科学家破解钙钛矿电池寿命基因难题

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/24800.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！

中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所、中国科学院光伏与节能材料重点实验室研究员潘旭和田兴友团队，与韩国成均馆大学教授Nam-Gyu Park、华北电力大学教授戴松元合作，在反式钙钛矿太阳电池研究方面取得新突破。该研究首次发现了钙钛矿阳离子面外分布不均匀是影响电池性能的主要原因，并通过设计1-（苯磺酰基）吡咯（PSP）作为添加剂均匀化钙钛矿薄膜相分布，获得了26.1%的光电转换效率（PCE）。
11月2日，相关研究成果加速在线发表在《自然》（*Nature*）上。

钙钛矿太阳电池是利用钙钛矿型的有机金属卤化物半导体作为吸光材料的太阳能电池，属于新概念太阳能电池。经过多年发展，传统的界面钝化及结晶调控方法在较大程度上推动了电池效率的提升，但近年来在相关研究中电池效率提升的速度明显放缓，遇到了“瓶颈”。科研人员发现钙钛矿薄膜内往往不可避免的发生相分离现象。该团队前期工作表明有效管理卤素相分离有助于提高
器件
性能。高
效率钙钛矿材料往
往通过采用纯碘体系下的阳离子掺杂
组分获得，尤其是$FA_{1-x}Cs_xPbI_3$
体系，不同的阳离子组分在钙钛矿体相面外方向的分布对钙钛矿体相载流子扩散及界面抽取至关重要。研究阳离子面外方向分布，有助于探讨钙钛矿体相载流子动力学过程，更有望推动钙钛矿太阳电池效率的进一步提升。然而，钙钛矿体相的不同阳离子组分分布以及影响电池稳定性和效率损失的原因尚不清楚。

基于此，该团队从$FA_{1-x}Cs_xPbI_3$
体系出发，通过元素定量分析，探究了甲脒（FA）与铯（Cs）阳离子的纵向分布，结合飞行时间二次离子质谱（ToF-SIMS）与X射线光电子谱（XPS），剖析并发现了无机Cs阳离子倾向于沉积在薄膜底部、有机FA阳离子在薄膜上界面处富集。以此为基础，该研究探析了钙钛矿薄膜晶相分布，通过掠入射X射线衍射（GIXRD）与薄膜截面的透射电镜（TEM）分析，证明了在薄膜底部存在面间距较小的晶相，且在薄膜底部显示出与富Cs钙钛矿相关的特征信号。上述实验说明阳离子面外方向的梯度不均匀分布，这是首次可视化验证了钙钛矿薄膜的阳离子组分在面外不均匀分布。

研究团队采用原位试验方法进一步分析了这种梯度不均匀分布的原因，发现了不同阳离子在结晶及相转变过程中的速率差过大是导致组分不均匀的主要原因。进而，该团队设计了PSP分子以弥补不同阳离子间的结晶与相转速率差，制备出均匀化的钙钛矿薄膜。这种阳离子组分均匀分布的

钙钛矿薄膜有效抑制了由底部富Cs相带来的准I型能级排列，提升了载流子寿命及扩散长度，加强了载流子界面抽取。

该研究利用PSP策略
制备的反式钙钛矿太阳电池，获得了26.1
%的最高效率、
25.8%的认证效率。此外，经2500小时最大功率电追踪后（MPPT），未封装的器件仍保持初始PCE的92%的可靠运行稳定性。该研究表明通过均匀化钙钛矿组分面外分布可获得优异电池性能，这开辟了提升电池器件稳定性的新途径，有望打破钙钛矿太阳电池的效率瓶颈，为进一步提升高效、稳定的钙钛矿太阳电池提出了明确方向，对推动PSCs走向商业化发展具有重要意义。

研究工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金、安徽省自然科学基金和合肥物质院院长基金等的支持。南方科技大学的科研人员参与研究。

