征； 3. 基于新型酰亚胺基A-A型聚合物电子传输材料的钙钛矿太阳能电池的制备与表征；

预期目标：

（1）开发一类低LUMO能级的氮杂酰亚胺基构建单元。通过合理的分子设计将缺电子单元噻唑和吡嗪嵌入到噻吩酰亚胺分子骨架中，利用其缺电子性质，开发出一系列LUMO能级深，空间位阻小，钝化官能团丰富的新型氮杂稠环芳香酰亚胺溴化单体，为后续制备低LUMO能级A-A型聚合物电子传输材料打下坚实的基础。

（2）开发一类低LUMO能级的酰亚胺基A-A型聚合物电子传输材料。将新开发的溴化酰亚胺缺电子单体，采用Stille偶联分别与六丁基二锡或BTI/BSeI锡化单体进行均聚或共聚，开发出一系列LUMO能级深、平面性好、迁移率高的氮杂酰亚胺基A-A型聚合物电子传输材料是本项目的关键，为后续钙钛矿电池的制备和优化做准备。

（3）制备并优化钙钛矿电池，实现高能量转化效率和稳定性高的器件，探索分子结构与器件性能之间的构效关系。在获得新型A-A型低LUMO能级聚合物的基础上，筛选能级合适的钙钛矿活性层进行搭配；制备PSCs器件，优化器件工艺，获得高性能的钙钛矿电池，力争效率突破24%，稳定性优于PCBM作为电子传输材料的器件；最后分析、总结分子结构与器件性能之间的构效关系，为本领域的发展提供可借鉴的指导。

## 二、项目预期获得的研究成果及形式

论文及专著情况	国家统计源刊物以上刊物 发表论文（篇）		3		科技报告（篇）		0	
	其中被SCI/EI/ISTP收录 论文数（篇）		3		培养人才（人）		0	
	专著（册）				引进人才（人）		0	
专利情况(项)	发明专利		实用新型专利		外观设计专利		国外专利	
	申请	授权	申请	授权	申请	授权	申请	授权
	1	0	0	0	0	0	0	0

三、项目进度和阶段目标

(一) 项目起止时间： 2023-01-01 至 2025-12-31		
(二) 项目实施进度及阶段主要目标：		
开始日期	结束日期	主要工作内容
2023-01-01	2023-12-31	<p>优化合成工艺，完成新型强受体单体TzPDI、PTzTI2和PTzTI3（A1）和BTI/BSeI系列锡化单体（A2）的合成工作。通过NMR、质谱和元素分析等手段，确认新化合物的结构；通过紫外-可见吸收光谱研究这类材料的光物理性质，利用电化学测试表征前线轨道能级，为后续的研究做好准备。</p> <p>参加学术会议，了解把握领域的最新进展。</p> <p>本项目开发的受体单元具有原创性，拟撰写专利1篇。</p>
2024-01-01	2024-12-31	<p>实施新单体TzPDI-Br、PTzTI2-Br和PTzTI3-Br（A1）和BTI/BSeI系列（A2）锡化单体进行共聚，利用GPC表征聚合物分子量，完成材料的基本性能测试（如吸收、能级、热稳定性、薄膜形貌和电子迁移率等）。将材料用于钙钛矿太阳能电池，并进行系统优化。</p> <p>分析本项目合成、理论计算、材料测试和器件表征等数据，研究、总结分子结构与器件性能之间的构效关系，根据器件结果，发表学术论文2篇，参加学术会议。</p>
2025-01-01	2025-12-31	<p>根据前面的实验结果，筛选出高效的A-A型聚合物电子传输材料，并对分子的结构、聚合物的分子量和器件的制备工艺等进行更加深入的研究和优化。总结设计高性能聚合物电子传输材料的分子结构与性能之间的联系，提升器件的效率和稳定性。力争将基于聚合物的倒置钙钛矿电池效率突破24%，发表学术论文1篇，参加学术会议。</p> <p>最后系统分析本项目的所有实验结果与数据，撰写本项目的结题报告。</p>

## 四、项目总经费及省基金委经费预算

1. 省基金委经费下达总额：（大写）壹拾万圆整；（小写）10万元；					
2. 省基金委经费年度下达计划：					
年度	2023 年	年	年	年	年
经费(万元)	10.00				

## 五、人员信息

## 项目负责人

姓名	证件号码	年龄	性别	职称	学历	在项目中承担的任务	所在单位	签名
安明伟	612625198906120116	34	男	未取得	博士研究生	项目负责人	南方科技大学	

## 项目组主要成员

姓名	证件号码	年龄	性别	职称	学历	在项目中承担的任务	所在单位	签名
马苏翔	340822199405130219	29	男	未取得	硕士研究生	材料合成与表征	南方科技大学	
冀晓霏	130425199210251828	31	女	未取得	博士研究生	器件表征	南方科技大学	

