

中科院化学研究所在钙钛矿太阳能电池材料与器件方面取得系列进展

近年来, 钙钛矿太阳能电池凭借迅猛的发展受到了全球光伏产业从业人员以及各国科学家的广泛关注。其高的太阳能转换效率、简单的制备工艺和低廉的制造成本使其成为学界和工业界炙手可热的“明星”。钙钛矿太阳能电池实际应用的重要瓶颈和关键问题在于如何实现低成本、大面积、高效率器件及解决稳定性的难题。

在中国科学院战略性先导科技专项和国家自然科学基金委的支持下, 中科院化学研究所分子纳米结构与纳米技术重点实验室研究员胡劲松课题组在这一领域开展了系统且深入的研究, 并于近期与相关合作者们一起取得了系列新进展。他们开发了一种风刀涂布方法, 实现了大面积钙钛矿薄膜、电子传输层(ETL)和空穴传输层(HTL)的高质量涂布, 在全程不需旋涂和反溶剂的情况下, 获得了转换效率(PCE)可达20%以上的电池器件(图1), 为高效率钙钛矿光伏器件的低成本规模化制备提供了一种思路。相关工作发表于近期Cell Press旗下的能源旗舰期刊Joule (DOI: 10.1016/j.joule.2018.10.025)上。在HTL方面, 开发了新型低成本、易制备的二维共轭有机小分子空穴传输材料OMe-TATPyr代替spiro-OMeTAD, 实现了平均20%的PCE (Angew. Chem. Int. Ed. 2018, 57, 10959)。在ETL方面, 研究人员发现在无ETL时透明电极与钙钛矿薄膜间的费米能级差距减小, 接触界面能带弯曲减弱, 因此对光生电子的抽取及光生空穴的排斥作用同时减弱, 使得电子在界面的转移效率急剧下降, 导致载流子复合严重, 器件PCE降低。这一新的理解突破了对钙钛矿光伏器件结构与异质结界面的传统认识, 阐释了无ETL器件PCE低的原因。据此, 提出通过延长载流子寿命来解决无ETL钙钛矿光伏器件转换效率低的新方案。发现当载流子寿命接近微秒时, 无ETL器件的PCE可以接近传统p-i-n结构器件, 并且获得了PCE为19.52%的无ETL钙钛矿光伏器件(图2)。这些结果为突破钙钛矿器件对传统器件结构的依赖迈出了重要的一步, 也为钙钛矿光伏技术的理论研究和低成本规模化制备提供了深入理解和多样化的选择。相关工作发表于Cell Press旗下的化学旗舰期刊Chem上 (Chem, 2018, 4, 2405-2417)。

钙钛矿电池的稳定性是其应用的瓶颈和关键。研究人员在钙钛矿层与HTL间引入高迁移率疏水共轭高分子界面层, 一方面改善空穴的提取效率, 另一方面可以有效阻隔湿气与传输层中添加剂对钙钛矿层的侵蚀, 从而显著提高了钙钛矿太阳能电池的空气稳定性和光电转换效率 (Solar RRL, DOI: 10.1002/solr.201800232, inside cover; Nano Res., 2018, 11, 185-194)。相比于有机无机复合钙钛矿材料, 纯无机钙钛矿材料表现出更优异的热稳定性。其中, 立方相CsPbI₃具有合适的带隙而备受关注, 但其立方相室温下是热力学不稳定相, 因此理解立方相CsPbI₃在合成与器件制备过程中的相不稳定性机制, 进而制备室温下相稳定的光伏相CsPbI₃, 对于其在光伏和光电领域中的应用具有重要的意义。研究人员近期首次从原子尺度上观测到了极性溶剂会诱导立方相CsPbI₃纳米晶晶格发生畸变, 进而相变失稳, 从实验和原理上解释了极性溶剂对立方相CsPbI₃纳米晶稳定性的影响, 揭示了极性溶剂诱导立方相CsPbI₃纳米立方体相变的机制及其多级次自组装成单晶纳米线和微米线的机制(图3)。这一研究结果对理解立方相CsPbI₃相不稳定性机制提供了新的认识, 并为立方相CsPbI₃的制备及保存使用过程中的溶剂选择提供了指导, 推动了其在光电及光伏领域的应用。相关工作发表在J. Am. Chem. Soc., 2018, 140, 11705 – 11715上, 并入选当期封面。

