
金属所等在钙钛矿太阳能电池埋底界面钝化研究中获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/19854.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！

实现光生载流子的快速输运和物理空间高效分离是获得高性能光伏器件的必要条件。这需要载流子在光吸收层具有高迁移率和低复合率，其在光吸收层和电子/空穴传输层界面处的分离和后续输运同样对器件性能起着决定影响。科研人员研制出晶粒尺寸接近微米量级的高性能卤化铅钙钛矿多晶薄膜，光生载流子在这些薄膜中的有效扩散长度超过薄膜厚度，能够以极低的复合率快速输运。钙钛矿薄膜制备技术的进步带来了器件性能大幅度提升，使得器件界面性质成为制约钙钛矿太阳能电池发展的主要因素。

对于正型结构钙钛矿太阳能电池，通过在钙钛矿薄膜表面构建二维/三维异质结构已被证实可以有效调控器件顶界面的能级结构，从而提高光生载流子的分离和后续输运效率。而由于界面修饰材料极易被后续钙钛矿薄膜制备过程破坏，器件的埋底界面（下界面，即钙钛矿光吸收层/电子传输层界面）的钝化修饰仍处于发展阶段。

近日，中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家研究中心与华侨大学、瑞士洛桑联邦理工学院等合作，发展了一种重构器件埋底界面能级结构的方法。这种方法以自扩散掺杂工艺为基础，能够

Robust Interfacial Modifier for Efficient Perovskite Solar Cells: Reconstruction of Energy Alignment at Buried Interface by Self-Diffusion of Dopants为题，发表在《先进功能材料》（Advanced Functional Materials）上，并申请相关专利。

科研人员在钙钛矿薄膜与二氧化锡（ SnO_2 ）电子传输层的界面处引入一种氨基酸衍生物L-天门冬氨酸钾（PL-

A）来调控器件埋底界面的性质。研究发现，PL-A上的羧基（ $-\text{COO}^-$ ）能够与 SnO_2 相互作用，钝化 SnO_2 表面缺陷；同时，PL-A上的氨基（ $-\text{NH}_2$ ）与 PbI_2 发生配位反应，钝化钙钛矿薄膜的下表面缺陷（图1）。在这些作用下，光生载流子在钙钛矿薄膜/电子传输层界面处的非辐射复合得以抑制。进一步分析发现，PL-A的钾离子能够扩散进入钙钛矿薄膜中，形成梯度掺杂（图2a-f），从而优化界面处钙钛矿一侧的能级结构（图2g-h），促进载流子在薄膜内的传输。计算结果表明，界面处的PL-A形成取向分布（图1e），所产生附加偶

极能够调控 SnO_2 功函数，从而减小开路电压（ V_{oc} ）损失。在上述这些作用的协同优化下，器件的性能得以显著提升。结合团队前期在器件顶界面性能优化的研究基础（*Nano Energy* 2021, 90, 106537），光电能量转换效率最高可实现23.74%（图3）。此外，这种界面修饰工艺在大面积器件制备中也展现出良好的性能提升效果。

