
缺陷钝化机制与柔性钙钛矿太阳能电池研究获进展

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/27441.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！

缺陷钝化机制与柔性钙钛矿太阳能电池研究获进展。近日，中国科学院广州能源研究所研究员徐雪青团队与合作者，在界面缺陷钝化机制与柔性钙钛矿太阳能电池方面取得新的研究进展。相关研究发表于《先进功能材料》（Advanced Functional Materials），相关成果已申请国家发明专利。

柔性钙钛矿太阳能电池器件结构示意图及PFPAI钝化钙钛矿缺陷机理图。研究团队供图

钙钛矿表面和晶界处的陷阱状态是柔性钙钛矿太阳能电池（FPSCs）进一步商业化的主要障碍之一。

该研究将两种新颖的多功能氟化丙胺盐2,2,3,3,3-五氟丙胺盐酸盐（PFPAI）和3,3,3-三氟丙胺盐

酸盐 (TFPACl) 原位引入光吸收层, 以钝化钙钛矿表面和晶界缺陷, 并提高FPSCs的性能。核磁共振结果验证了PFPACl和TFPACl与钙钛矿前驱体成分的强相互作用, 首次从二维核磁共振数据中推导出了上述两种添加剂与碘化甲脒形成的超分子配合物结构, 指出了钝化剂分子在钙钛矿成膜之前与其预先组织形成氢键的重要性。

实验和密度泛函理论计算表明, 由于氟烷基较高的电负性, PFPACl可能更倾向于解离为 $R-NH_3^+-Cl^-$ 的形式。因此, 2,2,3,3,3-五氟丙胺盐与甲脒空位缺陷的结合强于其与3,3,3-三氟丙胺盐的结合, 同时阴离子 Cl^- 与碘化甲脒空位缺陷及FPSCs中未配位的铅离子之间具有足够强的相互作用, 导致PFPACl可以均匀覆盖于钙钛矿薄膜的整个表面, 并更有效地与空穴传输层能级匹配。最终, 经PFPACl原位修饰的FPSCs实现23.59%的光电转换效率, 在1000小时后仍保有90%的初始效率, 表现出优异的运行稳定性。

该研究由中国科学院广州能源研究所研究员徐雪青团队联合俄罗斯联邦化学物理和药物化学问题研究中心、哈尔滨工业大学郑州研究院等科研人员合作完成, 并得到中国科技部外国专家项目、中国科学院国际交流计划项目和中国科学院战略性先导专项预研项目的支持。(来源: 中国科学报朱汉斌 郑望舒)

相关论文信息: <https://doi.org/10.1002/adfm.202405078>

作者: 徐雪青等 来源: 《先进功能材料》

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