论文链接

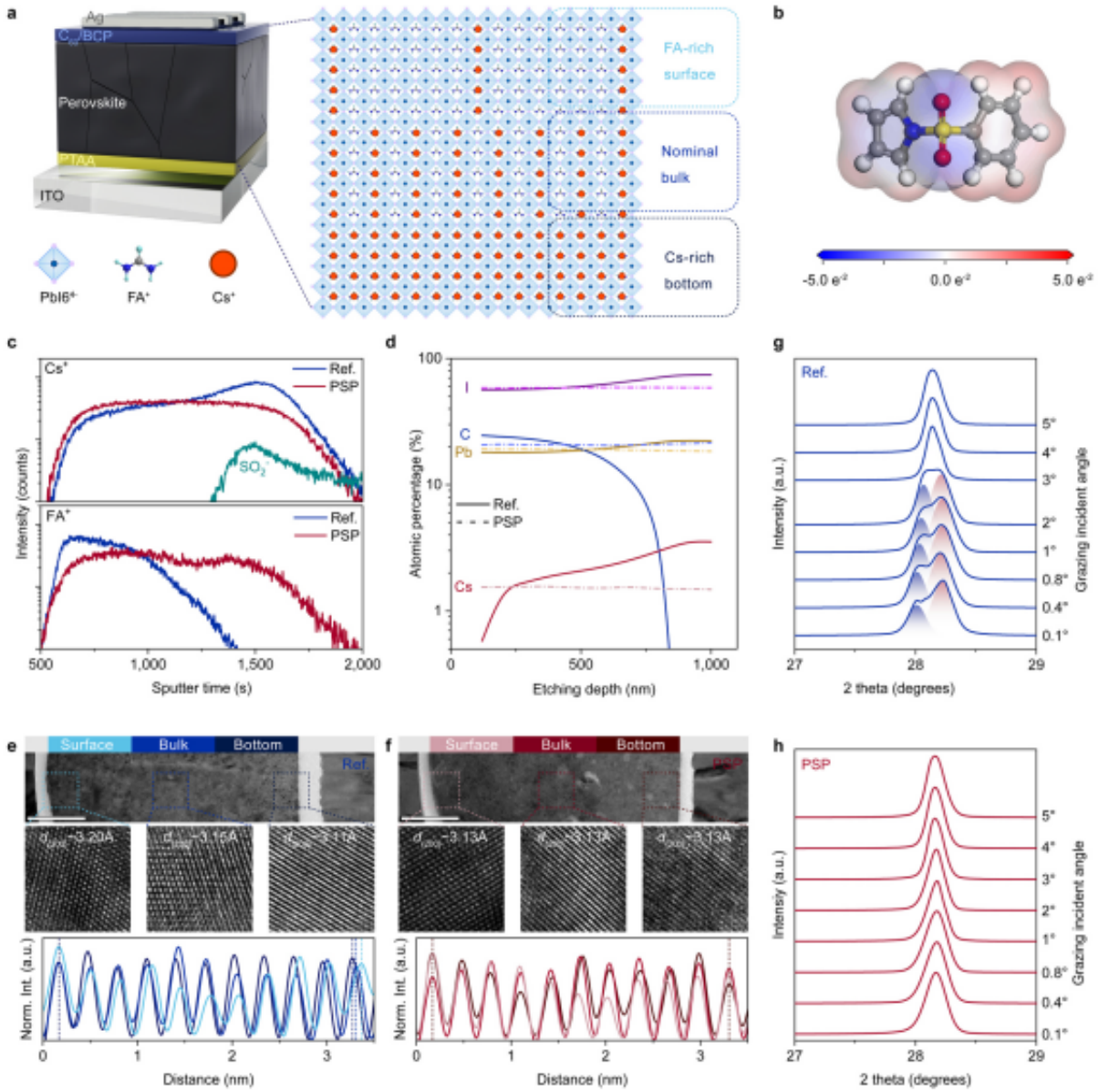


图1. 钙钛矿空间垂直的FA-Cs相分离：（a）由面外FA-Cs偏析引起的不均匀相分布图；（b）PSP的静电势（ESP）图像和分子结构；（c）对照样品和PSP器件的飞行时间二次离子质谱（ToF-SIMS）光谱阳离子分布；（d）基于深度XPS的原子百分比分布；对照样品（e）和PSP处理样品（f）的HAADF透射电子显微镜图像（比例尺参考：200nm）；对照样品（g）和PSP（h）处理的钙钛矿薄膜底部收集的GIXRD光谱。