研究工作得到国家自然科学基金、辽宁省自然科学基金、沈阳材料科学国家研究中心等的支持。

论文链接

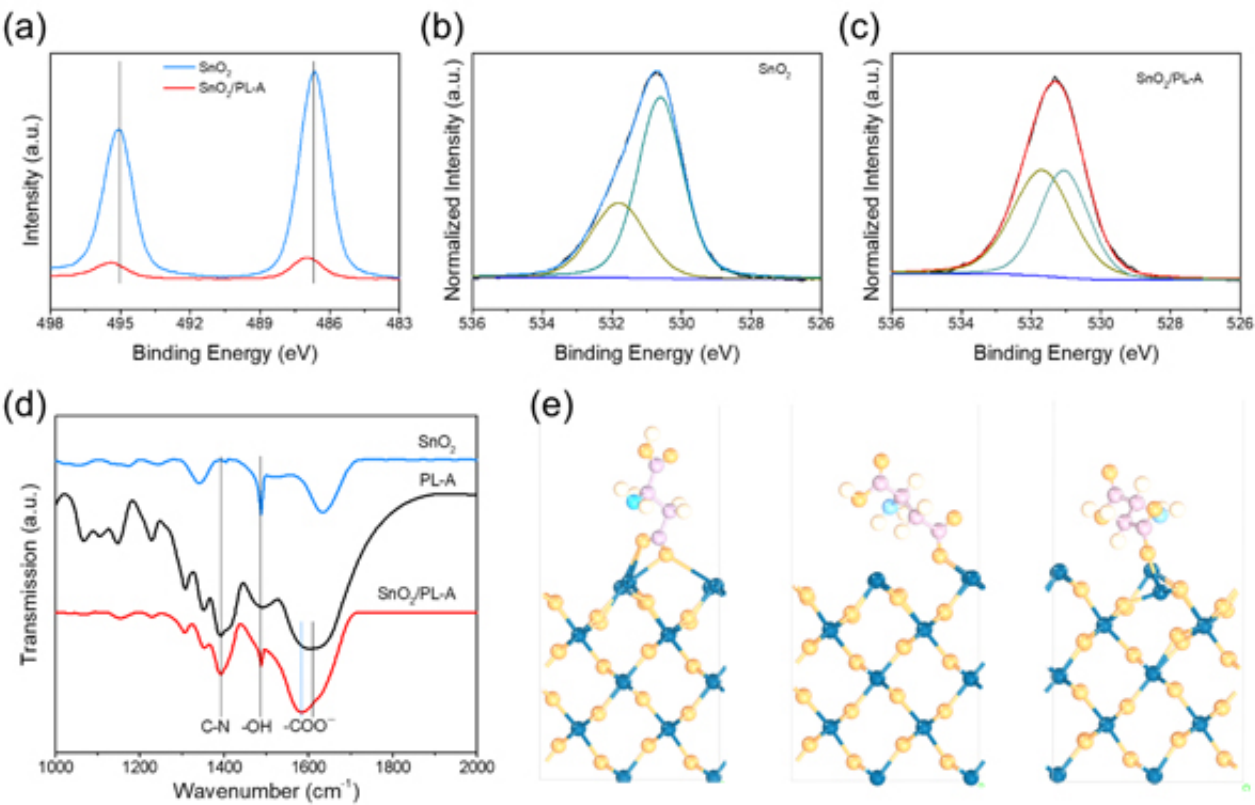


图1.PL-A处理 SnO_2 薄膜的XPS图谱：（a）Sn 3d精细谱、（b）未处理薄膜O 1s精细谱、（c）PL-A处理后薄膜O 1s精细谱，（d）PL-A处理前（蓝线）后（红线） SnO_2 薄膜和纯相PL-A（黑线）的FTIR图谱，（e）PL-A在 SnO_2 （010）晶面上的分布示意图，图中粉色、黄色、浅粉色、浅蓝色和蓝色原子分别代表C、H、O、N和Sn原子。