## 六、工作分工及财政经费分配

承担/参与单位名称 (盖章)	工作分工	省级财政科技资金分配 (万元)
南方科技大学	南方科技大学承担项目的全部工作量	10.00
	合计	10.00

## 七、任务书条款

第一条 甲方与乙方根据《中华人民共和国民法典》及国家有关法规和规定，按照《广东省科学技术厅关于广东省基础与应用基础研究基金（省自然科学基金、联合基金等）项目管理的实施细则（试行）》《广东省省级科技计划项目验收结题工作规程（试行）》等规定，为顺利完成（2023）年新型氮杂酰亚胺基聚合物电子传输材料助力高效、稳定的钙钛矿太阳能电池专项项目（文件编号：粤基金字（2023）2号）经协商一致，特订立本任务书，作为甲乙双方在项目实施管理过程中共同遵守的依据。

第二条 甲方的权利义务：

1. 按任务书规定进行经费核拨的有关工作协调。
2. 根据甲方需要，在不影响乙方工作的前提下，定期或不定期对乙方项目的实施情况和经费使用情况进行检查或抽查。
3. 根据《广东省科研诚信管理办法(试行)》等规定对乙方进行科技计划信用管理。

第三条 乙方的权利义务：

1. 确保落实自筹经费及有关保障条件。
2. 按任务书规定，对甲方核拨的经费实行专款专用，单独列账，并随时配合甲方进行监督检查。
3. 经费使用按照广东省级财政科研项目经费使用等有关规定进行管理。
4. 项目依托单位应制定经费使用“负面清单+包干制”内部管理制度并报甲方备案。
5. 使用财政资金采购设备、原材料等，按照《广东省实施〈中华人民共和国招标投标法〉办法》有关规定，符合招标条件的须进行招标。
6. 项目任务书任务完成后，或任务书规定的任务、指标及经费投入等提前完成的，乙方可提出验收结题申请，并按甲方要求做好项目验收结题工作。
7. 若项目发生需要终止结题的情况，乙方须提出终止结题申请，并按甲方要求做好项目终止结题工作。
8. 在每年规定时间内向甲方如实提交上年度工作情况报告，报告内容包含上年度项目进展情况、经费决算和取得的成果等。
9. 按照国家和省有关规定，提交科技报告及其他材料。
10. 利用甲方的经费获得的研究成果，项目负责人和参与者应当注明获得“广东省基础与应用基础研究基金（英文：Guangdong Basic and Applied Basic Research Foundation）（项目编号）”资助或作有关说明。
11. 乙方要恪守科学道德准则，遵守科研活动规范，践行科研诚信要求，不得抄袭、剽窃他人科研成果或者伪造、篡改研究数据、研究结论；不得购买、代写、代投论文，虚构同行评议专家及评议意见；不得违反论文署名规范，擅自标注或虚假标注获得科技计划（专项、基金等）等资助；不得弄虚作假，骗取科技计划（专项、基金等）项目、科研经费以及奖励、荣誉等；不得有其他违背科研诚信要求的行为。
12. 确保本项目开展的研究工作符合我国科技伦理管理相关规定。

第四条 在履行本任务书的过程中，如出现广东省相关政策法规重大改变等不可抗力情况，甲方有权对所核拨经费的数量和时间进行相应调整。

第五条 在履行本任务书的过程中，当事人一方发现可能导致项目整体或部分失败的情形时，应及时通知另一方，并采取适当措施减少损失，没有及时通知并采取适当措施，致使损失扩大的，应当就扩大的损失承担责任。

第六条 本项目技术成果的归属、转让和实施技术成果所产生的经济利益的分享，除双方另有约定外，按国家和广东省有关法规执行。

第七条 根据项目具体情况，经双方另行协商订立的附加条款，作为本任务书正式内容的一部分，与本任务书具有同等效力。

第八条 本任务书一式三份，各份具有同等效力。甲、乙方及项目负责人各执一份，三方签字、盖章后即生效，有效期至项目结题后一年内。各方均应负任务书的法律责任，不应受机构、人事变动的影响。

第九条 乙方必须接受甲方聘请的本项目任务书监理单位的监督和管理。监理单位按照甲方赋予的权利对本项目任务书的履行进行审核、进度调查，对项目任务书变更、经费使用情况进行监督管理及组织项目验收。

说明：1. 本任务书中，凡是当事人约定无需填写的内容，应在空白处划（/）。

2. 委托代理人签订本任务书的，应出具合法、有效的委托书。

## 八、本任务书签约各方

管理单位（甲方）：广东省基础与应用基础研究基金委员会（盖章）

法定代表人（或法人代理）：曾路（签章）

2023 年 02 月 14 日

依托单位（乙方）：南方科技大学（盖章）

法定代表人（或法人代理）：薛其坤（签章）

联系人（项目主管）姓名：张银玲（签章）

Email: zhangyl3@sustech.edu.cn

电话：0755-88010366 / 15820295557

开户单位名称：南方科技大学

开户银行名称：中信银行深圳分行营业部

开户银行帐号：8110301013200282614

年 月 日

联系人（项目负责人）姓名：安明伟（签名）

Email: anmw@sustech.edu.cn

电话：0755-88018307

年 月 日