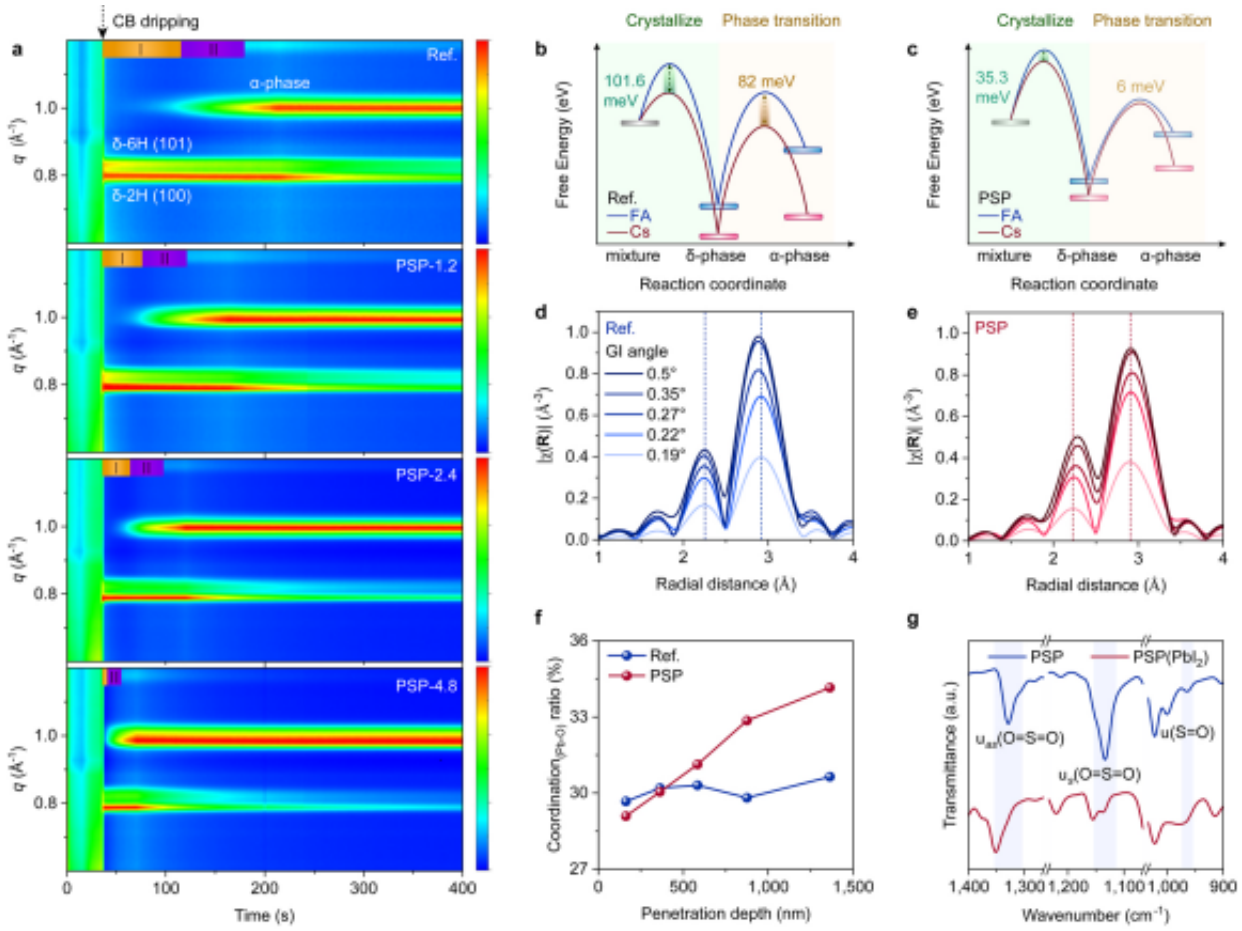


图2. FA-Cs相分离的起源：（a）原位同步辐射掠入射广角X射线散射（原位GIWAXS）图谱揭示了结晶和相变过程；对照样品（b）和PSP样品（c）在结晶和相变过程中自由能演化的计算结果示意图；（d-e）X射线吸收精细结构谱（EXAFS）测量的傅里叶变换R空间结果图；（f）根据EXAFS测量计算出的Pb-O配位比图；（g）PSP和PSP（PbI_2）络合物的FTIR谱图。

