钙钛矿光伏研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/21819.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！

钙钛矿光伏研究取得进展。近日，*Science*
发表了钙钛矿光伏领域取得的最新进展，德国亥姆霍兹柏林材料与能源中心、中国科学院上海高等研究院上海光源科学中心衍射线站、河南大学材料学院合作，发表了钙钛矿光伏领域取得的最新进展。相关研究成果以《耐受温度变化的高效p-i-n钙钛矿太阳能电池》（*Highly efficient p-i-n perovskite solar cells that endure temperature variations*）为题，发表在*Science*
上。该研究使用上海光源BL14B线站同步辐射衍射原位表征技术。这一技术为该工作提供了关键数据。

有机金属卤化物钙钛矿基太阳能电池因廉价的材料成本、易于制备大面积器件以及较高的光电转换效率等优点而受到关注。在日夜温差巨大的实际应用环境中，温度变化会引发卤化物钙钛矿材料的相变和晶格应变，致使器件性能迅速衰减直至损坏，这是目前制约钙钛矿太阳能电池走向应用的关键挑战和难题。鉴于此，这项突破性的工作揭示了β-聚（1,1-二氟乙烯）可以有效改善钙钛矿薄膜结晶性能，有效钝化薄膜晶体表面界面缺陷，优化钙钛矿界面能级排列，促进载流子传输，从而提升p-i-n结构钙钛矿器件光电特性。更重要的是，在变温环境中，β-聚（1,1-二氟乙烯）在晶界处的有序排列可以有效的缓冲变温过程中晶粒挤压引起的晶界形变并释放晶格应力，实现可恢复的晶体结构，从而显著提升器件的变温稳定性。

为了剖析钙钛矿薄膜的结晶过程，研究进行了基于同步辐射GIWAXS来表征薄膜形成的整个过程。比较GIWAXS结果（图1A、B）显示，在最初的60秒内，衍射信号的减弱表明DMSO-DMF-PbX2的初始中间相被抑制。这种效果归因于被长链β-pV2F分子隔离的中间相。在成膜过程中观察到的以q = ~10 nm-1沿（001）晶面为中心的散射特征表明，胶体已凝固并转化为黑色相。研究发现，目标薄膜的黑相比对照薄膜的黑相出现得早（Δtt> Δtc），这意味着β-pV2F促进中间相向钙钛矿黑相的转化。快速的相转换与较低的形成能量有关，可能是由于β-pV2F在DMSO和DMF挥发的过程中迅速聚集了分散的PbX2和有机盐。当结晶完成时（阶段t7），目标薄膜的信号比对照薄膜更强烈（图1c）。这表明形成的目标钙钛矿薄膜更加有序。因此，β-pV2F通过降低钙钛矿的形成能量来控制钙钛矿的结晶动力学，促进相变，并使晶体结构更加有序。

为了阐释究器件优异耐变温特性的来源，利用同步辐射GIWAXS进一步探究了变温过程中β-pV2F对钙钛矿薄膜的形态和晶体结构的影响。如图2A、B所示，目标钙钛矿中温度诱导的薄膜降解受到抑制，同时变温过程中晶粒挤压引起的晶界形变也受到抑制，目标钙钛矿结构稳定性显著提高。如图2C所示，钙钛矿应变随温度循环而产生变化，表明钙钛矿中的晶格参数发生变化；相比之下，目标钙钛矿在较窄的范围内（-0.06%至0.38%）表现出稳定的应变循环，这表明目标钙

