

---

# 迄今最高！陕师大实现无机钙钛矿太阳能电池效率达到20.8%

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/15344.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！*

迄今最高！陕师大实现无机钙钛矿太阳能电池效率达到20.8%。全无机金属卤化物钙钛矿，因为没有有机组分，表现出优异的热稳定性和化学稳定性，同时，光电转换效率也超过20%，成为最具应用潜力的新型光伏材料之一。

日前，陕西师范大学刘生忠教授团队在全无机钙钛矿太阳能电池效率方面取得新进展，通过理论研究，确定组胺（HA）分子可以有效钝化钙钛矿的表面缺陷，将电池效率提高到20.8%，显著高于之前韩国Sang Il Seok教授报道的最高效率20.37%。

相关成果以Rational Surface-Defect Control via Designed Passivation for High-Efficiency Inorganic Perovskite Solar Cells为题，于北京时间2021年8月18日发表在Angewandte Chemie International Edition上。陕西师范大学田庆文、向万春为本文共同通讯作者，陕西师范大学谷晓静硕士为第一作者。

目前功率转换效率（PCE）较高的有机-无机杂化钙钛矿太阳能电池，由于其有机组分不稳定限制了器件的长期运行稳定性。与此同时，无机卤化物钙钛矿太阳能电池因其优异的热稳定性和化学稳定性成为了最具吸引力的新型光伏材料之一。

在钙钛矿薄膜制备和操作过程中无法避免会产生缺陷，非辐射复合通常发生在钙钛矿薄膜的表面和晶界等缺陷密度高的区域。理论计算表明，卤化物空位是钙钛矿薄膜表面上浓度最高的缺陷。研究人员已经将各种分子作为电子供体或电子受体用于钝化带正电的VI或带负电的VPb，据报道通过路易斯酸碱反应与欠配位的Pb<sup>2+</sup>配位，以减少器件中的非辐射复合损失。研究人员认为，与钙钛矿表面的高浓度缺陷相比，体相中存在的缺陷可以忽略不计，因此，使用界面工程对钙钛矿进行钝化，能够有效提升钙钛矿器件的效率。

在这项工作中，研究人员通过在钙钛矿表面引入钝化剂，利用分子内不同的基团与钙钛矿表面的原子的相互作用，有目的地钝化钙钛矿表面的缺陷。

具体而言，选用组胺（HA）对钙钛矿表面的缺陷进行有效的钝化，其含有的咪唑环是富电子基团，可以与VI通过路易斯酸碱反应相结合，而-NH<sub>2</sub>中的H可以与相邻的卤原子通过形成氢键相互作用，从而增强HA分子在钙钛矿表面的附着。

通过一系列的实验验证，研究人员的设计达到了预期目标，并将钙钛矿电池的效率从19.5%提升

到了的20.8%。

傅里叶变换红外光谱 (FTIR) 结果中C=N与-NH<sub>2</sub>在与PbI<sub>2</sub>相互作用后的峰位变化, 与计算结果相一致。X射线光电子能谱 (XPS) 结果表明, HA与钙钛矿相作用时, HA失去电子, 电子云密度降低, N 1s峰向高结合能方向移动, Pb<sup>2+</sup>得到电子, 电子云密度增加, Pb 4f向低结合能方向移动, 表明HA与钙钛矿表面配位不足的Pb<sup>2+</sup>之间存在强的路易斯酸碱作用。