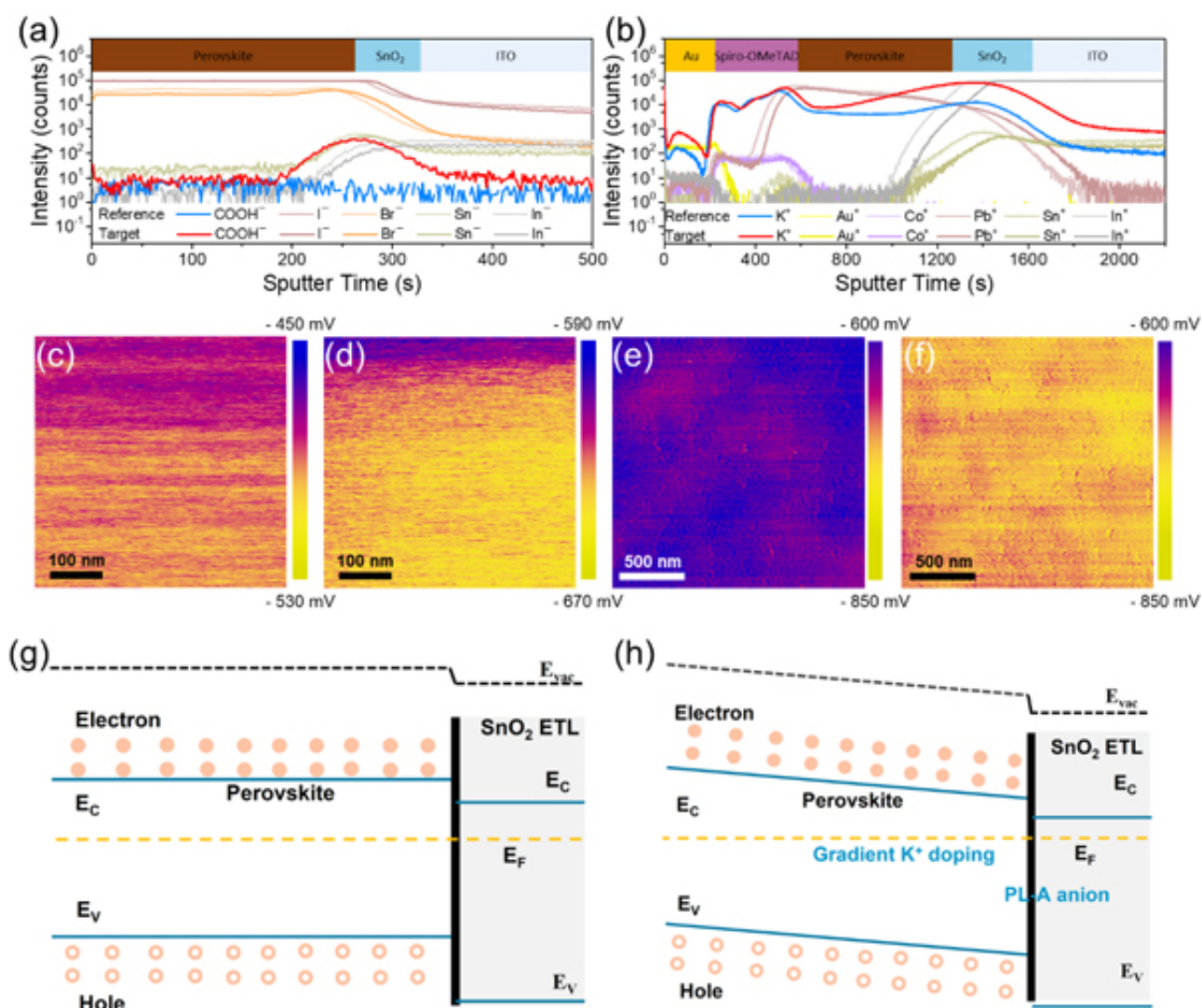


图2. (a) PL-A处理前(参比样品)和处理后(目标样品)ITO/SnO₂/Perovskite复合结构的阴离子纵向分布曲线, (b) PL-A处理前后ITO/SnO₂/perovskite/Spiro-OMeTAD/Au器件中的阳离子纵向分布曲线, PL-A处理前后SnO₂以及钙钛矿表面的电势分布: (c) 未处理SnO₂薄膜、(d) PL-A处理后SnO₂薄膜、(e) 在未处理SnO₂薄膜表面生长的钙钛矿薄膜、(f) 在PL-A处理后SnO₂薄膜表面生长的钙钛矿薄膜, PL-A处理前(g)和处理后(h)器件埋底界面能级结构示意图。