在此基础上, 研究人员发展了一种方法, 通过高介电常数质子性溶剂控制CsPbI₃钙钛矿前驱体结晶时的表面能, 在不引入有机配体或进行金属/卤素掺杂的情况下, 利用一步溶液沉积和低温退火工艺, 获得了在室温下稳定的新光伏相-正交相g-CsPbI₃薄膜。通过XRD精修确定了其晶胞参数, 研究了薄膜的形成机制和能带结构, 并构建了基于g-CsPbI₃薄膜的平面异质结太阳能电池, 获得了11.3%的PCE(图4), 这是报道的全无机纯CsPbI₃钙钛矿太阳能电池的最高效率。由于所得g-CsPbI₃薄膜在室温下的热力学稳定性, 电池表现出显著改善的长达数月的空气稳定性。该研究首次报道了室温下热力学稳定的新型正交光伏相g-CsPbI₃薄膜及其高效率电池器件, 为解决全无机CsPbI₃钙钛矿光伏相室温下结构不稳定问题提供了全新的视角和思路。这一工作与上述工作一起以全文形式连载发表于J. Am. Chem. Soc., 2018, 140, 11716 – 11725。

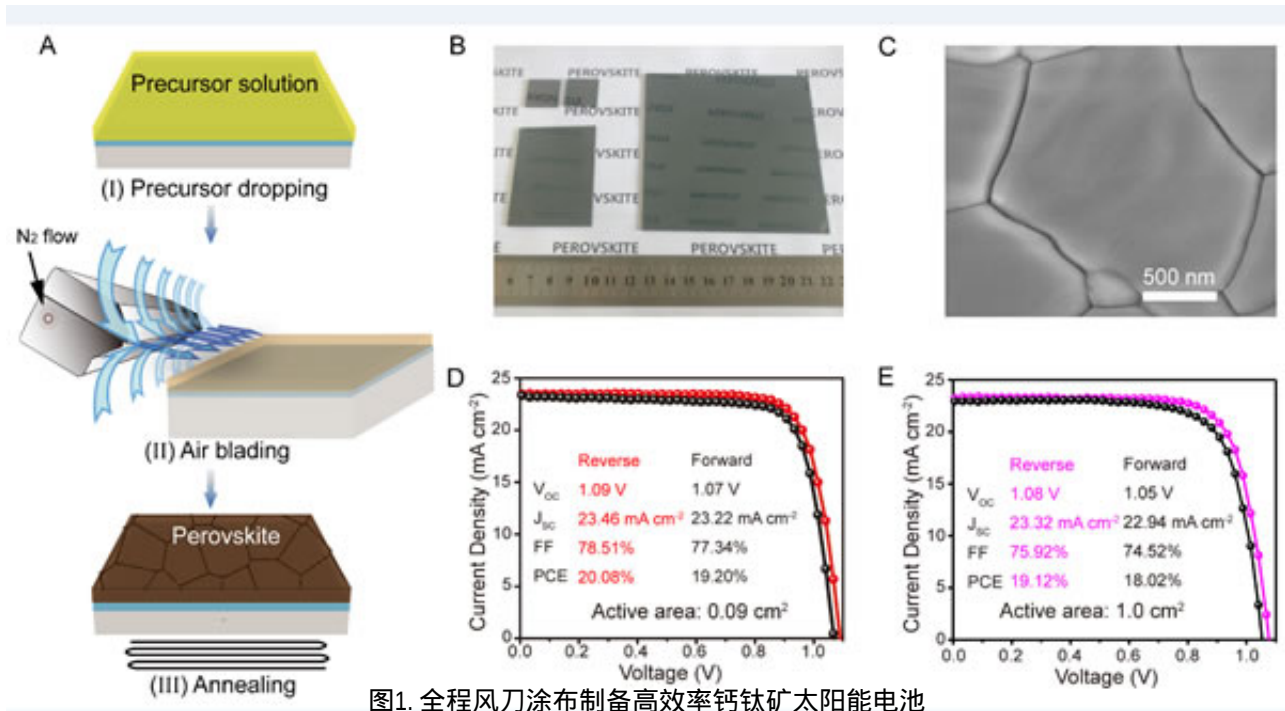


图1. 全程风刀涂布制备高效率钙钛矿太阳能电池

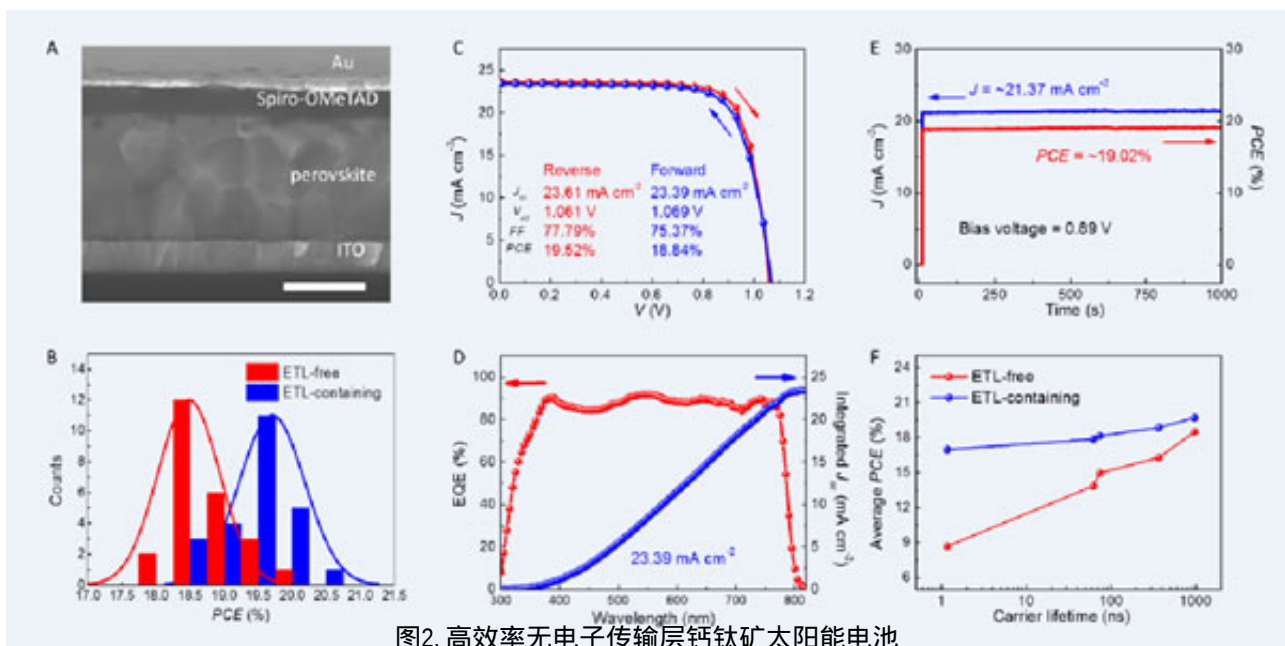


