

# 上海科大开发新策略实现效率为14.6%的锡钙钛矿太阳能电池

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/14524.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

**上海科大开发新策略实现效率为14.6%的锡钙钛矿太阳能电池。**近日，上海科技大学宁志军课题组利用Sn单质、I<sub>2</sub>单质与二甲亚砜（DMSO）反应，低成本一步合成了高纯、高配位的SnI<sub>2</sub>·(DMSO)<sub>x</sub>前驱体，并基于该前驱体制备了第三方测试效率为14.6%的锡钙钛矿太阳能电池，为目前报道的最高值。相关研究成果以One-Step Synthesis of SnI<sub>2</sub>·(DMSO)<sub>x</sub> Adducts for High-Performance Tin Perovskite Solar Cells为题发表在J. Am. Chem. Soc.上。

高效低成本光伏技术是实现碳中和的关键之一，钙钛矿太阳能电池是新型高效、低成本太阳能电池中最具有前景的一种。目前主流钙钛矿材料均含重金属铅，其生物与环境毒性可能会限制钙钛矿太阳能电池的发展。利用锡来替换铅是制备环境友好型钙钛矿太阳能电池的有效路径。然而，由于锡钙钛矿薄膜的晶体生长难以调控造成晶体质量低等问题，目前锡钙钛矿光伏器件的效率与稳定性均低于铅钙钛矿。

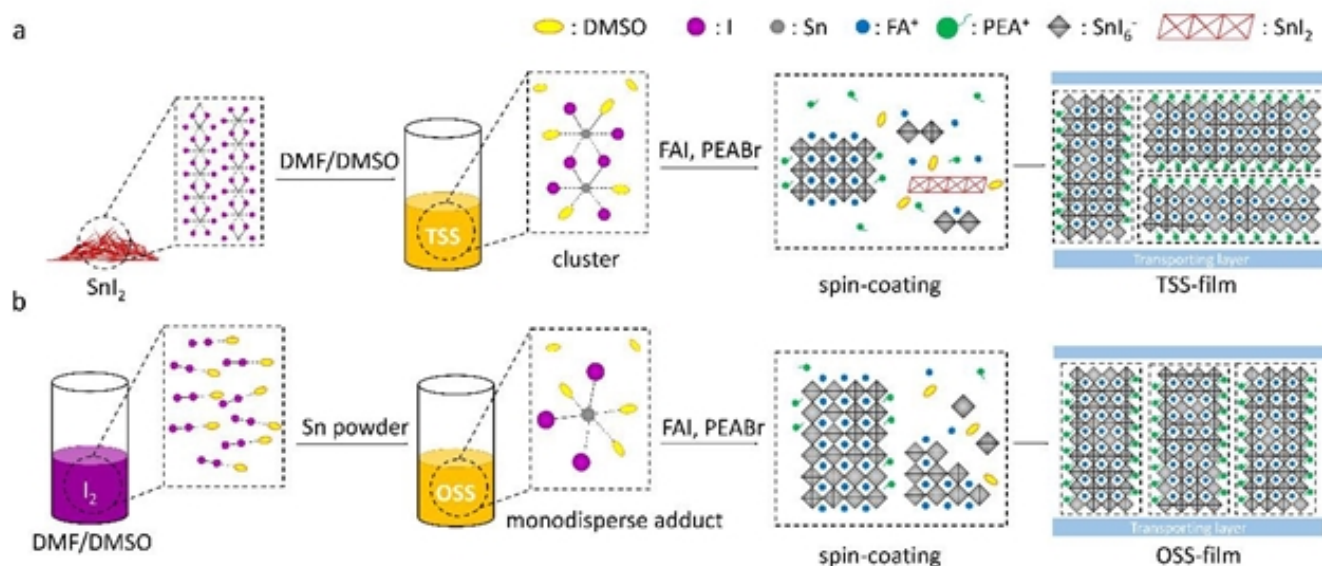


图1：a. 两步法制备流程与结晶示意图；b. 一步法制备流程与结晶示意图（研究团队供图）

该论文的第一作者为上科大宁志军组姜显园博士。他告诉《中国科学报》，在传统工艺中，高纯SnI<sub>2</sub>前驱体的制备需要使用昂贵且耗时的真空升华设备，使得器件成本居高不下，阻碍了研究的开展与日后的工业化进程。钙钛矿前驱体不是简单溶液、而是胶体，对其精细结构开展全面表征是优化钙钛矿前驱体合成策略的关键。这就要求我们表征并解析组成、结构复杂的前驱液化学环境，并设计合理的合成路径去调控前驱液中化合物的配位结构，这是一项极具挑战的课题。

