

废弃光伏组件热解处置过程中EVA与含氟背板交互反应机理

资静斌 薛渊 罗明聪 赵欣悦 吴勇刚 胡中发 王学斌

Interaction mechanism between EVA and fluorine-containing backsheets during pyrolysis disposal of waste photovoltaic modules

ZI Jingbin, XUE Yuan, LUO Mingcong, ZHAO Xinyue, WU Yonggang, HU Zhongfa, WANG Xuebin

在线阅读 View online: <https://www.jjmjs.com.cn/article/doi/10.13226/j.issn.1006-6772.TY25070301>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

煤炭热解分子动力学特性探究：煤阶及大分子结构的影响

Molecular dynamics characteristics of coal pyrolysis: Influence of coal rank and macromolecular structure

洁净煤技术. 2025, 31(S2): 247-258. <https://doi.org/10.13226/j.issn.1006-6772.25010601>

聚丙烯和沙柳共热解特征和多环芳烃生成规律研究

Study on co-pyrolysis characteristics of polypropylene with Salix psammophila and formation of polycyclic aromatic hydrocarbons

洁净煤技术. 2025, 31(S1): 159-169. <https://doi.org/10.13226/j.issn.1006-6772.24061802>

煤矸石玉米秸秆共热解多段集总动力学与主成分特征解析

Coal gangue and corn straw co-pyrolysis multi-stage aggregate kinetics and principal component characterization analysis

洁净煤技术. 2025, 31(S2): 311-320. <https://doi.org/10.13226/j.issn.1006-6772.25031102>

废弃风电叶片长度对回收产物及玻璃纤维的影响

Effect of waste wind turbine blade length on recycled products and glass fiber

洁净煤技术. 2025, 31(S2): 944-950. <https://doi.org/10.13226/j.issn.1006-6772.24123001>

掺氨对甲烷爆炸影响的热力学及反应分子动力学研究

洁净煤技术. 2024(S1): <https://doi.org/{suggestArticle.doi}>



关注微信公众号，获得更多资讯信息

废弃光伏组件热解处置过程中 EVA 与含氟背板交互反应机理

资静斌¹, 薛 渊², 罗明聪¹, 赵欣悦², 吴勇刚¹, 胡中发³, 王学斌⁴

(1. 中蓝长化工程科技有限公司, 湖南 长沙 410000; 2. 上海交通大学 中英国际低碳学院, 上海 201306; 3. 苏州大学 能源学院, 江苏 苏州 215006; 4. 西安交通大学 能源与动力工程学院, 陕西 西安 710049)

摘 要: 热解处置是实现废弃光伏组件高效处理和循环利用的有效途径。废弃光伏组件中的可热解部分主要包括有机胶膜及含氟背板。鉴于目前无法完全将有机胶膜和含氟背板分离, 因此研究有机胶膜和含氟背板的共热解以及含氟物质迁移转化, 是实现废弃光伏组件高效环保处理的关键。首先采用反应分子动力学方法 (ReaxFF MD) 研究了乙烯-醋酸乙烯共聚物 (EVA) 和聚偏氟乙烯 (PVDF) 高分子的单独热解行为。进一步研究了两者共热解过程中含氧/含氟物质的生成转化, 揭示了不同反应温度对两者交互作用的影响规律。结果表明: ReaxFF MD 可较好地拟合 EVA 和 PVDF 的热解行为和产物分布。共热解过程中, PVDF 会促进 EVA 分解生成 CO_2 , 而 CO_2 也会进一步与 PVDF 热解残碳发生碳气化反应; EVA 不仅会抑制 PVDF 衍生热解产物的二次缩聚反应, 还会促进小分子含氟有机物生成。此外, EVA 可强化 PVDF 中 HF 的生成和释放, 且该强化作用在高温条件下更为显著。本研究不仅较为全面地揭示了共热解过程中 EVA 和 PVDF 的交互反应作用, 而且明确了反应温度在优化两者协同效应及 F 元素定向迁移转化的关键作用。

关键词: 废弃光伏组件; 热解; EVA; PVDF; 反应分子动力学; 交互反应机理

中图分类号: TQ53; TK114 **文献标志码:** A **文章编号:** 1006-6772(2026)06-0137-09

Interaction mechanism between EVA and fluorine-containing backsheets during pyrolysis disposal of waste photovoltaic modules

ZI Jingbin¹, XUE Yuan², LUO Mingcong¹, ZHAO Xinyue², WU Yonggang¹, HU Zhongfa³, WANG Xuebin⁴

(1. Chonfar Engineering and Technology Company Limited, Changsha 410000, China; 2. China-UK Low Carbon College, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 201306, China; 3. College of Energy, Soochow University, Suzhou 215006, China; 4. School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: Pyrolysis disposal is an effective way to realize efficient treatment and recycling of waste PV modules. The pyrolyzable part of waste PV modules mainly includes organic films and fluorinated backsheets. Given that it is impossible to completely separate the organic film and fluorine-containing backsheet, the study of the co-pyrolysis of organic film and fluorine-containing backsheet as well as the migration and transformation of fluorine-containing substances is the key to realize the efficient and environmentally friendly treatment of waste PV modules. In this paper, the reaction molecular dynamics (ReaxFF MD) method was used to study the individual pyrolysis behaviors of ethylene vinyl acetate copolymer (EVA) and polyvinylidene fluoride (PVDF) polymers, and the generation and transformation of oxygen/fluorine-containing substances in the process of co-pyrolysis of these two polymers were further investigated, which reveals the influence of different reaction temperatures on the interactions between the two polymers. The results show that ReaxFF MD can better fit the pyrolysis behaviors and product distributions of EVA and PVDF; during the co-pyrolysis process, PVDF promotes

收稿日期: 2025-07-03; 策划编辑: 白娅娜; 责任编辑: 李雅楠 DOI: 10.13226/j.issn.1006-6772.TY25070301

作者简介: 资静斌(1982—), 男, 湖南耒阳人, 高级工程师, 博士。E-mail: zijingbin@qq.com

通讯作者: 胡中发(1990—), 男, 江西临川人, 副教授, 博士。E-mail: zhfhu@suda.edu.cn

引用格式: 资静斌, 薛渊, 罗明聪, 等. 废弃光伏组件热解处置过程中 EVA 与含氟背板交互反应机理 [J]. 洁净煤技术, 2026, 32(6): 137-145.

ZI Jingbin, XUE Yuan, LUO Mingcong, et al. Interaction mechanism between EVA and fluorine-containing backsheets during pyrolysis disposal of waste photovoltaic modules [J]. Clean Coal Technology, 2026, 32(6): 137-145.



移动阅读

the decomposition of EVA to generate CO_2 , and CO_2 will further react with the residual carbon from the pyrolysis of PVDF in carbon gasification reaction; EVA not only inhibits the secondary condensation reaction of the pyrolysis products derived from PVDF, but also promotes the generation of small molecule fluorine-containing organic compounds; In addition, EVA can enhance the generation and release of HF from PVDF, and the enhancement is more significant under high temperature conditions. This study not only comprehensively reveals the interaction between EVA and PVDF during the co-pyrolysis process, but also clarifies the key role of reaction temperature in optimizing the synergistic effect of the two and the directional migration and transformation of F elements.

