
中国科学家构筑卤卤键改善混合卤化物钙钛矿电池的长期运行稳定性

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/15582.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！

中国科学家构筑卤卤键改善混合卤化物钙钛矿电池的长期运行稳定性。近日，南开大学化学学院袁明鉴研究员课题组与中国海洋大学王梅副教授课题组合作采用卤卤键锚定卤素阴离子在宽带隙钙钛矿中抑制离子迁移取得了阶段性研究进展。该研究利用化学手段构筑非共价卤卤键来锚定相界面处易迁移的卤素离子，进而提高了器件的长期运行稳定性。

研究成果以Halogen-Halogen Bonds Enable Improved Long-term Operational Stability of Mixed-Halide Perovskite Photovoltaics为题，于2021年9月3日发表在Chem上。

钙钛矿-硅串联电池具有较高的光电转换效率，并且被认为是最有可能实现商业化的下一代光伏器件。然而，钙钛矿顶电池是制约钙钛矿-硅串联太阳能电池的寿命的重要因素。通常，宽带隙的混合卤素钙钛矿因为其理想的带隙是作为顶电池首选。在光照和电场条件下，混合卤化物钙钛矿薄膜容易产生离子迁移。离子迁移引起的相分离会进一步导致器件性能的退化，不利于器件的长期运行稳定性，这严重的阻碍了钙钛矿电池未来的商业化进程。

前期研究表明钙钛矿离子迁移的根本原因是卤素阴离子较低的迁移活化能，尤其是位于晶界处的阴离子。晶界处的离子迁移活化能大约是晶体内部的一半，因为晶界处只保留了约一半的化学键。因此，前期很多工作通过钝化减少缺陷来抑制离子迁移，例如氨基酸、路易斯碱、位阻和二维钙钛矿等。晶界的钝化虽然降低了晶界处的缺陷密度，但尚未从根本上解决离子迁移的问题。

作者提出为位于晶界处的卤素阴离子引入一种强化学相互作用。这种相互作用可以直接与卤素阴离子发生相互作用力而不仅仅是常规的晶界钝化。这种界面处构建的键合作用力有利于提高离子迁移的势垒并抑制离子迁移。

