
科学家制备出高效稳定的反式氧化镍基钙钛矿太阳能电池

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/31490.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！

科学家制备出高效稳定的反式氧化镍基钙钛矿太阳能电池。北京时间2025年1月25日凌晨，南方科技大学徐保民教授、王阳刚教授、王行柱教授联合香港城市大学Alex Jen教授在Joule期刊上发表了一篇题为Rigid molecules anchoring on NiOx enable >26% efficiency perovskite solar cells的研究成果。

该成果报道了一种引入具有刚性骨架的多齿锚定分子的策略，能够有效抑制钙钛矿与氧化镍界面处的离子反应和缺陷形成，为实现高效稳定的反式钙钛矿太阳能电池提供了新的思路。

论文通讯作者是徐保民、Alex Jen、王阳刚和王行柱，第一作者是王登、刘志鑫、乔颖。

随着光电转换效率的迅速提升并超过26%，倒置结构的有机-无机卤化物钙钛矿太阳能电池被视为降低光伏成本的极具潜力的候选者。对于倒置电池而言，器件性能在很大程度上取决于作为底部接触的空穴传输材料，它不仅起到电子阻挡层的作用，还为钙钛矿晶体的生长提供模板作用。

在过去几十年里，人们探索了多种类型的，如有机小分子、聚合物和金属氧化物半导体。其中，氧化镍（NiOx）纳米离子作为一种无机p型半导体材料引起了研究者的广泛关注，因其具有良好的表面亲水性、稳定的化学特性、较低的加工成本以及与叠层和大面积器件的高度兼容性。然而，与具有可调节官能团的有机空穴传输材料不同，原始的NiOx传输层的光电性能不易调控。更糟糕的是，具有不同氧化态（ $\text{Ni} \geq 3+$ 和 Ni^{2+} ）的NiOx表面化学性质复杂，会与上层钙钛矿发生化学氧化还原反应，在NiOx/钙钛矿界面处形成大量埋底缺陷和空穴提取势垒。

为应对这些挑战，人们通常采用元素掺杂和表面处理来调整NiOx的功函数并钝化表面缺陷。尤其是最近，p型的多齿锚定的小分子分子受到广泛研究，它们可通过多种类型的化学键锚定在NiOx表面，例如，MeO-2PACz、2PACz和Me-4PACz，通过调控NiOx/钙钛矿掩埋界面处的偶极矩和能级排列来提升器件性能。然而，这些分子的可旋转性导致锚定基团与NiOx基底之间连接不紧密，产生额外的界面反应通道和非辐射复合损失。

因此，理想的锚定分子应具备以下特点：（1）具有较强的分子刚性和更多的锚固位点，以实现与NiOx纳米颗粒的强结合；（2）呈现合适的锚定构型和均匀的分子覆盖，避免NiOx与钙钛矿之间的非理想接触；（3）实稳定的化学界面，减少缺陷形成并抑制非辐射复合损失。

考虑到这些因素，研究团队优化MDA分子的策略是减少旋转构型的不确定性并增加锚定位点数

量，从而增强分子与NiO_x基底之间的相互作用。理论模拟表明，一种名为FY-CPA的刚性骨架的锚定分子，倾向于形成四齿结合，并与NiO_x表面紧密平行堆叠，从而更有效地提取空穴。

具体实验中，分子的原位沉积过程使得在钙钛矿薄膜从顶部垂直结晶过程中，FY-CPA能够均匀且牢固地锚固在NiO_x上，这显著减少了活性的Ni高价离子，阻碍了离子迁移通道，从而抑制了界面反应并将非辐射复合损失降至最低。

最终，采用FY-CPA的器件在实验室获得了26.21%的效率（认证效率为25.99%）。此外，对于有效面积为1.02cm²的器件，可实现25.31%的效率（认证效率为24.90%），这是目前报道的该尺寸钙钛矿电池的最高效率之一。此外，优化后的器件在50℃连续光照下进行1000小时最大功率点跟踪后，可保持初始效率的96.5%；在85℃氮气气氛中热老化1300小时后，仍能保持初始效率的93.8%。（来源：科学网）