Key words: waste photovoltaic module; pyrolysis; EVA; PVDF; interaction mechanism;

0 引言

光伏发电是我国实现双碳目标的重要支撑。截至2024年底,全国太阳能发电装机量达8.87亿kW^[1]。然而,光伏组件的光电转换寿命仅为20~25 a。预计到2030年,全球退役光伏组件预计约为800万t,而我国需要回收的光伏组件达150万t^[2-3]。退役光伏组件处理利用将成为光伏产业循环发展的关键一环。传统光伏组件的处理方式包括物理分离法^[4-5]、化学溶剂法^[6-7]和热处理法等^[8-9]。其中,物理分离法回收过程简单,但回收能耗高、效率低且材料分离纯度不高,造成后续利用困难的问题;化学溶剂法可得到完整的硅片和玻璃、回收率高,但反应时间长、溶剂用量大;热处理法,尤其是热解方法,工艺过程简单,且能够回收纯度和完整度较高的光伏玻璃和硅片电池^[10-12]。因此,通过热解实现光伏组件的高效资源化回收已成为国内外热解及化工领域关注的重点^[13]。

晶硅光伏组件由铝边框、光伏玻璃、乙烯-醋酸乙烯共聚物(EVA)、太阳能电池及背板组成。退役组件中的可热解部分主要包括有机胶膜和背板。其中,根据耐候层和基材层材料种类,背板可细分为TPT、KPK、PPE 3种背板^[14]。目前,绝大多数废旧背板的耐候层是化学性质较为稳定的聚氟乙烯(PVF)和聚偏氟乙烯(PVDF),而提供绝缘性能和机械强度的中间层主要是聚对苯二甲酸乙二醇酯(PET)^[15]。已有较多学者围绕EVA、PVF、PVDF及PET的热解特性开展了丰富的研究。董莉等^[16]发现EVA变温热解过程呈现出2个阶段失重的特性,分别为醋酸乙烯酯侧链脱除和聚乙烯主链分解。丁湧等^[17]研究了EVA胶膜的有氧热解动力学过程和产物分布特性后发现,EVA分解温度和活化能在微氧条件下有所下降,并生成烷烃、烯烃及醇类等液相产物。DE等^[18]发现PVDF热失重特性与聚乙烯类似,其主要失重温度区间为400~500℃,对应C—C主链断裂和小分子氟碳化合物;当温度低于400℃时,PVDF中的C—H和C—F键发生断裂,形成少

量的HF气体。

近年来,全氟和多氟烷基物质(PFASs)引起的生态危机逐渐引起全球社会的广泛关注,其关注热点也从长链PFASs转移到短链PFASs^[19]。值得注意的是,由于PVF、PVDF热解过程会产生较多的短链多氟烷基物质,因此F元素转化迁移也将成为废弃光伏组件热解处置的重点。考虑到实际组件处置中背板无法与有机胶膜完全分离,因此需要在明晰含氟高分子及EVA热解特性的基础上,进一步了解两者共热解的交互作用及其对F元素转化迁移规律的影响。由于PVDF和EVA共热解的反应体系大、反应路径复杂,且氢氟酸的强腐蚀特性也给产物在线监测带来一定的挑战,而反应分子动力学方法(ReaxFF MD)可弥补传统试验手段的不足。通过监测反应过程中键级的变化,ReaxFF MD可准确模拟大体系含碳燃料的热解过程^[20]。陈敬炜等^[21]利用ReaxFF MD研究了PVDF在超临界水体系下的分解过程,发现水分子可以通过直接供氢和羟基的形式与F原子结合生成HF。SHEN等^[22]研究TPT背板(PVF+PET)共热解过程中CO和HF的释放规律,但未对两者间的交互作用进行更深入的探索。基于上述研究,笔者首先利用ReaxFF MD研究了PVDF和EVA单独热解的产物分布和主要气态产物产率;探索共热解过程对典型产物(CO_2 、HF、氟代烃等)生成变化规律的影响;描述主要特征化学键的变化以描述共热解的主要化学反应路径。

1 模拟方法

1.1 模型搭建

针对EVA、PVDF单独热解的场景,采用Material Studio中的Amorphous Cell模块分别构建了包含有6条EVA或PVDF长链的模型,聚合度均为100。针对EVA和PVDF共热解的模型,构建了包含3条EVA和3条PVDF的模型,两者的质量比约为2:3。EVA中乙烯和醋酸乙烯单体占比为80%和20%;采用Dreiding力场对模型进行全面几何优化,优化后的分子模型发生了不同程度的扭曲

和反转;在 NPT 系综下进行压缩和减压以确保结构的稳定性和合理性,压缩和解压压力分别为 0.1 GPa 和 0.1 MPa;在 300 ~ 600 K 的温度范围内进行退火循环,使得 EVA、PVDF、EVA+PVDF 这 3 个模拟体系的能量最小化。最终获得的模型如图 1 所示。

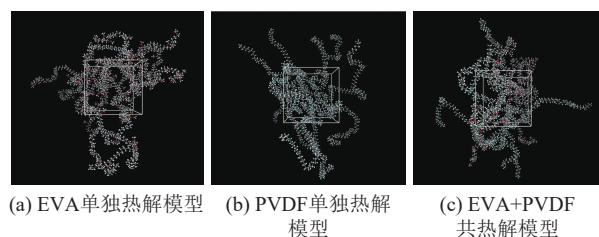


图 1 EVA、PVDF、EVA+PVDF 的热解模型

Fig. 1 Pyrolysis models for EVA, PVDF and EVA+PVDF

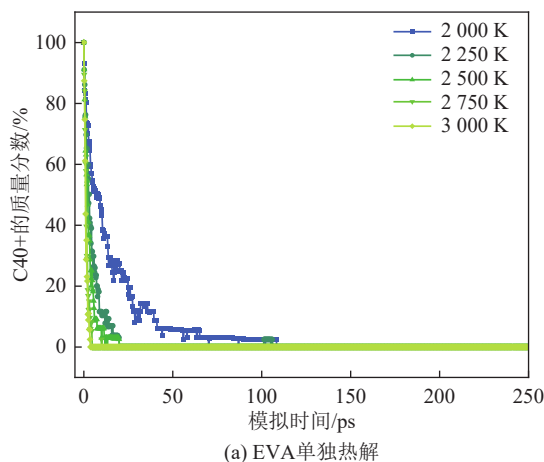
1.2 模拟设置

本研究采用开源软件 LAMMPS 中的 reax 模块对优化后的模型进行热解模拟,通过严格的能量最小化和系统平衡步骤,确保了模拟体系在目标温度下的稳定性和反应数据的可靠性。为研究温度对不同高分子材料热解行为的影响,所有模拟均在 NVT 系综下进行,选用了周期性边界条件和 Berendsen 温控方法,温控的阻尼时间常数为 0.1 ps^[23]。为缩短模拟所需计算时间和成本,采用比实验温度高出 500 ~ 1 100 K 的升温策略,以保证特征化学反应能在可接受的模拟时间内完成,该升温策略的可行性已被相关研究证实^[24-26]。据此,本研究设定的模拟温度分别为 2 000、2 250、2 500、2 750、3 000 K,模拟时长为 250 ps,时间步长为 0.25 fs。