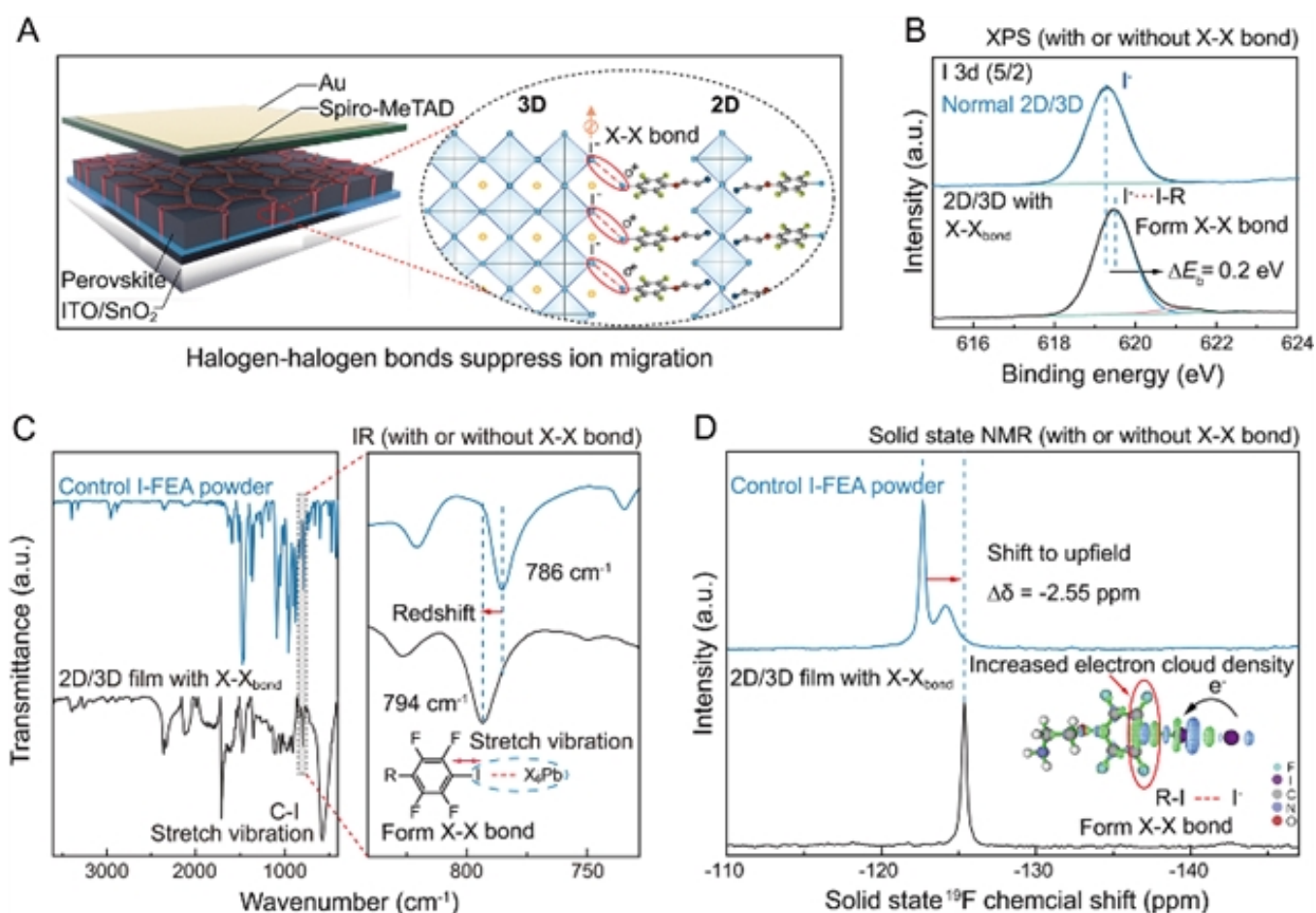


图1. 相界面具有卤卤键的2D/3D钙钛矿。(A) 2D/3D杂化钙钛矿界面处的卤卤键锚定卤素阴离子的示意图。(B) 普通的2D/3D和具有卤卤键的2D/3D钙钛矿薄膜，I 3d 5/2 的高分辨率X射线光电子能谱分析。(C) 对照样品I-FEA的粉末和具有卤卤键的2D/3D钙钛矿薄膜的红外光谱。全范围的光谱（左）和局部放大光谱（右）。(D) 对照样品I-FEA粉末和具有卤卤键的2D/3D钙钛矿薄膜的固体核磁氟谱。插图：I-FEA分子和碘离子的电子密度差图(EDD)。绿色表示电子密度增加，蓝色表示减少。

作者通过表面形貌分析和光谱分析证明他们成功地构筑了2D/3D钙钛矿结构且在相界面引入了卤卤键。这种结构不仅可以利用2D/3D结构的优势还可以通过界面处的卤卤键锚定卤素阴离子。而后作者通过原位的荧光光谱、X射线衍射和宽视野荧光成像等手段证明了卤卤键可以有效地抑制光致相分离的问题。

