
微米级钙钛矿厚膜的可控制备获突破

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/30167.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！

微米级钙钛矿厚膜的可控制备获突破。宁波东方理工大学（暂名）工学部助理教授韩兵，与北京大学、北京航空航天大学、英国牛津大学、英国剑桥大学等国内外合作者，通过环境温度精细调控实现了高质量微米级钙钛矿厚膜的可控制备，最终显著提升了不同活性面积的反式钙钛矿太阳能电池的综合光伏性能。日前，相关研究成在线发表于《自然》。

钙钛矿太阳能电池作为一种新型的清洁能源技术，为推动我国光伏产业高质量发展注入新的动能。而反式结构钙钛矿太阳能电池的光电转换效率仍低于其理论极限，亟须阐明钙钛矿晶界缺陷来源并针对开发新的方法来克服这项挑战。

研究团队通过密度泛函理论计算发现，高密勒指数的（211）晶面在生长延伸至薄膜表面时，具备自发调节碘原子数量至化学计量比状态的自钝化能力。在自钝化后，（211）晶面的表面能进一步降低，且对化学势的依赖性较小，能够在复杂环境下保持稳定，从而提升薄膜的光电特性。然而，想要验证这一计算结果，需要对钙钛矿的相关晶面及晶界进行直接观测以提供真实的实验图像。通过电子显微镜对钙钛矿晶面及晶界进行原子级分析是最直接、真实的观测手段之一，但有机无机杂化钙钛矿材料中存在弱结合力的有机位点，其难以承受常规高能电子束辐照带来的损伤。

韩兵课题组结合液氮温度控制+低温自动进样系统+直接电子相机+超低剂量成像技术，实现了有机无机杂化钙钛矿材料晶界的无损原子级观测。研究团队发现在（211）取向晶粒与（001）取向晶粒之间形成了相干晶界，抑制了晶界位置的悬挂键、点缺陷、线位错等。研究团队通过精准控制钙钛矿薄膜涂布阶段的环境温度，优化钙钛矿薄膜的成核和晶粒生长过程，成功制备出具有高密勒指数（211）晶面择优取向的高质量钙钛矿厚膜，并揭示其在减少薄膜电学损失方面的机理。

基于这一机制，研究团队通过调控钙钛矿薄膜中的高密勒指数晶面，制备出微米级厚度的高质量钙钛矿光吸收层，并进一步制备出高性能反式钙钛矿太阳能电池，其光电转换效率最高达26.1%，第三方认证值为25.85%。同时，电池在光、热等外界条件下的稳定性也有显著改善。以上理论与实验结果表明，调控钙钛矿薄膜中的高密勒指数晶面及其相干晶界，将有助于获得高质量的、微米级厚度的钙钛矿光吸收层，这为实现高性能钙钛矿太阳能电池提供了重要的方法指导。（来源：中国科学报 温才妃 姚瑶）

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

作者：韩兵等 来源：《自然》

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