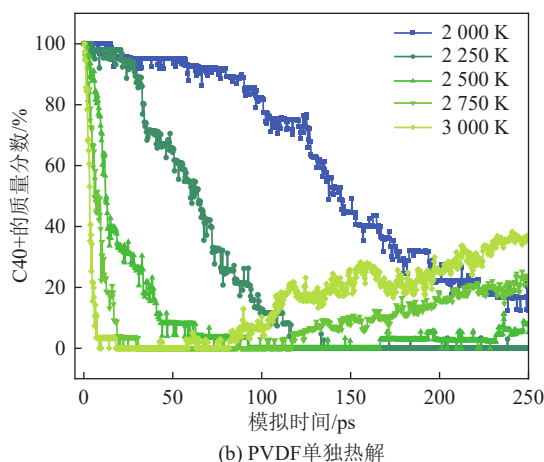
2 结果与分析

2.1 EVA 和 PVDF 单独热解产物分布及主要气态产物组成

笔者将反应初期观察到的 C40+产物当成未完全分解的 EVA/PVDF 高分子,因此也将 C40+产物的质量分数作为衡量高分子的热解转化率。由图 2 可知,EVA 和 PVDF 的转化率均随反应温度而快速升高。当温度高于 2 500 K 时,EVA 和 PVDF 均可在 50 ps 内完全分解。然而,随着反应时间进一步推进,PVDF 中 C40+产物的质量分数有明显的上升,说明此时 PVDF 热解衍生物发生了二次缩聚反应。这主要是由于 PVDF 中的 F 以 HF 脱除后,引起短链的缩聚芳构化,形成多环芳烃乃至焦炭^[27]。对比 EVA 和 PVDF 的分解过程可以发现,EVA 相较于 PVDF 更易分解,这与以往 EVA 和 PVDF 热



(a) EVA 单独热解



(b) PVDF 单独热解

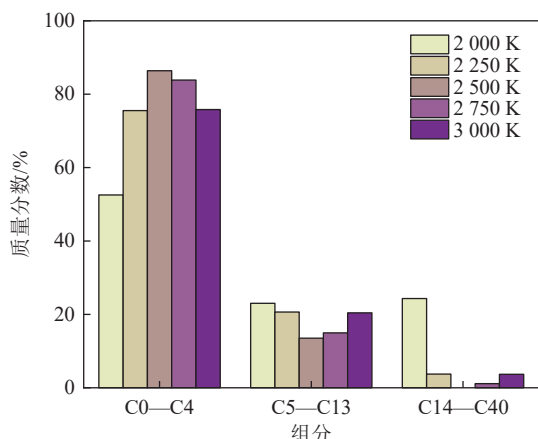
图 2 EVA 与 PVDF 单独热解时 C40+产物质量分数

Fig. 2 Mass fraction of C40+ product under case of EVA pyrolysis and PVDF pyrolysis

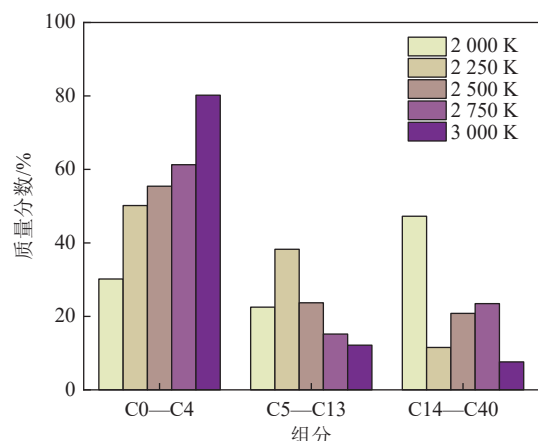
重分析的研究结果是一致的。

EVA 与 PVDF 单独热解时气液态产物碳数分布如图 3 所示。在气液相产物分布中,通常认为 C0—C4 为气相产物、C5—C13 为轻组分流相产物、C14—C40 为重组分流相产物。EVA 热解的气相产物相对产率随反应温度先升高后下降,而液相产物产率则呈现出相反的趋势。PVDF 热解的气相产物随反应温度持续升高,而轻组分流相产物则先升高后下降。伴随轻组分流相产物产率下降同时,重组分流相产物的产率则对应升高。该模拟结果表明,PVDF 中的轻组分流相产物会同时发生二次裂解和缩聚反应,导致气相和重组分流相产物产率上升。

EVA 与 PVDF 单独热解时气态产物种类及数目如图 4 所示。EVA 热解的气相产物的主要组分为乙烯、二氧化碳和甲烷,伴随有少量的氢气、水蒸气和乙炔。二氧化碳和甲烷产物主要由醋酸酯基侧链脱除并发生二次分解反应生成;乙烯则由主链通过 β -断裂生成。乙烯产率随温度上升先升高后下降,



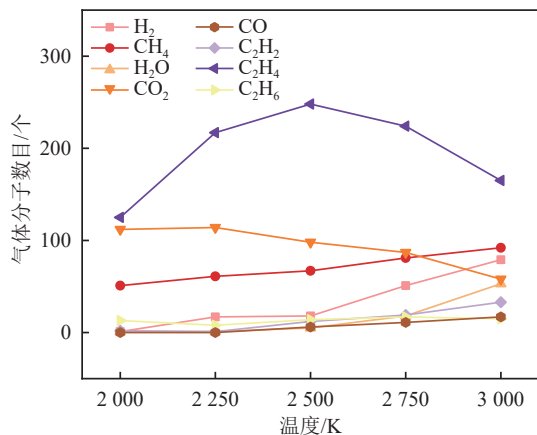
(a) EVA 单独热解



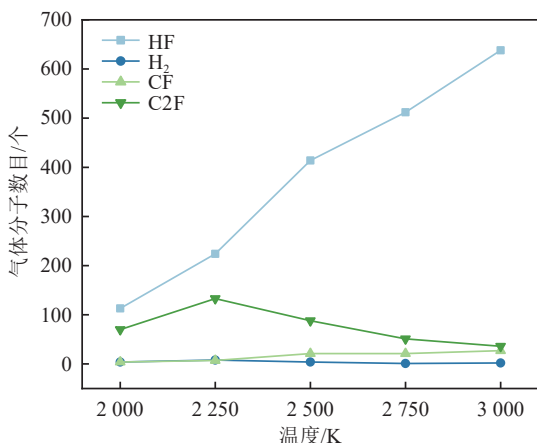
(b) PVDF 单独热解

图 3 EVA 与 PVDF 单独热解时气液态产物碳数分布

Fig. 3 Carbon number distribution of gaseous and liquid products under case of EVA pyrolysis and PVDF



(a) EVA 单独热解



(b) PVDF 单独热解

图 4 EVA 与 PVDF 单独热解时气态产物种类及数目

Fig. 4 Species and number of gaseous products under case of EVA pyrolysis and PVDF pyrolysis