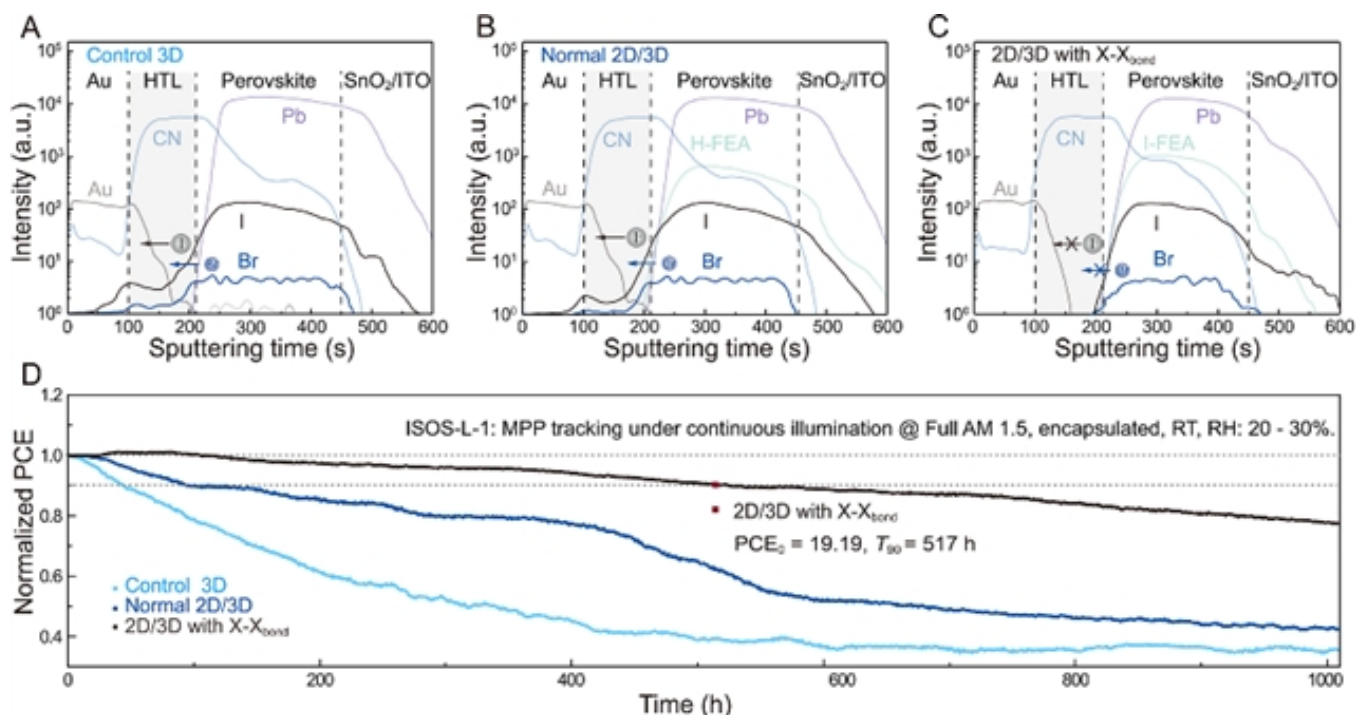


图2. 具有长期运行稳定性的混合卤化物钙钛矿光伏电池。(A-C) 3D, 普通2D/3D和普通形成卤键的2D/3D钙钛矿器件的飞行时间二次离子质谱。(D) 在模拟一个太阳光照强度下连续照三种器件的最大功率输出跟踪。

文章提出通过提高晶界处易迁移卤素阴离子的离子迁移活化能来抑制离子迁移。作者在文中设计合成了一系列卤代有机分子, 通过理论计算卤键的强弱选择了I-FEA分子为基础的2D钙钛矿构筑了2D/3D钙钛矿器件。制备的宽带隙 2D/3D 混合钙钛矿光伏电池表现出19.19%的光电转换效率。在ISOS-L-1测试标准条件下, 封装的器件在最大功率点持续输出约500小时后仍然保留了初始PCE的90%, 是迄今为止所报道的最稳定的宽带隙混合卤素钙钛矿光伏材料之一。该工作为解决钙钛矿离子迁移问题提出了新的解决思路, 同时为未来开发更稳定高效的钙钛矿光伏器件奠定了基础。

该研究得到国家自然科学基金(批准号: 21771114, 91956130)等项目的资助。(来源: 科学网)

相关论文信息: <https://doi.org/10.1016/j.chempr.2021.08.009>

作者: 袁明鉴等 来源: 《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