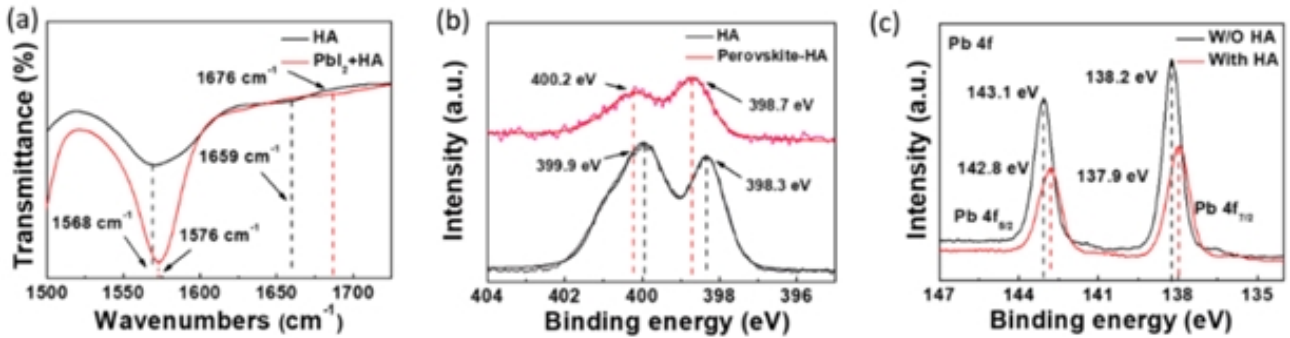


图1 从钙钛矿表面表征HA和未配位的Pb<sup>2+</sup>之间的相互作用。(a) FTIR 光谱；(b) N 1s和(c) Pb 4f的XPS图谱。

器件的效率经过HA处理后从19.5%提升到20.8%，其提升主要源于VOC和FF的提高。处理后器件VOC和FF的增强表明钙钛矿表面缺陷已被HA成功钝化，且HA钝化后的器件具有更好的重现性。HA钝化后的器件仍然存在迟滞，可能的原因是，经过钝化以后的器件中的离子迁移并没有得到改善。

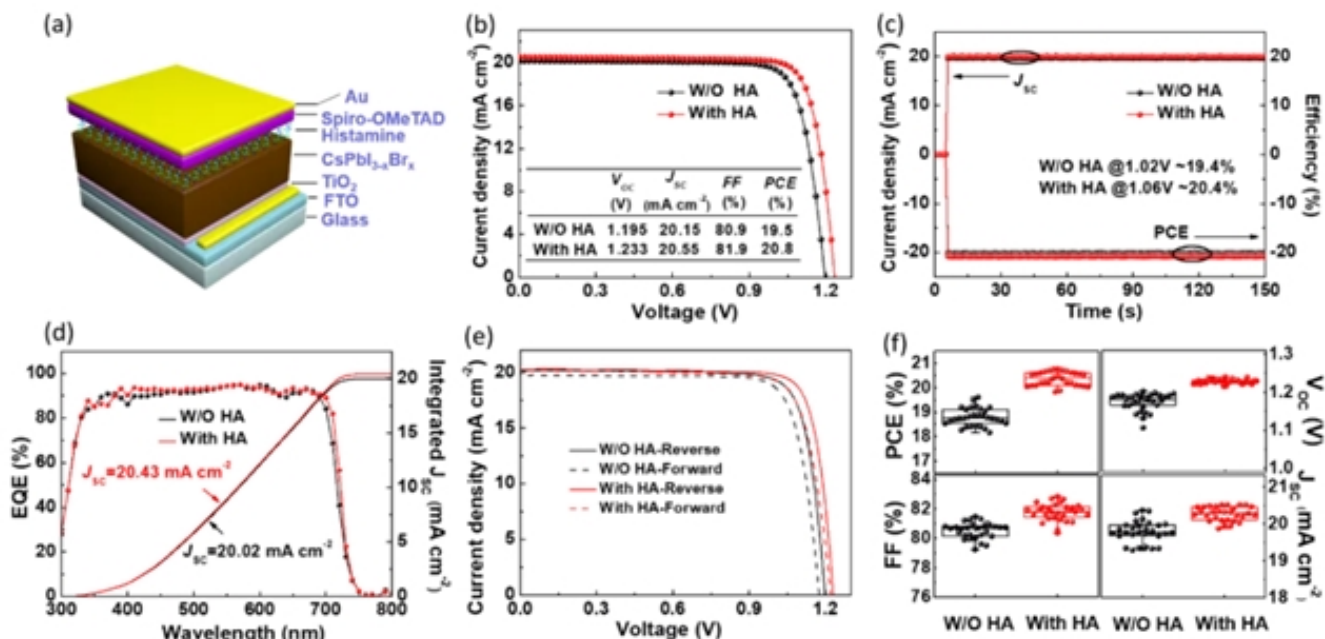


图2：基于CsPbI<sub>3-x</sub>Br<sub>x</sub>钙钛矿太阳能电池的光伏性能。(a) 器件结构；(b) HA钝化前后器件的J-V曲线；(c) HA钝化前后最大功率点的稳态输出曲线；(d) 外量子效率和积分电流；(e) HA钝化前后的迟滞；(f) 光伏参数的统计。

最后，研究人员认为，HA中的咪唑环通过路易斯酸碱反应优先与VI相互作用，而-NH<sub>2</sub>基团可以通过形成氢键与相邻的卤化物相互作用，这种协同效应显著减少了欠配位的Pb<sup>2+</sup>的数量，导致器件内表面陷阱态密度的减少和电荷寿命的延长。该策略提供了一种合理的设计，可以有效地钝化全无机钙钛矿以实现高效率。（来源：科学网）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1002/anie.202109724>

作者：刘生忠等 来源：《德国应用化学》

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

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