二氧化碳产率则随温度升高而持续下降, 甲烷、水蒸气和氢气产率则持续上升。很明显, 温度升高导致乙烯发生分解, 产生的氢气、甲烷等产物进一步与二氧化碳发生逆水煤气变换和干式重整反应。根据碳原子数目, 笔者将 PVDF 热解产生的气相产物分为氢气、HF、C1F 和 C2F。HF 产率随温度升高出现快速上升的趋势, C1F 产率则略有上升; C2F 产率随温度升高先上升后下降。结合 HF 和 C2F 产率的变化规律, 可以推测 C2F 会发生二次分解产生 HF, 剩余的 C2 进一步发生缩聚反应。

2.2 EVA 和 PVDF 共热解交互作用

为阐明共热解对 EVA 和 PVDF 热解过程的影响, 下文将分别从共热解转化率、含氧/含氟物质生成规律、特征化学键变化等多个方面进行阐述。

2.2.1 共热解转化率

为说明共热解对高分子聚合物转化率的影响, 在两者共热解无交互作用的假设下, 基于 EVA 和 PVDF 单独热解时 C40+质量分数模拟结果, 计算了

两者共热解的数学加和结果, 并与 EVA+PVDF 共热解实际模拟结果进行对比。如图 5 所示, 当反应温度为 2 200、2 250、2 500 K 时, 实际模拟 C40+产物质量分数要远低于其数学加和的数值, 说明共热解显著促进高分子链的断裂, 极有可能是 EVA 热解生成的自由基促进了 PVDF 长链的断裂。当反应温度为 2 750、3 000 K 时, 共热解对高分子链断裂的促进作用因反应温度的升高而逐渐减弱。然而, 随着反应时间推进, 共热解中 C40+产物质量分数上升趋势减弱, 说明因脱 F 引起的二次缩聚反应受到抑制。

2.2.2 含氧物质的生成

为了说明共热解对 EVA 热解特性的影响, 笔者首先统计了仅可能由 EVA 热解生成的产物, 包括 CO_2 和 $\text{CH}_3\text{COO}\cdot$ 这 2 种物质。由图 6—图 7 可知, 当 EVA 单独热解时, CO_2 最大生成数目受温度影响不大, 表明在该温度区间内 EVA 热解生成 CO_2 的路径可能受控于一级反应或受限于初始官能团分解。而引入 PVDF 进行共热解后, CO_2 的释放行

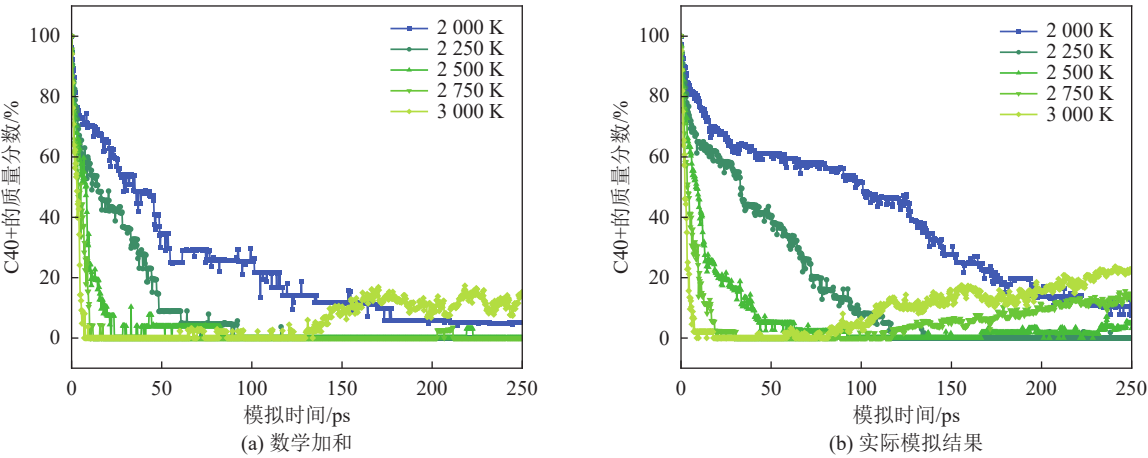


图 5 EVA+PVDF 共热解 C40+产物质量分数

Fig. 5 Mass fraction of C40+ product under case of co-pyrolysis of EVA and PVDF

为发生显著改变，其影响主要体现在 2 个阶段：①在反应初期（50 ps 之前），共热解体系明显促进了 CO_2 的快速生成，这可能源于 PVDF 热解产生的酸性物种或自由基对 EVA 中醋酸基团脱羧反应的催化作用；②在反应中后期，共热解条件下 CO_2 的消耗量显著增加，且该消耗量（定义为 EVA 单独热解与共热解时 CO 生成量的差值）随温度升高而增大，可能由于 CO_2 与 PVDF 热解残碳发生了碳气化反应。

2.2.3 含氟物质的生成

图 8 对比了不同温度下 PVDF 单独热解和

EVA+PVDF 共热解 HF 生成的数目。从结果中可以看出，在较低温度区间（如低于 2 500 K），共热解体系对 HF 的生成未表现出明显的促进效果，这可能源于该阶段 EVA 和 PVDF 尚未发生显著交互作用，两者主要发生独立的热解路径。当温度达到 2 500 K 时，共热解对 HF 的生成呈现一定的抑制趋势，推测 EVA 热解产生的中间体可能覆盖 PVDF 表面的活性位点延缓了 HF 的生成。而当温度升高至 2 750 K 以上时，EVA 的引入显著促进了 HF 的释放，且促进作用随温度上升而增强。该现象可能与