钛矿具有可恢复的晶体结构和可释放的晶格应力。

论文链接

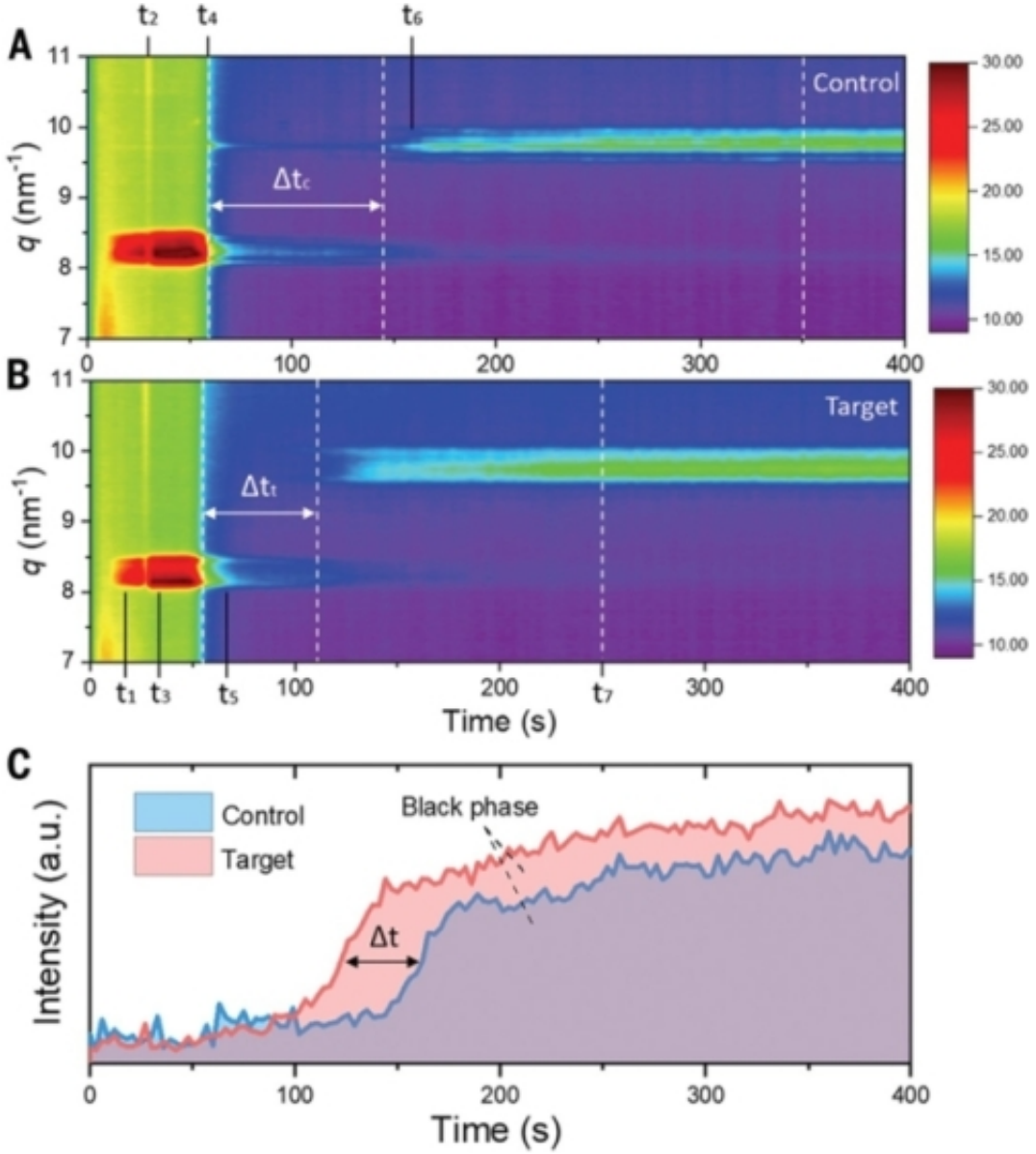


图1.钙钛矿薄膜的结晶动力学

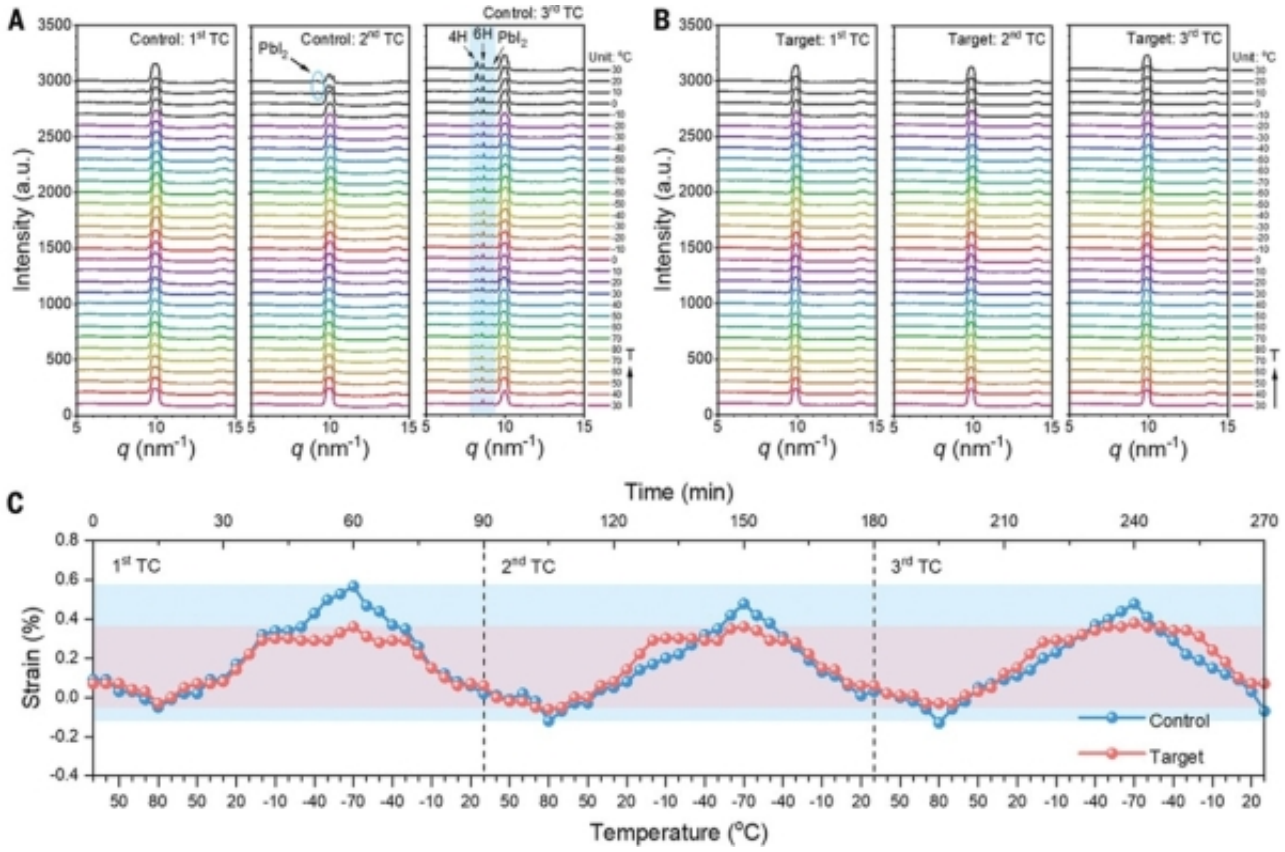


图2.温度循环过程中钙钛矿结构演变

研究团队单位：上海高等研究院

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转发