图2. 高效率无电子传输层钙钛矿太阳能电池

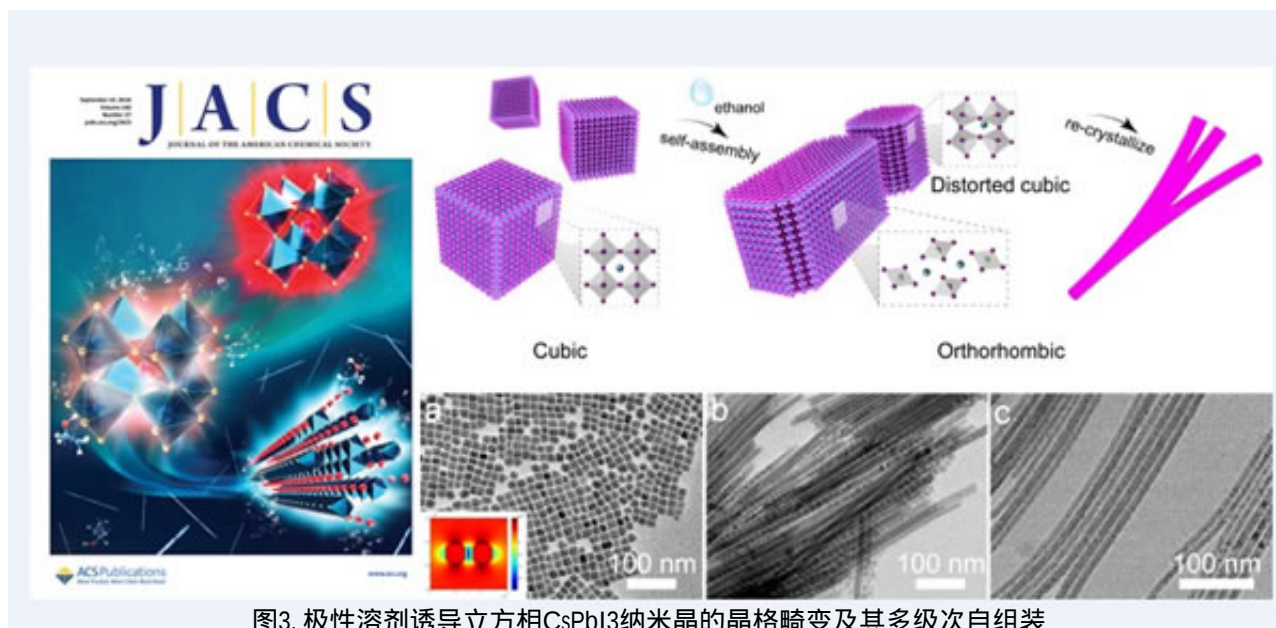


图3. 极性溶剂诱导立方相CsPbI₃纳米晶的晶格畸变及其多级次自组装

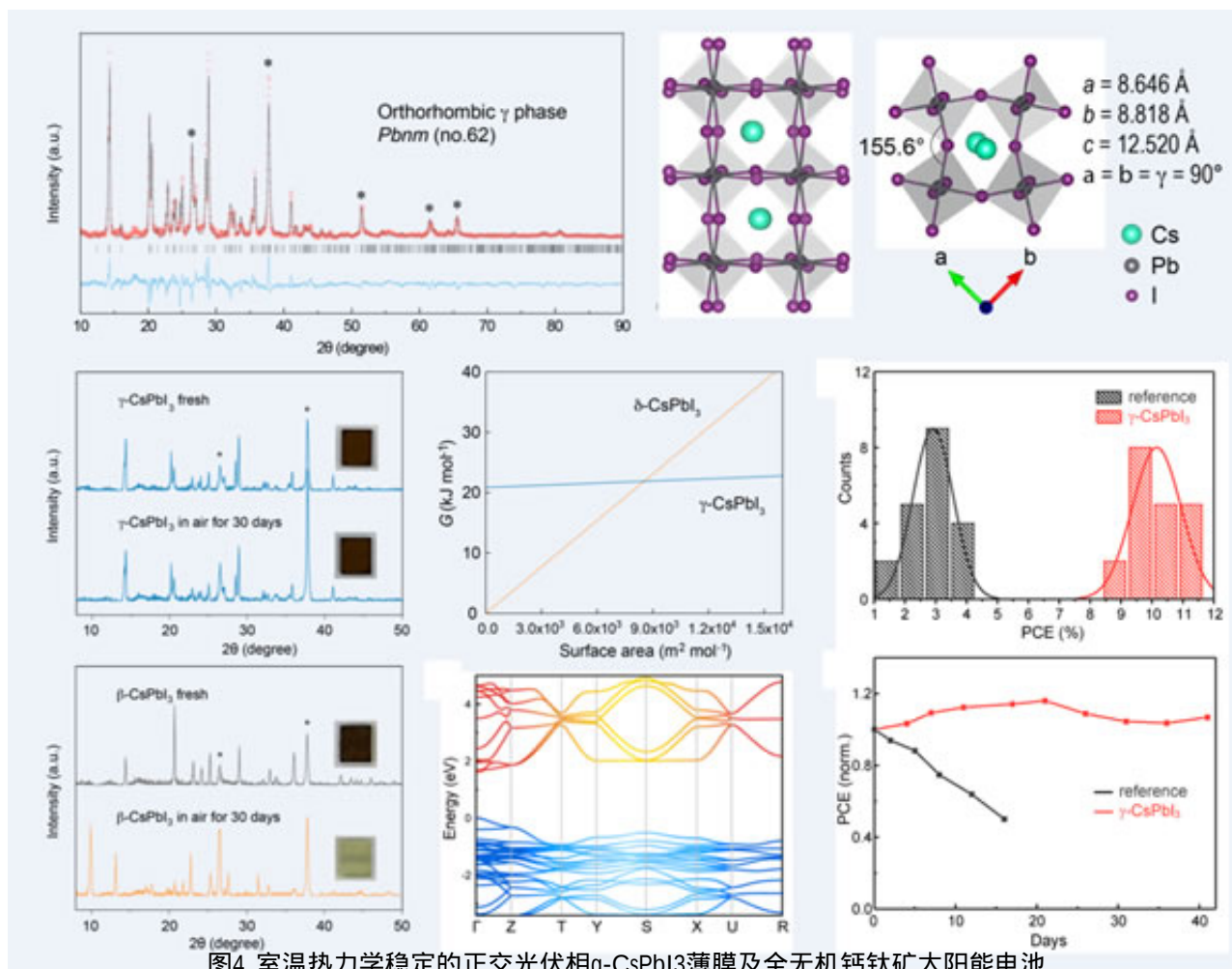


图4. 室温热力学稳定的正交光伏相 γ -CsPbI₃薄膜及全无机钙钛矿太阳能电池

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/132683.html>