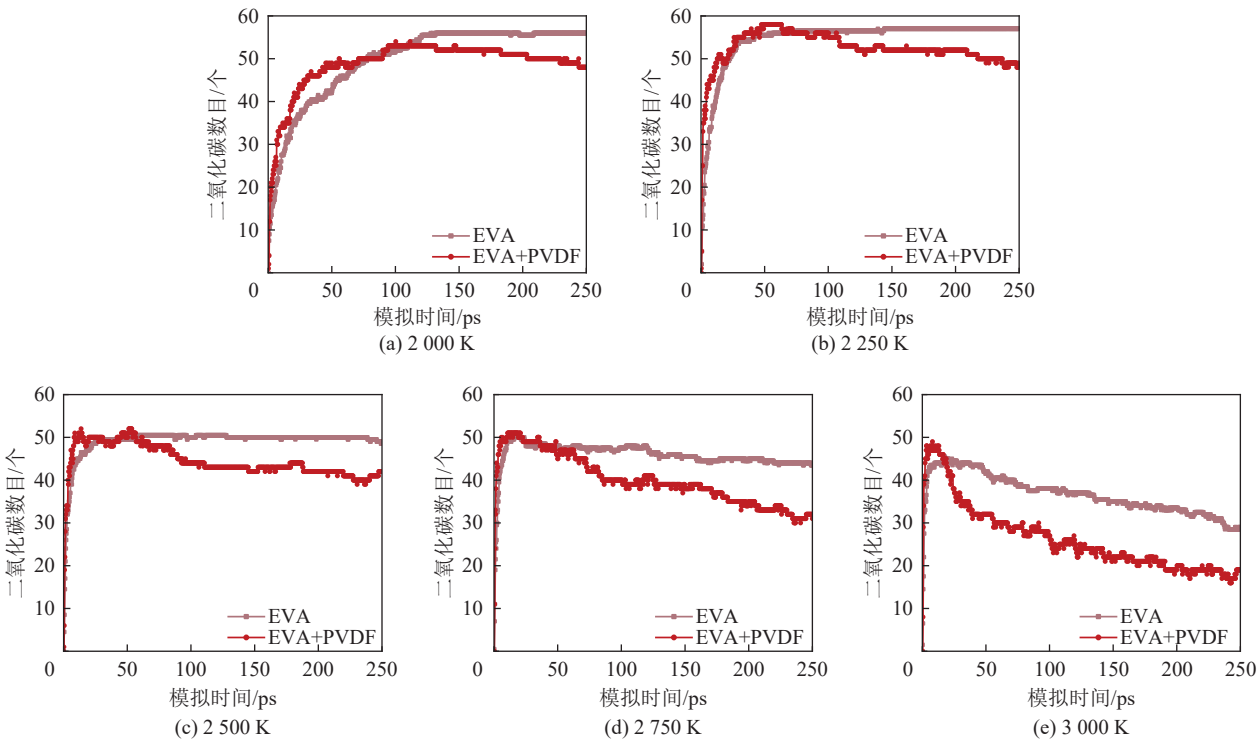


图 6 EVA 单独热解与 EVA/PVDF 共热解 CO_2 生成数目对比

Fig. 6 Comparison on CO_2 numbers between EVA pyrolysis and co-pyrolysis of EVA/PVDF

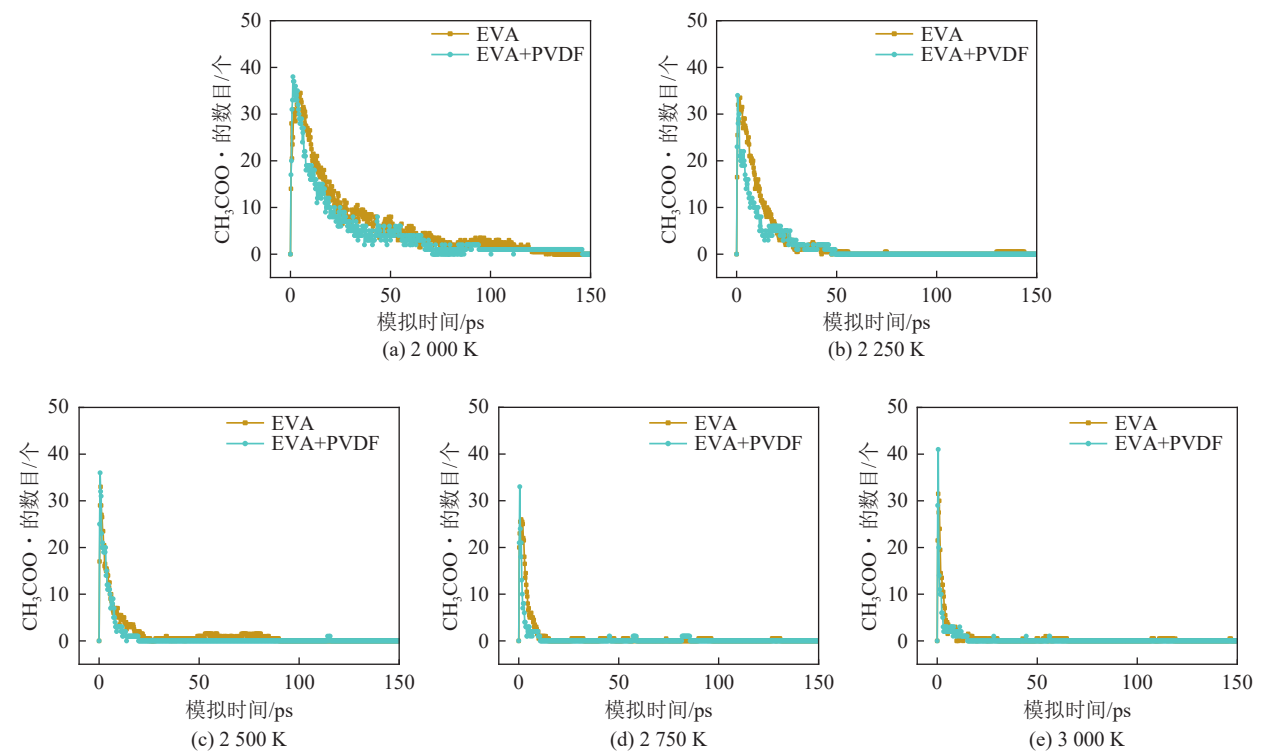


图7 EVA单独热解与EVA+PVDF共热解 $\text{CH}_3\text{COO}\cdot$ 生成数目对比

Fig. 7 Comparison on $\text{CH}_3\text{COO}\cdot$ numbers between EVA pyrolysis and co-pyrolysis of EVA/PVDF