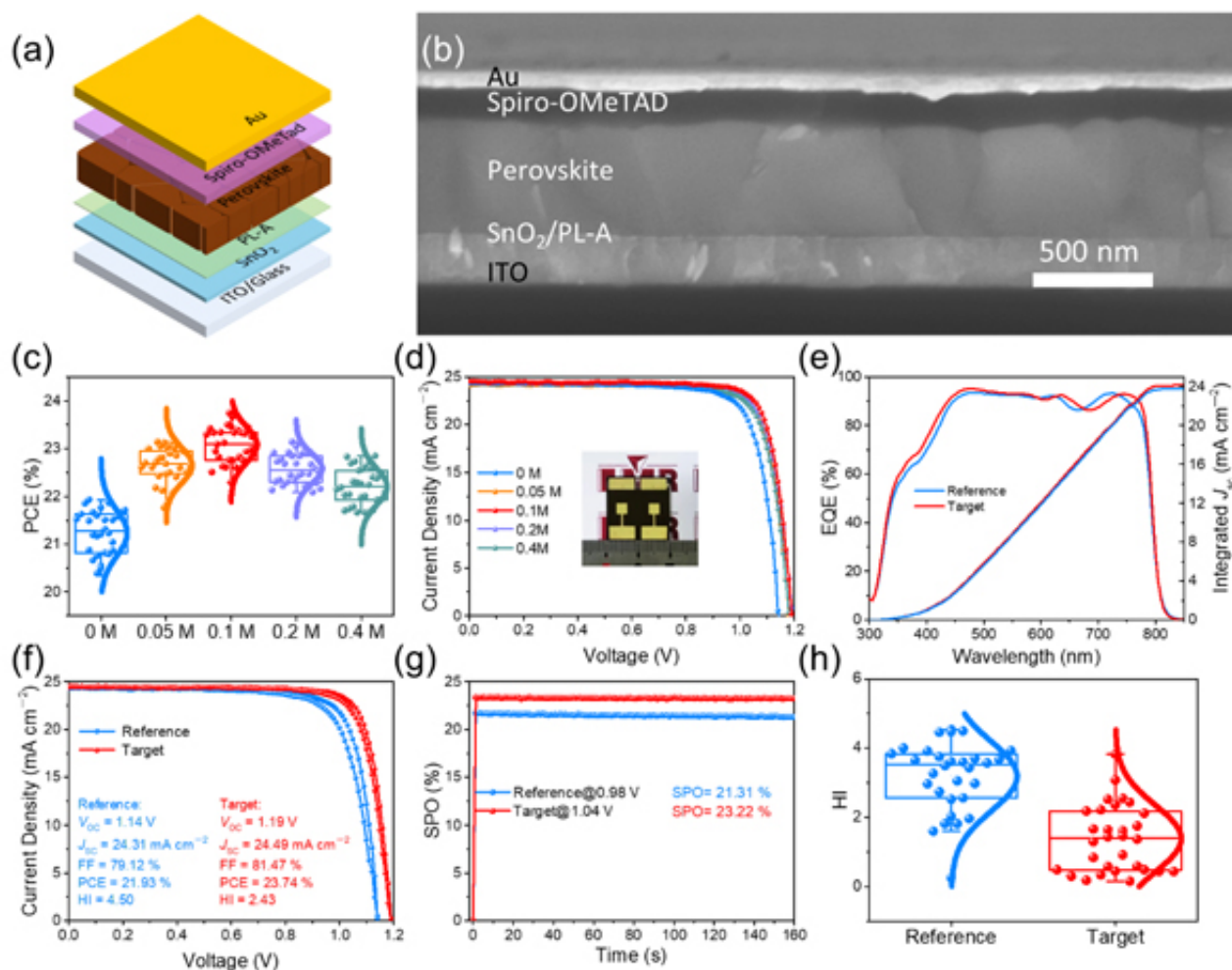


图3.钙钛矿太阳能电池器件的结构示意图 (a) 和SEM截面图像 (b)，利用不同浓度PL-A处理的器件能量转换效率统计结果 (c) 和最佳J-V曲线 (d)，PL-A处理前后最佳性能器件的IPCE曲线 (e)、J-V曲线 (f)、SPO曲线 (g) 和回滞因子HI统计结果 (h)。

研究团队单位：金属研究所

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