

化学所等制备高效高稳定的二维钙钛矿光伏器件

作为新一代薄膜太阳能电池的代表性材料，钙钛矿的毒性及对水氧的敏感性严重阻碍了其商业化进程。近年来，二维（2D）Sn基无铅钙钛矿因其出色的稳定性和低毒性，成为3D钙钛矿的替代材料。但由于二维材料结构的特殊性，电子或空穴受量子尺寸效应限制，其寿命和迁移率远低于3D结构，因而其器件光电转化效率明显低于3D钙钛矿。这种稳定性与高效率之间的矛盾成为实际应用的一个难题。

最近，在国家自然科学基金委、科技部和中国科学院的支持下，中科院化学研究所绿色印刷重点实验室科研人员与郑州大学合作，成功地将疏水性有机分子1,4-丁二胺引入到Sn基无铅钙钛矿中，合成了一系列具有Dion-Jacobson相的准二维钙钛矿。如下图所示，

具有典型准二维结构的(BEA)FA₂Sn₃I₁₀

钙钛矿结构对称性较好，光吸收窗口与三维相比并没有明显减少，并具有合适的禁带宽度。第一性原理计算表明，(BEA)FA₂Sn₃I₁₀

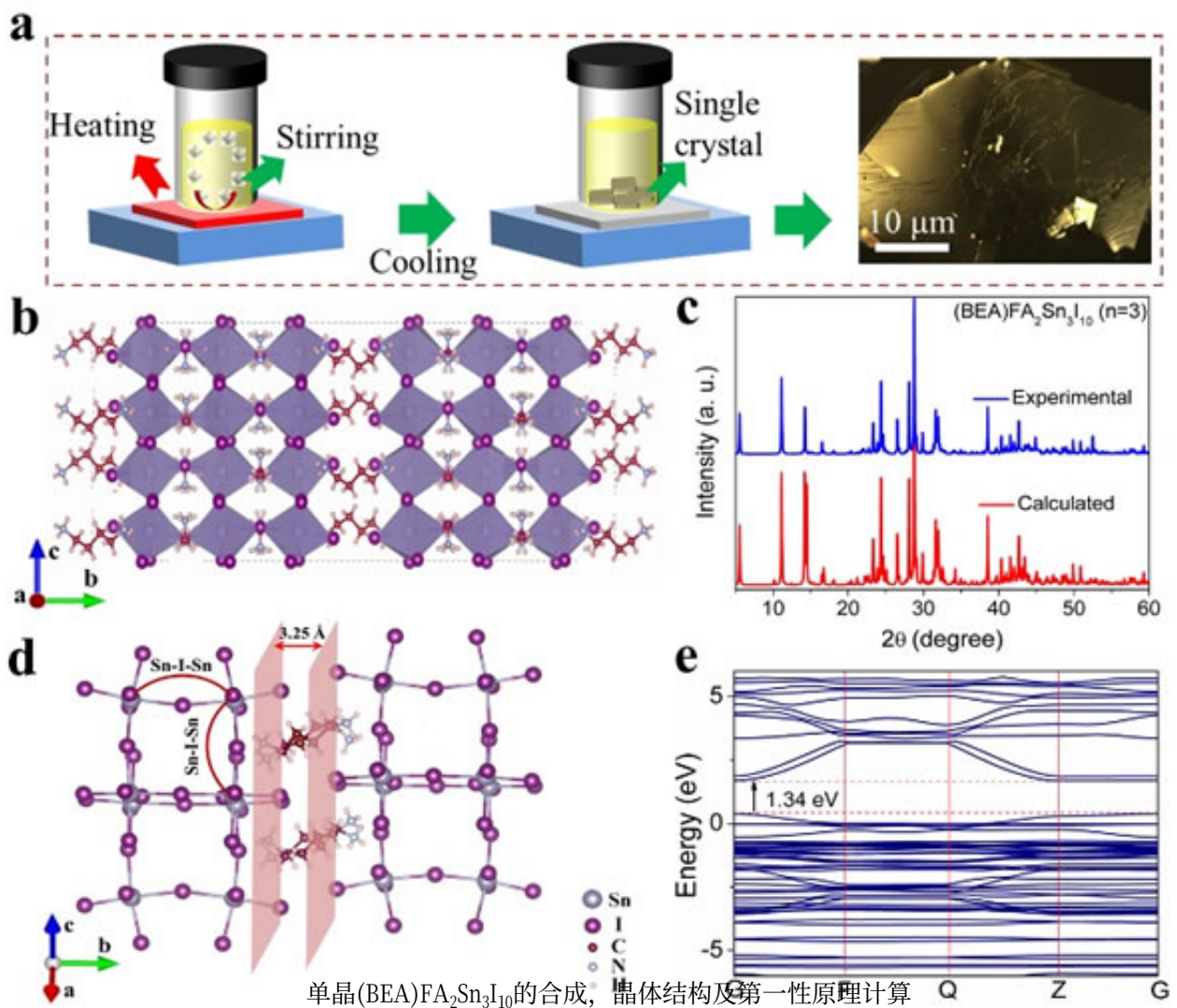
具有大的形成能（106 kJ/mol），结构稳定。另外，(BEA)FA₂Sn₃I₁₀

薄膜致密性良好，载流子限域作用并不明显，结合一维扩散方程，计算出的电子扩散长度为450

nm，空穴扩散长度为360 nm，载流子迁移率为14.4 cm² V⁻¹

S⁻¹。利用该(BEA)FA₂Sn₃I₁₀薄膜制备出的太阳能电池，光电转换效率高达6.34%，是目前报道的Dion-Jacobson相的准二维钙钛矿太阳能电池的最高值。更为重要的是，在自然条件下，未封装的器件经过1000小时的老化，效率仅仅衰减8%。另外，在光照稳定性测试中发现，经过200小时，器件效率仍有90%以上。通过这种新型低维无铅钙钛矿结构设计，同时实现了高效率和高稳定性的钙钛矿太阳能电池，对推动钙钛矿太阳能电池的实际应用具有重要意义。

该研究成果近日发表于《德国应用化学》（Angewandte Chemie International Edition）上，通讯作者是化学所研究员宋延林和郑州大学博士张懿强，第一作者是博士生李鹏伟。



单晶(BEA)FA₂Sn₃I₁₀的合成, 晶体结构及第一性原理计算

原文地址: <http://www.china-nengyuan.com/tech/154425.html>