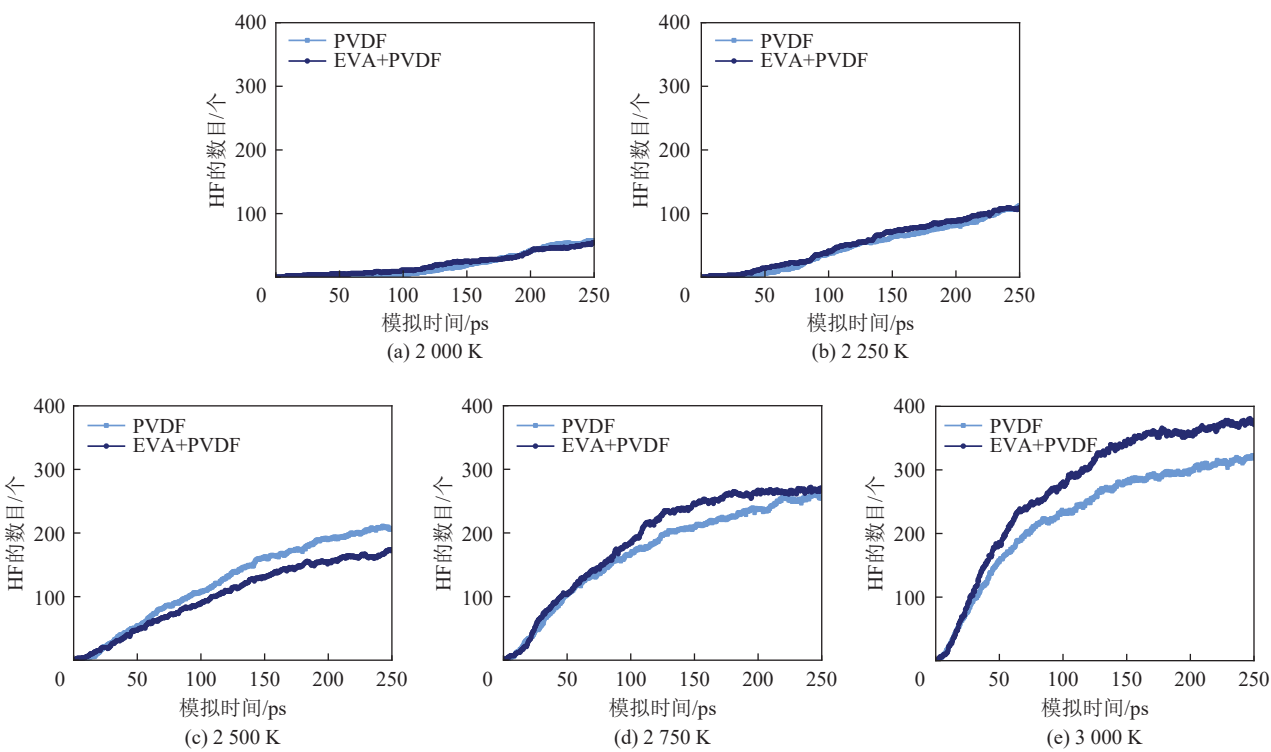


图8 PVDF单独热解与EVA+PVDF共热解HF生成数目对比

Fig. 8 Comparison on HF numbers between EVA pyrolysis and co-pyrolysis of EVA/PVDF

高温下 EVA 热解生成的活性氢物种促进了 PVDF 中 C—F 键的断裂有关。PVDF 单独热解与 EVA+PVDF 共热解 C1—C3 氟化烃生成数目对比如图 9 所示。

2.2.4 特征化学键变化

图 10 对比了 EVA 单独热解和 EVA+PVDF 共热解时 C—O 键数目变化。可以看到，共热解在反应

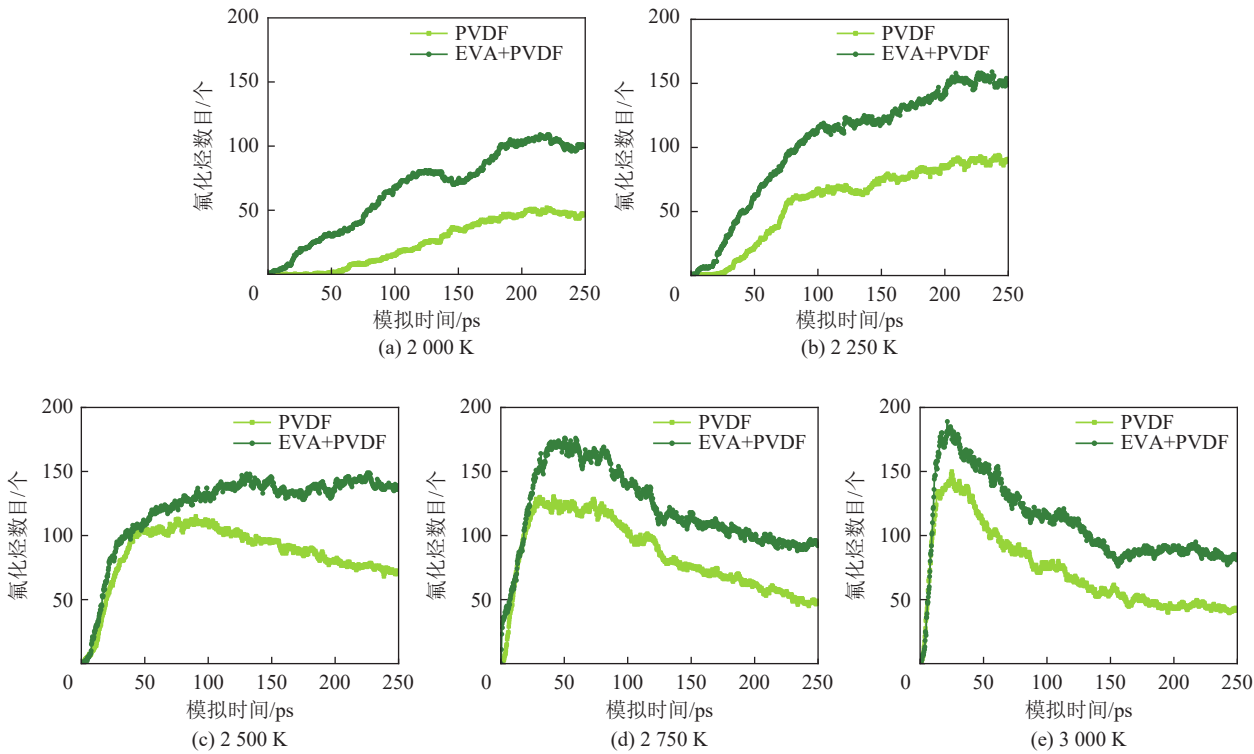


图 9 PVDF 单独热解与 EVA+PVDF 共热解 C1—C3 氟化烃生成数目对比

Fig. 9 Comparison on numbers of C1 to C3 fluorinated hydrocarbons between EVA pyrolysis and co-pyrolysis of EVA/PVDF

