宁波材料所在钙钛矿太阳能电池研究中取得系列进展

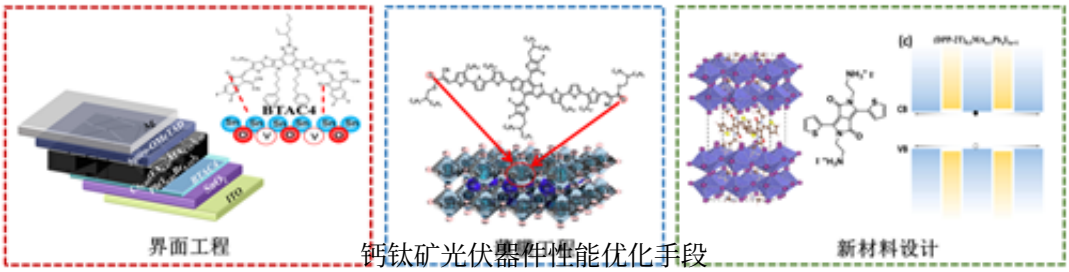
近年来，钙钛矿型太阳能电池（PSCs）以其优异的光电特性和低廉的生产成本在光伏领域得到发展。随着器件结构、钙钛矿结构、电荷传输层等方面的进步，PSC的光伏效率已达25.7%，可与成熟开发的薄膜和硅基太阳能电池相媲美。但是，钙钛矿电池在空气中的长时间稳定性问题和层与层之间的表面缺陷限制了钙钛矿电池的商业化。为促进钙钛矿太阳能电池的进一步发展，中国科学院宁波材料技术与工程研究所研究员葛子义与副研究员刘畅等人通过界面工程（Adv. Energy Mater. 2021, 11, 39; Infomat 2021, 3, 1431）和新型二维材料设计（Nano Energy 2022, 93, 106800）等手段，大幅提升了钙钛矿光伏器件效率和稳定性。

SnO2表面的氧空位和陷阱态是制约器件效率的重要因素，对此，科研人员创新性地提出了具有高结构灵活性的n型共轭小分子钝化SnO2表面缺陷，以实现高质量成膜和有序分子堆积，从而提高SnO2表面的钝化效果。为进一步尝试调整有机钝化剂的聚集和分子堆积，并深入研究它们与SnO2/钙钛矿界面处电荷传输/重组动力学的相关性，科研人员通过侧链工程设计出Y系列衍生物（BTAC4）。4-苯基丁基连接在苯并三唑核上，作为增加空间位阻并进一步降低自聚集程度的一种手段可提高小分子的成膜能力。此外，与支链烷基侧链相比，线性侧链可能导致主链紧密堆积。通过平行研究SnO2/Y6/钙钛矿和SnO2/BTAC4/钙钛矿界面的光电特性，研究发现小分子更紧凑和规则的堆叠产生了更有利的界面特性、较低的陷阱态、更高的电子传导/提取效率，并抑制电荷复合。基于BTAC4有机钝化剂的PSC实现了超过23%的优异光电转换效率，以及1.252V的高开路电压，是迄今为止基于CsFAMA钙钛矿体系报告的最高开路电压值。未封装的器件在35%湿度下储存768小时后仍保持90%的初始功率转换效率（PCE），具有出色的稳定性。相关研究成果以π-Conjugated Small Molecules Modified SnO2 Layer for Perovskite Solar Cells with over 23% Efficiency为题，发表在Advanced Energy Materials上（DOI: 10.1002/aenm.202101416）。

CsPbI2Br的带隙可以通过改变Br/I比进行微调，因此成为构建串联太阳能电池的理想选择。然而，在潮湿环境下，无机PSC的发展仍然面临相稳定性挑战。已有报告揭示，水分暴露易触发CsPbI1-xBrx从光活性α相到黄色δ相的相变，因为水分导致共角八面体[PbI6]4-的畸变，并增加钙钛矿晶粒之间的缺陷诱导局部应力。对此，科研人员设计出一种共轭p型小分子与无机钙钛矿表面相互作用，对器件性能产生了双重作用。一方面，来自小分子O和S的孤对电子可以与来自钙钛矿的未配位Pb形成共价键，大幅降低陷阱态，并在钙钛矿晶粒处释放缺陷诱导的微应变。另一方面，在小分子的退火过程中，它可以诱导无机钙钛矿晶体的二次生长，从而使钙钛矿薄膜的形貌细化，结晶度提高。上述协同效应使无机钙钛矿薄膜在潮湿条件下具有更高的相稳定性。因此，经小分子处理的基于CsPbI2Br的PSC实现了16.25%的PCE，可与迄今为止最先进的CsPbI2Br钙钛矿器件媲美。此外，该装置在室温（相对湿度为25%）下老化500小时，仍可保持80%的初始PCE，表现出优异的水分稳定性。该工作以Improved phase stability of CsPbI2Br perovskite by released microstrain towards highly efficient and stable solar cells为题，在线发表在InfoMat上（DOI: 10.1002/inf2.12246）。

传统3D钙钛矿在湿气环境中极易分解，因而限制了光伏器件的实际应用。二维钙钛矿较三维材料具有优异的湿度及光照稳定性，近几年被广泛研究。然而，二维钙钛矿绝缘有机中间层与钙钛矿无机层间具有差异较大的介电常数，导致材料激子结合能大、载流子传输受阻，使2D钙钛矿器件光伏性能远低于3D器件。为从材料上克服上述缺陷，科研人员创新性地设计出一种D-A-D（D：电子给体；A：电子受体）型强共轭有机中间层结构，通过D、A间内电荷转移效应降低有机中间层能带带隙，弱化量子阱限域效应，使2D钙钛矿的光电性能与3D结构相似，有助于提高激子分离与载流子传输性能，实现2D钙钛矿器件效率超18%，是目前低维（n≤4）钙钛矿器件的最高效率之一，并且器件在湿气环境中老化1000小时衰减小于5%，表现出优异的湿度稳定性。科研人员解决了2D钙钛矿存在的本征光电性能缺陷，并拓宽了2D钙钛矿材料的设计范围。相关研究成果以Donor-Acceptor-Donor Type Organic Spacer for Regulating the Quantum Wells of Dion-Jacobson 2D Perovskites为题，发表在Nano Energy上(DOI:10.1016/j.nanoen.2021.106800)。

上述研究工作得到国家杰出青年科学基金、国家重点研发计划、国家自然科学基金、宁波市科技创新2025重大专项、中科院前沿科学重点研究计划等的支持。



钙钛矿光伏器件性能优化手段

原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/179170.html