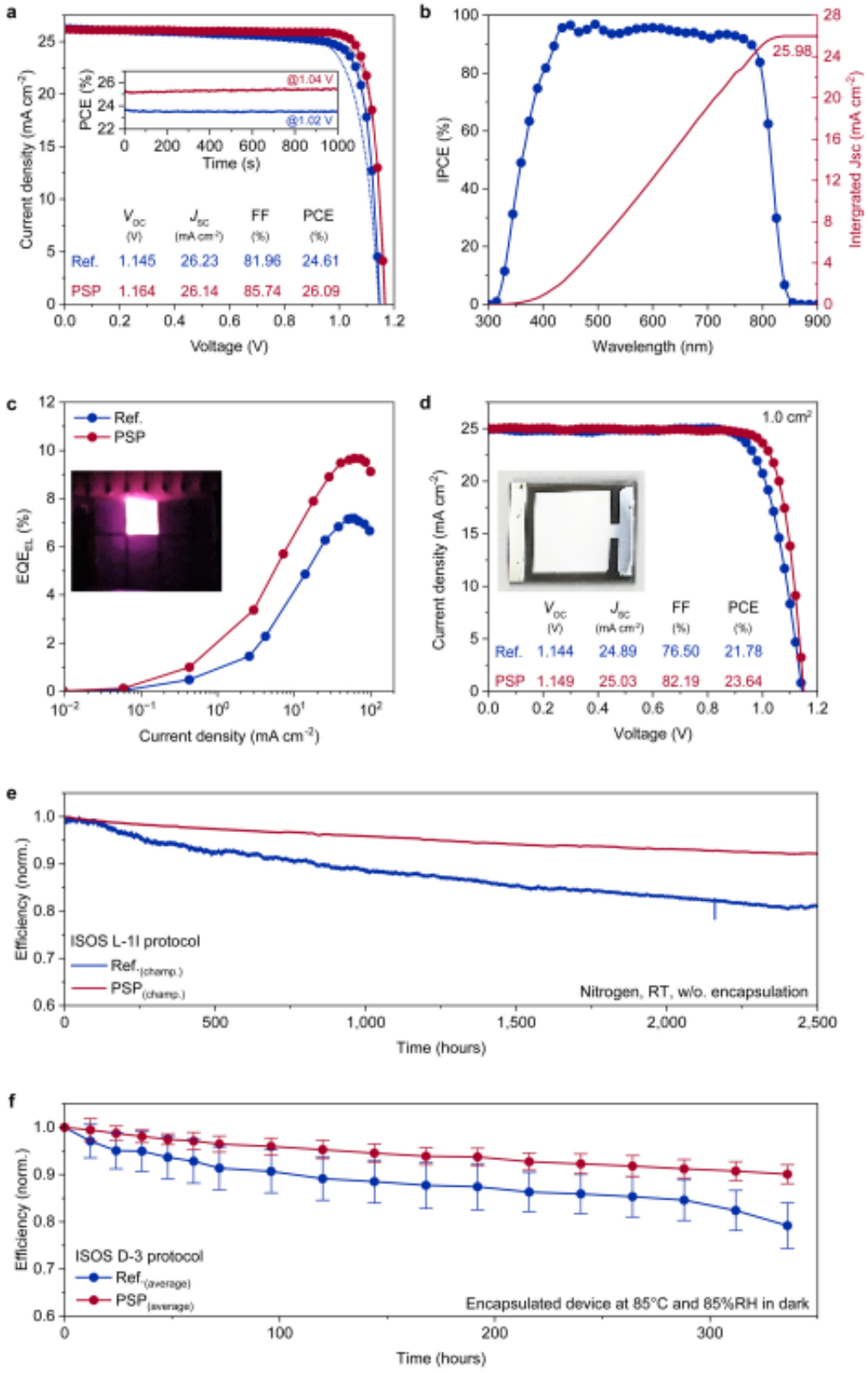
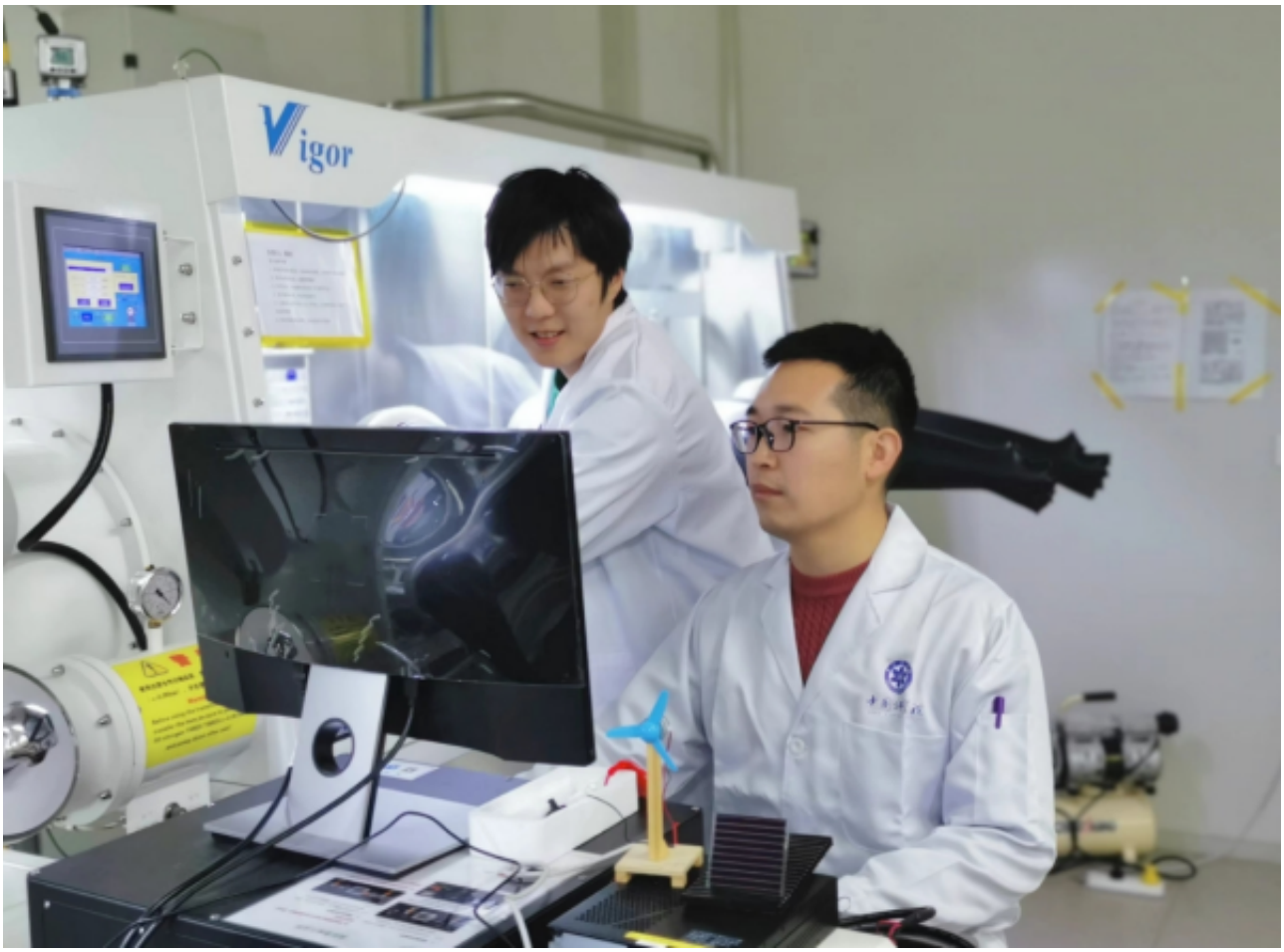


图3. 器件性能：（a）小面积钙钛矿太阳电池的J-V曲线；（b）钙钛矿太阳电池的IPCE曲线；（c）小面积钙钛矿太阳电池
以LED模式运行的EQE曲线；（d）1cm^{2}钙钛矿太阳电池的J-
V曲线；钙钛矿太阳电池在（e）ISOS L-1I与（f）ISOS D-3标准下的运行稳定性。



科研人员在检测电池器件性能

研究团队单位：合肥物质科学研究院

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