

# 新型光电化学转化材料的设计及数据库构建

## 应用范围

- ☐ 太阳能电池、光电化学转化体系、发光材料、光学管理技术等

## 成果介绍

构建结合第一性原理的多尺度模拟方法，探索器件尺度结构中光、电及化学反应等多物理耦合过程；基于高通量筛选及多尺度模拟方法，设计筛选新型光电化学材料及器件结构，构建材料结构数据库；理论研究光电化学材料性能优化策略：界面工程、本体相筛选及光学管理技术等。

## 主要技术指标

- ☐ 基于第一性原理的多尺度模拟方法体系
- ☐ 新型光电化学转化材料数据库
- ☐ 高性能材料及结构的特征性质筛选体系

