
甲醚碘化铅钙钛矿结晶相变热力学过程获突破

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/17027.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！

甲醚碘化铅钙钛矿结晶相变热力学过程获突破。暨南大学微电子学院麦耀华教授和郭飞研究员团队通过调控甲醚碘化铅有机/无机杂化钙钛矿材料（FAPbI₃）的结晶过程，利用刮涂方法制备得到高效稳定的 α -FAPbI₃ 太阳电池，在小面积器件上取得了21.35%的光电转换效率，同时制备得到效率为17%的大面积组件（12.32 cm²）。相关研究近日发表于《Nano Energy》。暨南大学博士后许振华为该论文第一作者，郭飞和麦耀华为共同通讯作者。

带隙较窄的 β 相FAPbI₃钙钛矿因其热稳定性和效率方面的优势，受到了国内外研究者的广泛关注。然而， β -FAPbI₃的结晶温度较高并且在室温下容易自发转变为 α 相从而失去光伏特性。

在该工作中，研究人员通过引入质子化氮甲基吡咯烷酮（NMPH⁺）来调节钙钛矿活性层薄膜的结晶过程。他们首先利用XRD揭示了FAPbI₃钙钛矿结晶过程中NMPH⁺的调节作用，发现FAPbI₃相变温度由87 °C降至70 °C；同时相变能量势垒由59.63 kJ/mol降至43.59 kJ/mol。这些研究结果表明，NMPH⁺对结晶过程有显著调节作用，大幅降低了FAPbI₃的相变能量势垒，促进了高质量的钙钛矿活性层的结晶。

研究人员进一步通过培养钙钛矿单晶，揭示钙钛矿结晶过程中的精细相变过程。结果表明，在FAPbI₃的相变过程中，由于甲醚阳离子（FA⁺）尺寸大于甲胺阳离子（MA⁺），在FAPbI₃相变中会自发排出部分FA⁺，形成阳离子空位。经过进一步退火，FA⁺阳离子重新填满空位，最终形成纯 α -FAPbI₃钙钛矿活性层。利用FAPbI₃钙钛矿这一特性，团队通过引入微量大阳离子NMPH⁺来调控结晶过程，最终刮涂制备得到了高质量钙钛矿薄膜，并进行了小面积器件和大面积组件制备。

该研究工作得到国家自然科学基金，广东省自然科学基金以及中央高校基本科研专项资金项目的支持。（来源：中国科学报 朱汉斌 李伟苗）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2021.106658>

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：shouquan@stimes.cn。

作者：麦耀华等 来源：《纳米能源》

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](http://www.iikx.com)转发