
钙钛矿太阳能电池中的“晶面魅力”：高密勒指数晶面助力性能提升

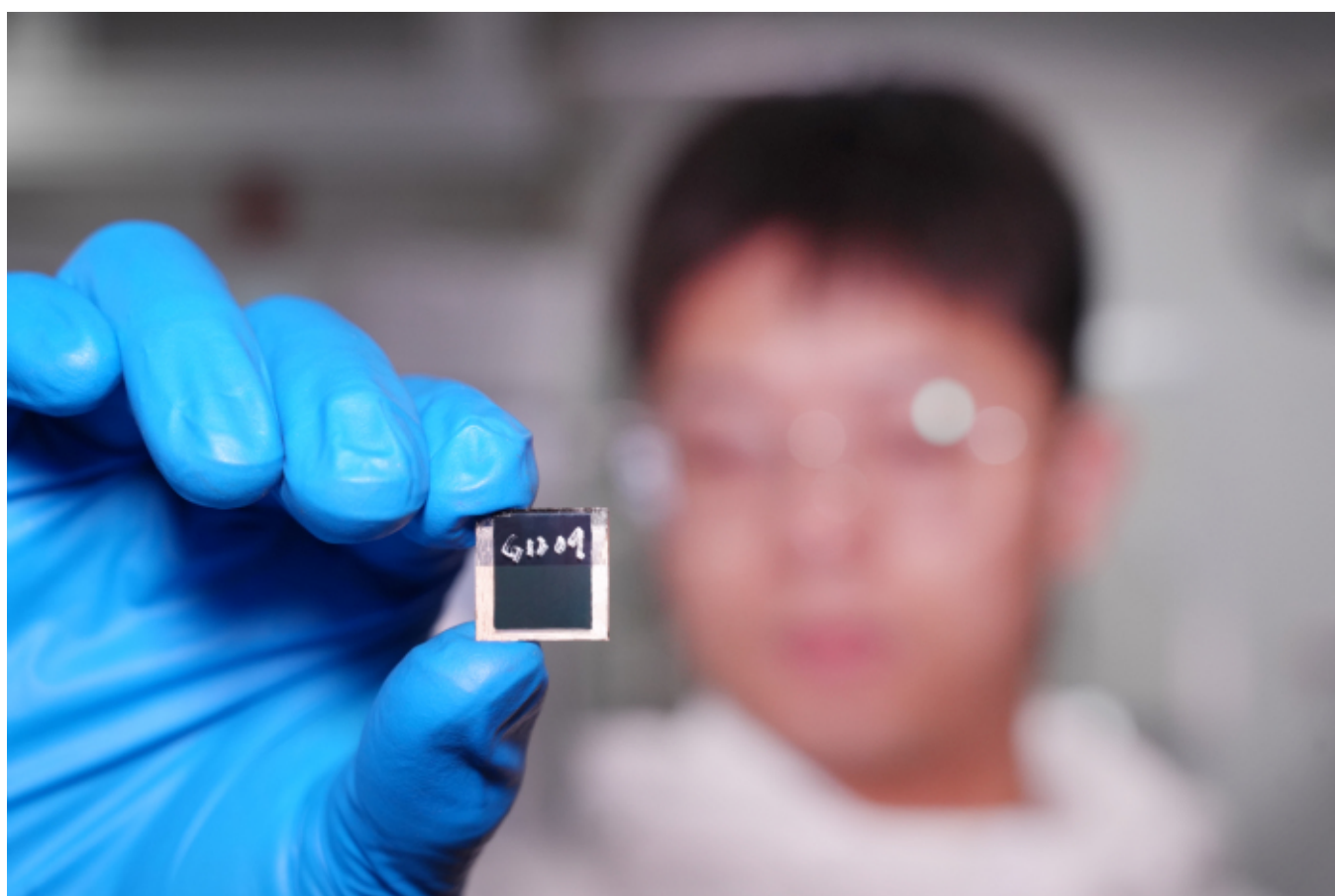
作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/29883.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！

钙钛矿太阳能电池中的“晶面魅力”：高密勒指数晶面助力性能提升

钙钛矿太阳能电池作为一种新的清洁能源技术，为中国光伏行业高质量发展注入新动能。近日，北京大学与国内外多个科研团队合作在《自然》发表最新成果论文，“高密勒指数晶面的相干生长提升钙钛矿太阳能电池性能”，为钙钛矿太阳能电池新发展助力。



北京大学团队制备的钙钛矿太阳能电池。（课题组供图）

“这项研究将为钙钛矿太阳能电池性能优化提供新的增长点，也是钙钛矿光电领域基础研究的守正创新。”论文通讯作者、北京大学校长龚旗煌院士告诉《中国科学报》。

双路径：钙钛矿太阳能电池性能提升的探索

在太阳能电池中，光电转换效率是衡量其将光能转化为电能的效率指标。在钙钛矿太阳能电池中，主要通过两种途径提升光电转换效率：一是提高光吸收材料对入射光子能量的俘获率，即增大对太阳光能的有效吸收；二是减弱光生载流子的非辐射复合，即减小产生的电能在电池内部的损耗。

在钙钛矿太阳能电池领域过去十多年的发展中，大量研究工作聚焦于减小电能在电池内部的损耗，即主要通过降低钙钛矿吸光层中的缺陷以及电池各功能层界面处的缺陷，减弱光生载流子在电池内部的非辐射复合能量损失。这种“降缺陷，提效率”的方式取得了不错的进展，相关认知也越发完善。

北京大学团队长期开展钙钛矿太阳能电池缺陷调控和性能提升的研究，积累了扎实的基础与丰富的经验。近年来，团队对钙钛矿太阳能电池中钙钛矿层的上界面、埋底界面以及电极缓冲层界面等开展了深入研究，有针对性地提出了一些缺陷调控和性能提升策略，在2023年已经获得光电转换效率超过25%的钙钛矿太阳能电池。

