

苏州纳米所薄膜太阳能电池能级排布研究取得新进展

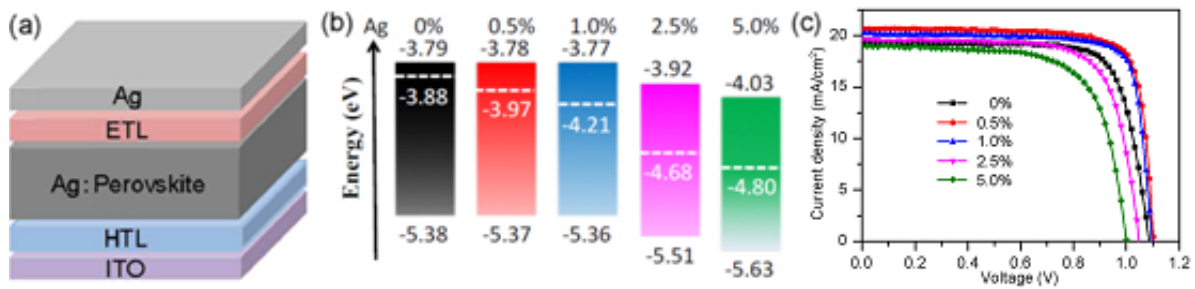


图1.(a)钙钛矿型太阳能电池结构示意图；(b)不同银注入比例下的钙钛矿能级图；(c)不同银注入比例下的钙钛矿器件电压-电流效率曲线。

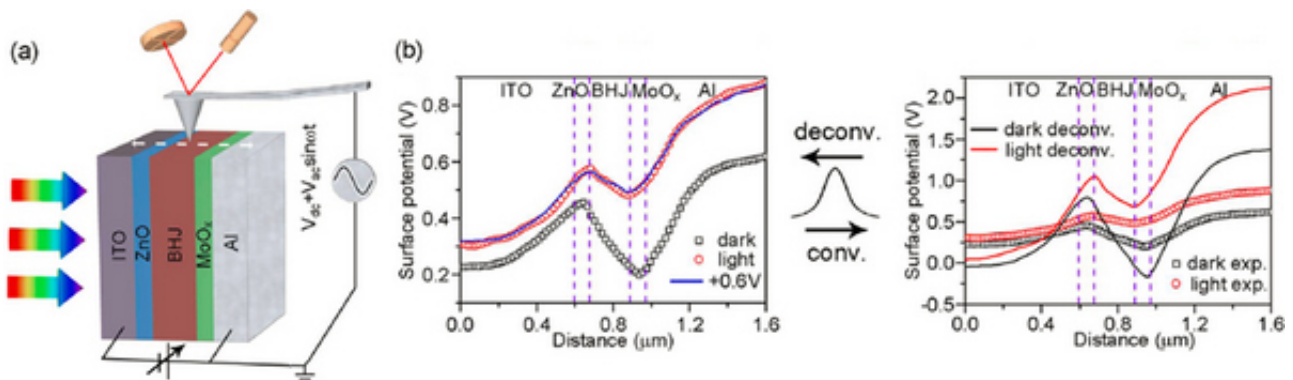


图2.(a)横截面扫描开尔文探针显微镜表征反式结构有机太阳能电池能级排布示意图；(b)通过反卷积算法还原器件真实的电势分布。

近年来，新型薄膜太阳能电池，例如有机/无机杂化钙钛矿器件、有机光伏器件等，以其低成本、高效率、结构简单、柔性携带等优点，引起了广泛关注。对于薄膜太阳能电池而言，器件能级排布决定着光生载流子的分离、复合、传输和收集等微观物理过程，是器件性能的重要决定因素之一。如何有效调控和表征器件能级排布，是理解器件工作机理，指导材料筛选和器件工艺优化等的重要切入点。

近日，中国科学院苏州纳米技术与纳米仿生研究所研究员陈立桅课题组在薄膜太阳能电池能级排布的调控和表征两方面研究中取得新进展：

1.在有机/无机杂化钙钛矿光伏器件中，深入理解材料掺杂、能级调控与器件性能的相互联系。第一性原理计算表明，金属离子的外层电子轨道是有机/无机杂化钙钛矿能带结构的重要决定因素，进而影响其材料的光学和电学性质。国内外多个研究小组报道，少量金属离子替代 Pb^{2+} 可以有效提升器件性能，但能级结构演化与器件性能的相互作用机制缺乏深入研究。陈立桅课题组使用Ag+替换部分 Pb^{2+} 在钙钛矿中引入受主态，使得原本呈n型的钙钛矿材料的费米能级向禁带中央移动，呈现本征半导体的性质，这样的变化有效降低钙钛矿中的电子浓度，有益于载流子的平衡运输。通过优化银掺杂比例，提高钙钛矿材料结晶性，改善薄膜形貌和载流子动力学。在这些因素协同促进下，反式结构钙钛矿平面异质结器件（ITO/Cu:NiOx/perovskite/PCBM/Ag）效率从16.0%提高到18.4%（图1）。进一步地，通过等效电路模型证实了钙钛矿载流子浓度与器件性能的相互作用关系。相关研究成果发表在Nano Lett.上。

2.在有机薄膜光伏器件中，在器件工况下定量表征了反式器件的能级排布。对于薄膜太阳能电池层层堆叠这种垂直封闭型结构，目前缺乏有效的手段直观地测量器件工况下(operando)的能级结构。陈立桅课题组在Nat. Commun.报道了横截面扫描开尔文探针显微镜(cross-sectional SKPM)，可以实现短路、开路、暗态和光照等器件工况下的能级结构测量，但能级排布的定量测量依然悬而未决。进一步研究，陈立桅课题组发现针尖/悬梁臂卷积效应是影响器件能级结构的定量测量的重要因素，在存在界面能级突变的反型器件中(ITO/ZnO/BHJ/MoOx/Al)卷积效应甚至能掩盖真实的电势分布，得出方向错误的内建电场。为解决这一问题，他们与陆书龙课题组合作，用分子束外生长的GaAs/GaInP异质结校准针尖传递函数，借助反卷积算法去除针尖平均效应，还原出反式器件真实的能级排布（图2）。相关研究成果发表在Nano Energy上，并在《物理化学学报》撰写专论。

研究工作得到了美国华盛顿大学教授Alex Jen，苏州纳米所研究员陆书龙和马昌期等的支持。研究工作受到国家自然科学基金、科技部重点研发计划以及中科院科研装备项目的经费资助与研发条件支持。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/116201.html>