在前期工作中，宁志军团队利用基于苯乙胺的低维结构实现了锡钙钛矿的取向生长，提高了薄膜质量、提高了材料抗氧化能力，获得了效率为9.41%的锡钙钛矿太阳能电池。在此基础上，基于新电子传输层茚-C60双加合物的器件结构设计优化了器件能级匹配、降低了界面复合，获得了第三方测试效率为12.4%的锡钙钛矿太阳能电池。然而受限于锡钙钛矿难以控制的结晶，其薄膜结构仍较为杂乱、取向性仍较差，导致扩散长度难以提高，限制了性能的继续提升。

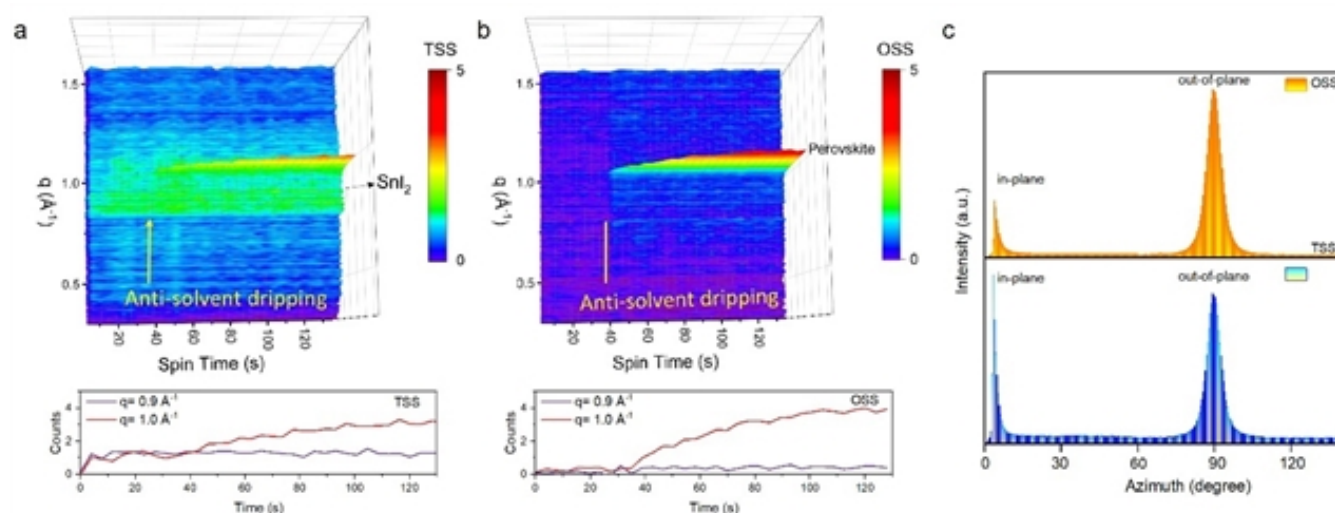


图2：a. 两步法锡钙钛矿薄膜的原位GIWAXS表征；b. 一步法锡钙钛矿薄膜的原位GIWAXS表征；c. 锡钙钛矿薄膜（100）晶面在不同方位角处的积分强度（研究团队供图）

在最新的这项研究中，我们设计了‘自下而上’的反应路径，由单质直接在目标溶剂中生成前驱体，我们通过基于同步辐射的X射线吸收谱（XAFS）解析了锡钙钛矿前驱体中的配位结构，证明一步法有效提高了前驱体中Sn的配位数，并阐明了前驱体配位数-SnI<sub>2</sub>偏析-锡钙钛矿结晶三者之间的关系。更高的配位数抑制了SnI<sub>2</sub>的偏析，有利于锡钙钛矿的有序、取向结晶，最终提高薄膜质量与器件效率。——共同第一作者李晗升博士介绍。

具体而言，研究人员巧妙地选择将I<sub>2</sub>单质溶解于DMF/DMSO混合溶剂中，使I<sub>2</sub>提前与DMSO进行配位，随后加入过量Sn粉与I<sub>2</sub>·DMSO反应生成SnI<sub>2</sub>·(DMSO)<sub>x</sub>。放热反应的特点使得SnI<sub>2</sub>·(DMSO)<sub>x</sub>很容易形成。相比于传统的两步法——即先合成高纯SnI<sub>2</sub>固体再溶解生成前驱体，一步法避免了昂贵的SnI<sub>2</sub>提纯工艺，有利于降低器件成本。此外，一步法无需提供溶解过程中打断SnI<sub>2</sub>离子键的能量，有利于SnI<sub>2</sub>与DMSO的完全配位。

