北大工学院在调控钙钛矿多晶薄膜晶面取向研究重要进展

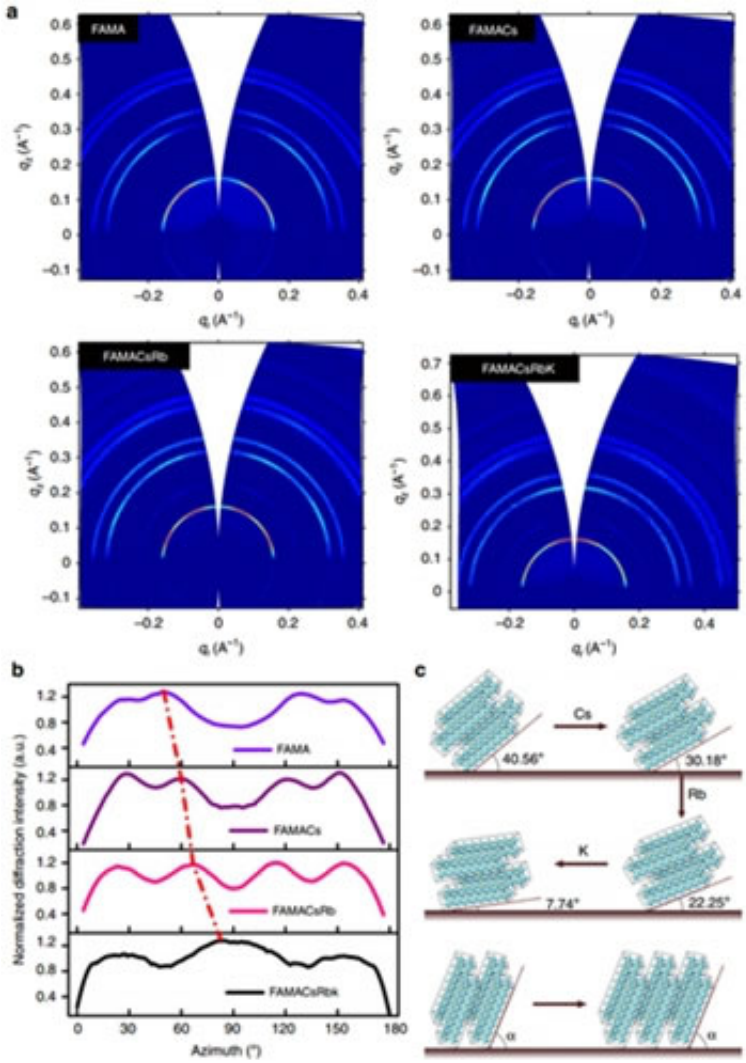
近年来，有机无机杂化钙钛矿材料因其可调的带隙、高吸收系数、双极载流子传输性质、长载流子扩散长度和低缺陷态密度等卓越的光电特性掀起了光伏能源领域的研究浪潮。仅仅经历九年的技术发展，多晶钙钛矿薄膜太阳能电池的器件性能已经可以和有着60年研究历史的晶硅电池相媲美，其发展速度远远超过历史上任何一种太阳能电池技术。从2009年至今，世界范围内的研究人员开发了一步旋涂法、两步旋涂法、蒸汽辅助法、刮涂法等多种薄膜制备工艺和溶剂工程、成分工程、界面工程等多项器件优化准则，在提高钙钛矿多晶薄膜质量和器件结构优化设计等宏观尺度上持续推动着太阳能电池向高转化效率迈进。然而目前，对于钙钛矿材料和器件在微观和介观尺度的深度研究仍然较少，材料微结构、载流子输运特性与器件性能间构效关系的机理性认识的缺失直接阻碍器件效率的进一步提升，基于此，探究材料微结构与光伏性能之间的潜在规律将是提高钙钛矿太阳能电池性能的关键一步。

北京大学工学院周欢萍团队利用国家大科学装置中心上海光源的同步辐射X射线掠入射广角散射技术（GIWAXS），系统性研究了当前保持最高效率的混合阳离子体系钙钛矿多晶薄膜的晶面择优取向规律，以此为基础，通过多元阳离子级联的精细掺杂可控地调节了特定晶面相对于基底堆叠排列的方向，得到了更加优异的器件性能。进一步，团队从载流子输运特性层面研究了不同择优取向关系的多晶薄膜与器件性能之间的内在规律，发现平行于基底的（001）晶面族的强择优取向将会促进载流子在薄膜内的高速迁移，提高载流子在钙钛矿与传输层界面处的传输速率和收集效率，特定的晶面堆叠方式与择优取向关系提供了更加高效的载流子输运行为，因此带来了电池器件性能的大幅改善。该研究结果证实了多元阳离子的级联掺杂对多晶薄膜晶面择优取向可控的有效调控，为材料微结构与光伏性能构效关系带来机理性的理解并为当前电池突破效率瓶颈提供了新的设计思路。该成果以“ Manipulation of facet orientation in hybrid perovskite polycrystalline films by cation cascade ”为题发表于著名期刊Nature Communications【Nature Communications 9, 2793 （2018）. DOI: 10.1038/s41467-018-05076-w】，北京大学与上海应用物理研究所联合培养博士生郑官豪杰与北京理工大学博士生朱城为该论文的共同第一作者。北京大学为第一单位。

碱金属阳离子多元级联掺杂的取向演变分析：(a)FAMA, FAMA-Cs, FAMA-CsRb, FAMA-CsRbK级联掺杂多晶薄膜的GIWAXS花样;(b)FAMA, FAMA-Cs, FAMA-CsRb, FAMA-CsRbK级联掺杂多晶薄膜(001)晶面的方位角积分强度图;(c)级联掺杂多晶薄膜晶面取向位向演变示意图

该研究系统调研了碱金属阳离子Cs+、Rb+、K+的多元级联掺杂对于晶体堆叠取向的影响，通过精细的掺杂实现可控的取向调控，揭示了微结构层次的择优取向极大地影响钙钛矿材料的光电特性，证实了平行于基底的(001)晶面族的强择优取向将会促进载流子在薄膜内的高速迁移，提高载流子在钙钛矿与传输层界面处的传输速率和收集效率，建立了清晰明确的钙钛矿多晶微结构、器件性能与载流子输运特性三者之间潜在的构效关系，为当前电池突破效率瓶颈提供了新的设计思路。

该项研究是与北京理工大学陈棋教授、上海应用物理研究所高兴宇研究员、中国科学院化学研究所胡劲松研究员、北京理工大学宇航学院洪家旺教授合作完成的。研究得到国家自然科学基金委、国家重点研发计划、青年千人计划等经费支持。



原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/128553.html