

合肥研究院等提出提高钙钛矿太阳能电池光电转化效率新策略

近期，中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所能源材料与器件制造研究部研究员潘旭团队、中国科学技术大学教授肖正国课题组合作，在钙钛矿太阳能电池研究中取得进展，制备出理想带隙为1.33 eV的铅锡混合钙钛矿作为太阳能电池吸收层，通过定向锚定策略（STA）对钙钛矿空位缺陷进行精确钝化处理，获得22.51%的光电转化效率（PCE）记录，光电转化效率有望超越传统铅基钙钛矿太阳能电池。

目前，有机金属卤化物钙钛矿太阳能电池（PSCs）最高光电转换效率已提高到25.8%（认证为25.7%）。传统的铅基钙钛矿材料的禁带宽度在1.5 ~ 1.7 eV范围内，根据Shockley-Queisser（S-Q）模型，当吸收层带隙为1.33 eV时，电池具有最高的理论极限效率。采用Sn部分取代或全部取代Pb可以降低钙钛矿带隙，当Sn比例为20%时，带隙能降至理想值1.33 eV左右。但20%Sn含量是钙钛矿带隙变化的临界值，其中存在大量的缺陷，导致非辐射复合造成严重的开路电压损失（VOC loss）。根据以往的研究，造成开路电压损失的具体原因主要有两个：Sn²⁺易氧化成Sn⁴⁺引起严重的自p掺杂，形成Sn空位并引入额外的p型电荷；Sn与有机组分的反应强于Pb，使得结晶过程过快和不受控，导致薄膜质量较差，缺陷密度增加。

基于此，该研究通过定向选择锚定策略对钙钛矿进行钝化处理，获得理想带隙钙钛矿太阳能电池22.51%的光电转化效率记录。研究表明，铅锡混合钙钛矿太阳能电池中双金属的缺陷是导致其性能退化的主要原因。因此，研究人员采用2-苯乙胺氢碘酸盐（PEAI）和乙二胺氢碘酸盐（EDA I）作为共修饰剂对钙钛矿进行表面处理，分别选择性锚定与Pb和Sn相关的活性位点并对两种金属缺陷进行钝化。最终，铅锡混合钙钛矿太阳能电池的开路电压（VOC）从0.79 V大幅提高到0.90 V，开路电压的损失降低到0.43 V。此外，器件表现出极佳稳定性，在氮气手套箱中存储2700小时后，仍可保持初始效率的80%。

该研究为铅锡钙钛矿太阳能电池管理金属双源缺陷提供了一种有效的钝化机制。相关成果发表在Advanced Materials上。研究得到国家重点研发计划、安徽省杰出青年基金等项目资助。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/179399.html>