

福建物构所在钙钛矿太阳能电池研究获进展

缺陷钝化是提升钙钛矿太阳能电池光电转换效率与稳定性的有效方法。路易斯碱是钙钛矿太阳能电池常用的钝化添加剂之一，被定义具有C=O、S=O、P=O、-CN等吸电子官能团的有机小分子，是给予外界电子的电子对供体。在传统的路易斯碱上添加质子官能团（-OH、-NH等）的分子显示出比纯路易斯碱更高效的钝化效果，但其详细的作用机理尚未被研究与证明。理论计算证明，表面活性氧（

超氧离子 O_2^-

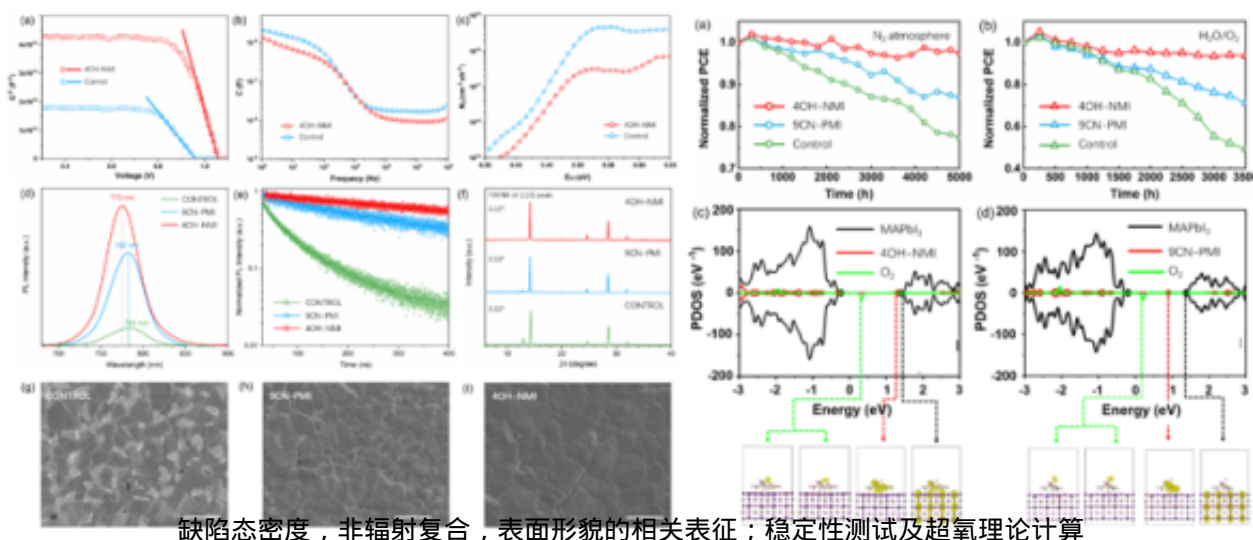
）对钙钛矿薄膜与器件的稳定性造成损害，而目前几乎没有针对预防超氧降解钙钛矿过程的钝化分子的相关实验研究。

中国科学院福建物质结构研究所功能纳米结构设计与组装/福建省纳米材料重点实验室研究员高鹏将路易斯碱官能团与质子官能团于聚芳香共轭分子上进行组合，得到纯路易斯碱体系分子9CN-PMI与路易斯碱/质子体系分子4OH-NMI，并将其引入到钙钛矿前驱体溶液中，制备出钝化之后的钙钛矿薄膜与器件。对两种不同类型分子的表征对比显示，具有路易斯碱/聚芳香共轭/质子结构的分子4OH-NMI可起到更优异的化学钝化（Chemical passivation）作用，其所拥有的C=O/-OH官能团体系能够有效钝化正负电荷缺陷与铅团簇，钝化剂的-OH可以通过氢键与I⁻相互作用，从而促进C=O基团与反位 Pb^{2+} 缺陷的相互结合，使钝化效果最大化。理论计算与稳定性测试证明，4OH-NMI具有更加显著的能带钝化（Energetic passivation）作用，即钝化分子产生良性的中

间能隙态，该能隙态位于 O_2 产生的电子陷阱态之上，能够抢在 O_2

之前捕获钙钛矿上的光激发电子，避免超氧离子的形成，进而提高钙钛矿器件的稳定性。此外，研究还发现，4OH-NMI与9CN-PMI的加入可以提高钙钛矿前驱体溶液的粘度，从而显著增加钙钛矿膜的厚度以实现更高的光收集效率。4OH-NMI钝化后的钙钛矿电池效率达23.7%，且表现出优异的稳定性。

相关研究成果发表在Advanced Materials上。



原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/171191.html>