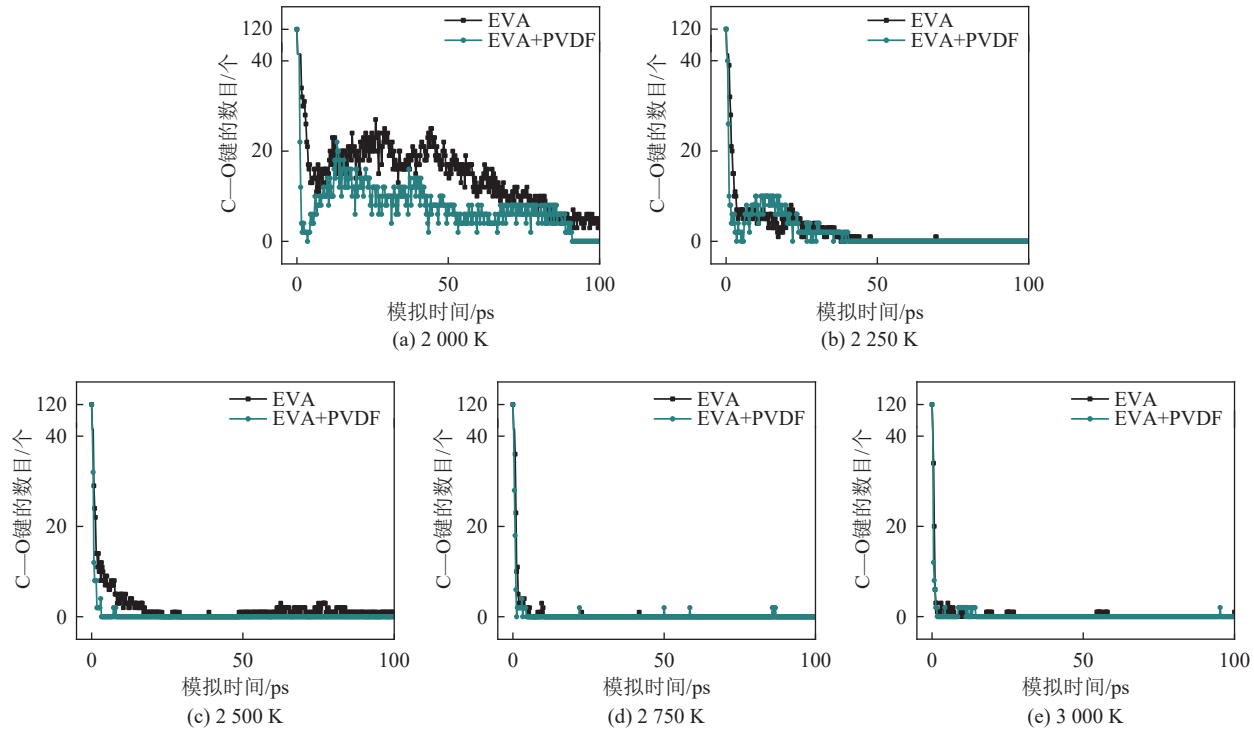


图 10 EVA 单独热解与 EVA+PVDF 共热解 C—O 键数目变化对比

Fig. 10 Comparison on number of C—O bonds between EVA pyrolysis and co-pyrolysis of EVA/PVDF

初期对 C—O 键断裂具有一定的促进作用，且该作用在反应温度较高是逐渐减弱。

图 11 对比了 PVDF 单独热解和 EVA+PVDF 共热解条件下 C—F 键数目变化。可以发现，当温度为

2 000、2 250 K 时，共热解对 PVDF 中 C—F 键的断裂影响不显著；而当温度为 2 500 K 时，共热解一定程度上抑制了 C—F 键断裂；提高反应温度则促进了 C—F 键断裂。总体而言，C—F 键数目也与

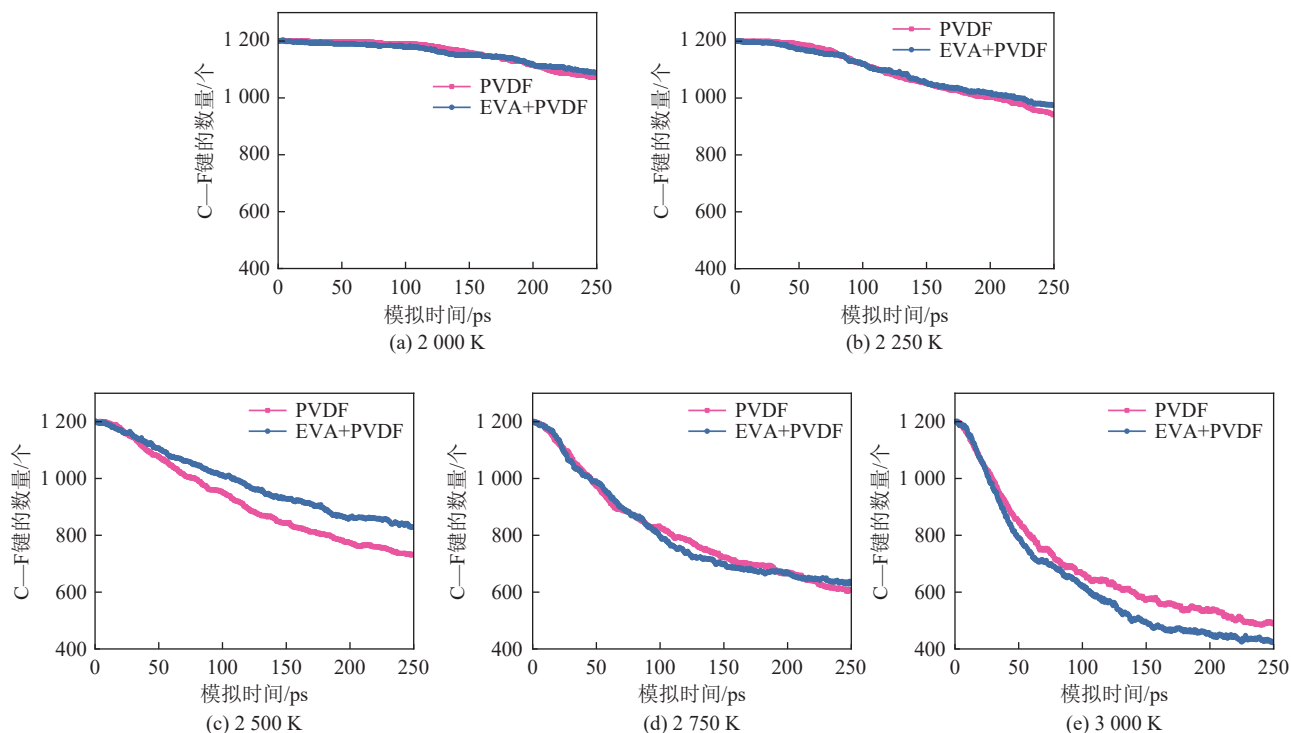


图 11 PVDF 单独热解与 EVA+PVDF 共热解 C—F 键数目变化对比

Fig. 11 Comparison on number of C—F bonds between EVA pyrolysis and co-pyrolysis of EVA/PVDF

HF 生成数目变化规律是一致的。

3 结 论

1) ReaxFF MD 模拟 EVA 和 PVDF 的热解行为与以往研究中热重分析结果较为吻合, EVA 的热稳定性较 PVDF 更低, EVA 热解气相产物主要由乙烯及 CO_2 组成, PVDF 气相热解产物中的主要组分为 HF。随着反应温度升高, PVDF 热解存在一次裂解及二次缩聚反应。

2) 与单独热解相比, 共热解能够促进 EVA/PVDF 热解转化, 而且能够抑制因高温引起的 PVDF 二次缩聚反应。PVDF 可在反应初期促进 EVA 分解产生 CO_2 ; 当反应温度较高时, CO_2 可与 PVDF 热解残碳发生碳气化反应。与 PVDF 单独热解相比, EVA 能够促进小分子氟代烃产物生成; 当反应温度较高时, EVA 促进 PVDF 中的 F 元素以 HF 形式转化, 有利于氟的定向脱除与回收。

3) 基于上述研究结果可知, 可通过提高热解反应温度, 促进 EVA 和 PVDF 间的正向交互作用, 以减少废弃光伏组件热解残碳、提高热解油品质量(降低分子量)、调控 F 元素以 HF 的形式生成, 便于实现废弃光伏组件的高效回收与处理。

参考文献 (References):

[1] 邹才能, 李士祥, 熊波, 等. 中国建设“能源强国”的内涵、路径

与意义[J]. *石油勘探与开发*, 2025, 52(2): 463–477.

ZOU Caineng, LI Shixiang, XIONG Bo, et al. Connotation, pathways, and significance of building China into an “energy powerhouse” [J]. *Petroleum Exploration and Development*, 2025, 52(2): 463–477.

[2] 王敏, 胡中发, 白冰, 等. 退役晶硅光伏组件解离与资源化研究进展[J]. *煤炭学报*, 2024, 49(10): 4188–4202.