“要进一步提升光电转换效率，还需要在现有基础上，继续提高光吸收材料对入射光子能量的俘获率。”本文通讯作者、北京大学教授朱瑞对《中国科学报》说。

通常来说，增加钙钛矿吸光层的厚度可以增强对入射光的吸收，从而提高入射光子的俘获能力，获得更多的光学增益，进而提升光电转换效率。然而，吸光层薄膜增厚往往伴随着薄膜中缺陷的增加，导致薄膜中非辐射复合变得更加严重、电池光电转换效率降低，入射光吸收增强带来的光学增益会被抵消。因此，朱瑞表示亟须开发新的工艺来克服这项挑战。

温度：影响晶面取向的源动力

针对这样的挑战，北京大学团队联合国内外多个研究团队进行攻关研究，最先遇到的难点是电池性能的季节性波动问题，也就是高性能电池的实现通常存在明显的季节依赖性。

“这是近十年来总是困扰我们的一个问题，也是领域里经常碰到的问题。起初，大家发现湿度波动会影响电池功能层的制备，随后我们将全部制程转移到湿度可控的惰性气氛中，但电池性能的季节依赖性依然存在。”朱瑞介绍说。

“除湿度外，随季节更替而出现明显变化的另一个因素是，温度。”论文通讯作者、北京航空航天大学教授罗德映建议从温度入手解决性能波动问题。

团队通过精准控制钙钛矿薄膜涂布阶段的环境温度，来优化钙钛矿薄膜的成核和晶粒生长过程，显著改善了电池性能的季节依赖性问题，使得在一年四季制备的电池都能有一致的光电转换性能。

在寻找其中机理的过程中，团队发现钙钛矿薄膜的高密勒指数晶面对环境温度存在依赖关系。当钙钛矿薄膜涂布阶段的环境温度处于特定条件下时，钙钛矿薄膜中高密勒指数（211）晶面的占比会增加，经验证发现（211）晶面具有“自钝化”以及形成“相干晶界”的特性，这使得薄膜内部及表面的缺陷浓度大幅度降低。

“当发现高密勒指数（211）晶面具有如此特殊的性质以后，整个团队都很激动。我们借助这些特性来改善晶体内部和表面的缺陷，并进一步在钙钛矿微米级厚膜中进行验证，实现了‘光子利用与电学损失’的协同优化。”罗德映说。

团队充分利用上述发现，研制出高质量的微米级钙钛矿厚膜，在提高对入射光子俘获能力的同时，显著减少了电能在电池内部的损失，成功将光电转换效率提高至26.1%，并提升了电池在光、热等外界条件下的工作稳定性。

“这项研究展示了一种能够制备厚度较大但仍保持高质量的钙钛矿薄膜的方法，不仅显著提升了太阳能电池的性能，还深化了我们对这种‘迷人材料’工作机制的认识，并为如何优化其性能提供了新的思路。”论文通讯作者、英国剑桥大学教授Samuel D. Stranks表示。

高密勒指数晶面：钙钛矿材料研究的守正创新

龚旗煌认为，“基础研究对关键核心技术具有先导性、引领性作用，加强基础研究是突破关键核心技术的‘先手棋’”。从高密勒指数晶面角度切入来开展钙钛矿材料的性能研究，是钙钛矿光电领域的基础探索，对领域技术的发展将有着重要的指导意义，钙钛矿材料中其他高密勒指数晶面也同样值得深入挖掘。

那么，高密勒指数晶面是什么？

密勒指数是材料晶体学中的一个概念，是用于描述晶面方向的一个符号系统，通过三个整数（ h, k, l ）表示晶面与晶轴的相对关系。高密勒指数是指（ h, k, l ）数值较大的晶面，通常认为（100）、（110）、（111）为低密勒指数晶面，除此以外的其他晶面为高密勒指数晶面。

自2009年钙钛矿材料被首次用于太阳能电池后，国内外对钙钛矿材料的晶体学研究从未停止，而大部分研究重点关注钙钛矿材料中（100）、（110）、（111）这三个低密勒指数晶面。

“早在上世纪的半导体材料晶体学研究中，高密勒指数晶面就已经吸引了关注，比如硅（113）、砷化镓（2511）等晶面。”罗德映说：“高密勒指数晶面相较于常见的低密勒指数晶面具有更复杂的原子排列，可能导致独特的表面重构和特有的电子状态。”

本文第一作者、北京大学博士研究生黎顺德补充说：“半导体材料中有些高密勒指数面几乎不存在任何空位和缺陷。与硅、砷化镓等材料相比，钙钛矿材料的元素组成和晶体结构更为复杂多样，其高密勒指数晶面可能会呈现更加‘缤纷多彩’的特性，值得深入挖掘。”

黎顺德自加入团队便专注于反式钙钛矿太阳能电池的性能研究，他表示：“本科和硕士阶段对材料晶体学的学习帮我打下一定基础，在攻读博士学位期间，导师朱瑞老师因材施教的指导方式对我帮助很大。”谈及未来的进一步研究，他充满信心。

“本研究工作仅是钙钛矿材料中高密勒指数晶面研究的开端。我们相信，对钙钛矿材料中其它高

密勒指数晶面的研究可以挖掘出更多新方法、新思路，帮助加深对钙钛矿材料中‘高密勒指数晶面家族’的理解。”朱瑞表示。他希望本项工作能够‘抛砖引玉’，以这样的思路带给领域内外的研究者们一些启发，加强基础研究，共同助力钙钛矿太阳能电池领域的高质量发展。

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41586-024-08159-5>

作者：崔雪芹 来源：中国科学报

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