宁志军组和上海光源司锐课题组合作，通过XAFS表征了溶液中的配位结构。一步法制备的SnI<sub>2</sub>前驱体中Sn与DMSO的配位数为2.4，远高于两步法中的1.8。这证明了一步法有利于获得高纯度

、高配位的SnI<sub>2</sub>溶液。

宁志军组和上海光源高兴宇课题组合作，通过原位X射线广角散射（GIWAXS）跟踪了钙钛矿旋涂过程中的结晶过程。研究发现，一步法制备的钙钛矿薄膜在旋涂期间始终保持高取向的钙钛矿相、没有杂相的出现；而两步法制备的钙钛矿薄膜在反溶剂滴加之前便出现SnI<sub>2</sub>的衍射信号。这说明一步法能有效抑制锡钙钛矿薄膜结晶过程中的SnI<sub>2</sub>偏析，有利于薄膜垂直取向性的增强。

基于荧光寿命的扩散长度表征证明，一步法制备的锡钙钛矿薄膜扩散长度为 $290 \pm 20$  nm，高于两步法薄膜（ $210 \pm 20$  nm）。由于取向性和扩散长度的增强，一步法制备的锡钙钛矿太阳能电池在第三方测试平台获得了14.6%的认证效率，高于两步法器件（12.2%），且为当前同类器件的最高值。

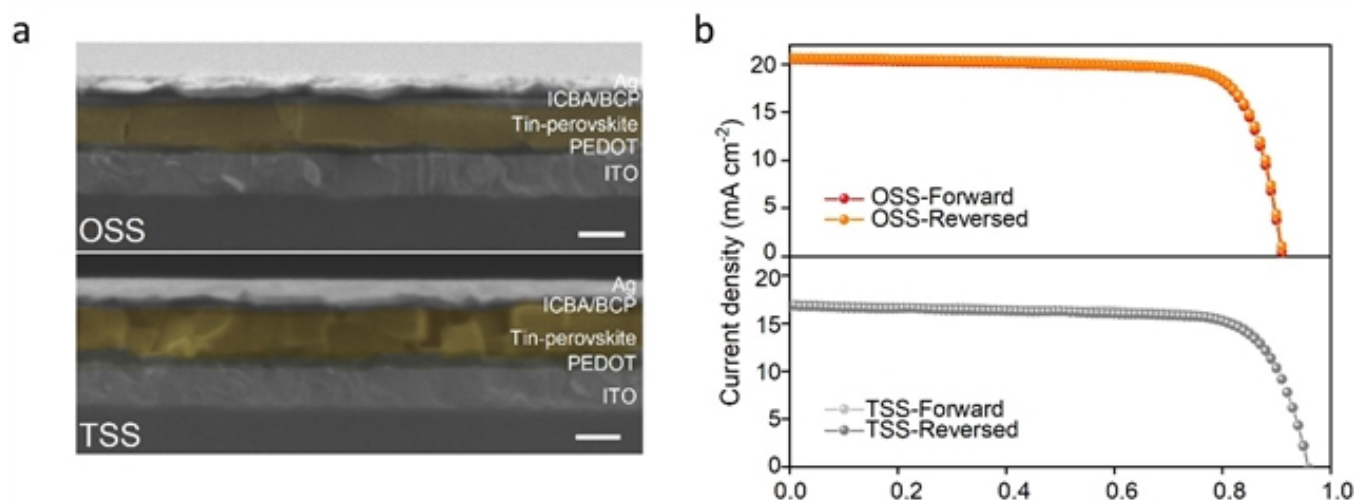


图3：a. 锡钙钛矿太阳能电池的器件截面电镜图；b. 一步法和两步法器件在AM1.5G光照下的J-V曲线（研究团队供图）

最后，研究人员认为，该研究利用前驱体化学环境的修饰调控钙钛矿结晶过程的方法学对薄膜生长的优化有一定的指导意义；一步制备前驱液的方法大幅提升了锡钙钛矿光伏器件的效率，这种廉价制备前驱体的方法大幅降低了成本，对今后可能的商业化大规模制备具有重要意义。

上海科技大学宁志军教授是本文通讯作者，上海科技大学姜显园、李晗升博士为本文共同第一作者。（来源：科学网）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1021/jacs.1c03032>

作者：宁志军等 来源：《美国化学会志》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

---

本文版权归作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://iikx.com)转发