WANG Min, HU Zhongfa, BAI Bing, et al. A review on dissociation and resource utilization of decommissioned crystalline silicon photovoltaic modules[J]. *Journal of China Coal Society*, 2024, 49(10): 4188–4202.

[3] 王魁, 李金惠, 刘丽丽. 退役晶硅光伏组件中材料物质回收技术现状分析与建议[J]. *中南大学学报(自然科学版)*, 2024, 55(6): 2117–2128.

WANG Kui, LI Jinhui, LIU Lili. Current situation analysis and suggestions on recycling technologies for materials contained in end-of-life crystalline silicon photovoltaic modules[J]. *Journal of Central South University (Science and Technology)*, 2024, 55(6): 2117–2128.

[4] FIANDRA V, SANNINO L, ANDREOZZI C. Photovoltaic waste as source of valuable materials: A new recovery mechanical approach[J]. *Journal of Cleaner Production*, 2023, 385: 135702.

[5] WANG J, FENG Y, SHI M, et al. A comparative study of mechanical crushing and pyrolysis techniques for separation and recovery of discarded polycrystalline silicon photovoltaic modules[J]. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2024, 275: 113020.

[6] LEE J K, LEE J S, AHN Y S, et al. Photovoltaic performance of C—Si wafer reclaimed from end-of-life solar cell using various mixing ratios of HF and HNO_3 [J]. *Solar Energy Materials and*

- Solar Cells*, 2017, 160: 301–306.
- [7] CHITRA, SAH D, SAINI P, et al. Recovery and analysis of polymeric layers from waste solar modules by chemical route[J]. *Solar Energy*, 2022, 244: 31–39.
- [8] CHEN X, LIU J Y, LIN Z T, et al. Reutilizing waste photovoltaic plastics by pyrolysis: Dynamics, thermodynamics, mechanisms, products, and optimization[J]. *Fuel*, 2025, 384: 134005.
- [9] ZHANG L G, XU Z M. Separating and recycling plastic, glass, and gallium from waste solar cell modules by nitrogen pyrolysis and vacuum decomposition[J]. *Environmental Science & Technology*, 2016, 50(17): 9242–9250.
- [10] WANG J, FENG Y, HE Y Q. The research progress on recycling and resource utilization of waste crystalline silicon photovoltaic modules[J]. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2024, 270: 112804.
- [11] LI F, TAO J Y, KUMAR A, et al. Pyrolysis characteristics and kinetics of waste photovoltaic module: A TG-MS-FTIR study[J]. *Journal of Cleaner Production*, 2024, 444: 141267.
- [12] KLUGMANN-RADZIEMSKA E, OSTROWSKI P, DRABCZYK K, et al. Experimental validation of crystalline silicon solar cells recycling by thermal and chemical methods[J]. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2010, 94(12): 2275–2282.
- [13] 钟洪麟, 李丁丁, 刘茜, 等. 全球退役光伏组件回收研究热点、演化趋势与展望 [J]. *生态学报*, 2025, 45(9): 4079–4106.
ZHONG Honglin, LI Dingding, LIU Qian, et al. Global hotspots, trends, and future prospects of waste photovoltaic modules recycling: A bibliometric analysis[J]. *Acta Ecologica Sinica*, 2025, 45(9): 4079–4106.
- [14] ARYAN V, FONT-BRUCART M, MAGA D. A comparative life cycle assessment of end-of-life treatment pathways for photovoltaic backsheets[J]. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 2018, 26(7): 443–459.
- [15] 文劲松. 塑料薄膜之光伏背板市场分析 [J]. *中国塑料*, 2022, 36(12): 71–77.
WEN Jinsong. Market analysis of photovoltaic backsheets based on plastic films[J]. *China Plastics*, 2022, 36(12): 71–77.
- [16] 董莉, 周潇云, 刘景洋, 等. 废光伏组件乙烯-醋酸乙烯酯共聚物热解研究 [J]. *环境污染与防治*, 2020, 42(10): 1211–1215.
DONG Li, ZHOU Xiaoyun, LIU Jingyang, et al. Study on thermal decomposition of ethylene-vinylacetate copolymer in waste photovoltaic modules[J]. *Environmental Pollution & Control*, 2020, 42(10): 1211–1215.
- [17] 丁湧, 李文建, 陈昭宇, 等. 废旧晶体硅光伏组件 EVA 有氧热解动力学与产物特性 [J]. *化工学报*, 2024, 75(9): 3310–3319.
- DING Yong, LI Wenjian, CHEN Zhaoyu, et al. Aerobic pyrolysis kinetic and product characteristics of waste crystalline silicon photovoltaic modules' EVA[J]. *CIESC Journal*, 2024, 75(9): 3310–3319.
- [18] DE JESUS SILVA A J, CONTRERAS M M, NASCIMENTO C R, et al. Kinetics of thermal degradation and lifetime study of poly(vinylidene fluoride) (PVDF) subjected to bioethanol fuel accelerated aging[J]. *Heliyon*, 2020, 6(7): e04573.
- [19] SHI Y J, MU H X, YOU J Q, et al. Confined water-encapsulated activated carbon for capturing short-chain perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances from drinking water[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2023, 120(27): e2219179120.
- [20] LIU S H, WEI L H, ZHOU Q, et al. Simulation strategies for ReaxFF molecular dynamics in coal pyrolysis applications: A review[J]. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 2023, 170: 105882.
- [21] CHEN J W, WANG Q T, WEI H D, et al. Molecular dynamic study on mechanisms of polyvinylidene fluoride decomposition by using supercritical water[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2022, 431: 133958.
- [22] SHEN L Y, LI H Y, YANG X, et al. Sustainable production of carbon nanomaterials based on TPT backsheets pyrolysis from end-of-life photovoltaic modules[J]. *Separation and Purification Technology*, 2024, 339: 126689.
- [23] 李晓霞, 郑默, 张婷婷, 等. 大规模反应分子动力学模拟新进展 [C]//中国化学会. 中国化学会第 14 届全国计算(机)化学学术会议暨分子模拟国际论坛会议手册. 南京: 中国科学院过程工程研究所, 2017: 124.
- [24] SAHA B, SCHATZ G C. Carbonization in polyacrylonitrile (PAN) based carbon fibers studied by ReaxFF molecular dynamics simulations[J]. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2012, 116(15): 4684–4692.
- [25] LIU L C, BAI C, SUN H, et al. Mechanism and kinetics for the initial steps of pyrolysis and combustion of 1, 6-dicyclopropane-2, 4-hexyne from ReaxFF reactive dynamics[J]. *The Journal of Physical Chemistry A*, 2011, 115(19): 4941–4950.
- [26] WANG Q D, WANG J B, LI J Q, et al. Reactive molecular dynamics simulation and chemical kinetic modeling of pyrolysis and combustion of n-dodecane[J]. *Combustion and Flame*, 2011, 158(2): 217–226.
- [27] XU B, HOU S S, CHU M, et al. An activation-free method for preparing microporous carbon by the pyrolysis of poly(vinylidene fluoride) [J]. *Carbon*, 2010, 48(10): 2812–2814.