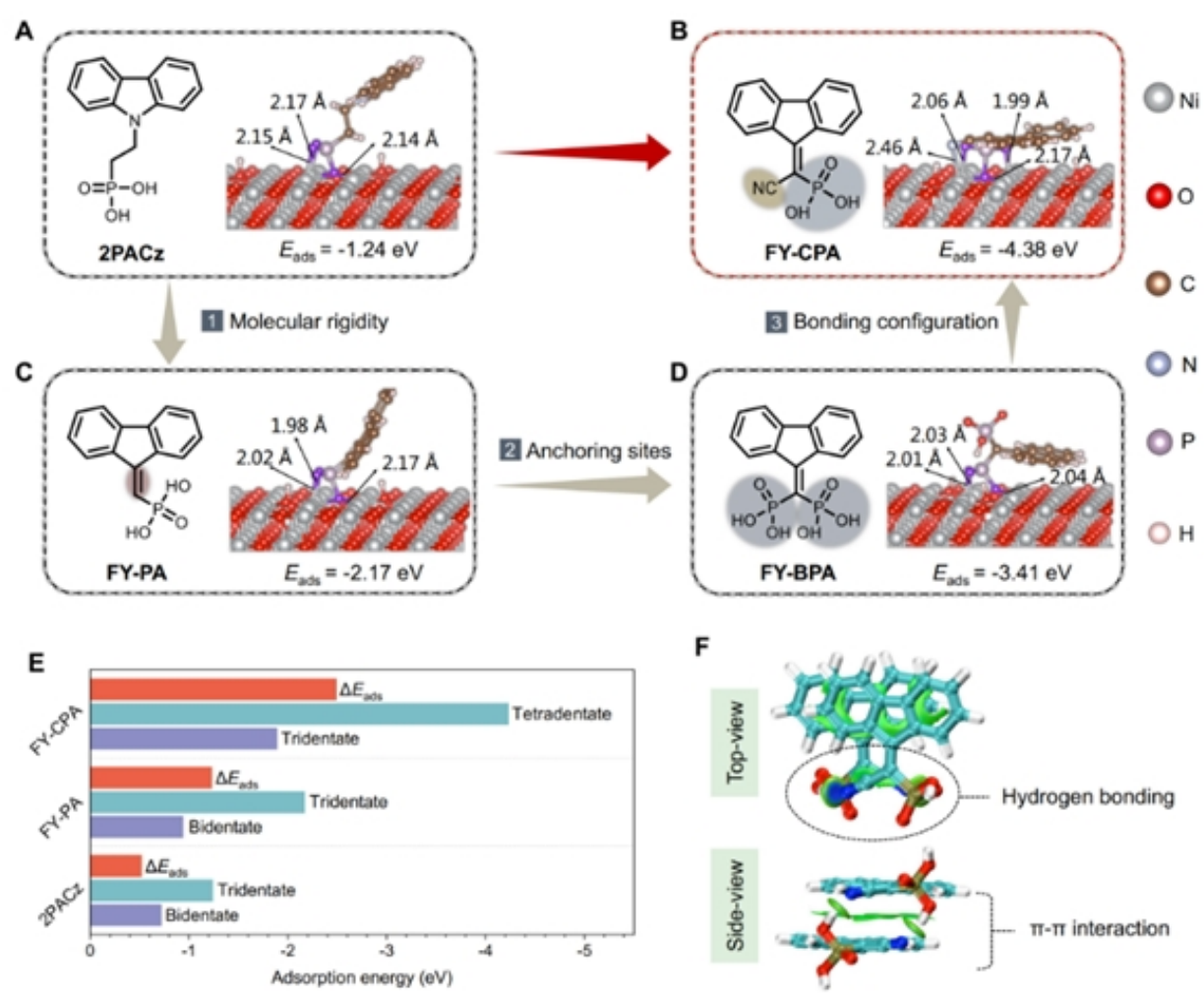


图1：多齿锚定分子的结构设计和理论分析。

图2：在埋底界面处的分子锚定机理。

图3：多齿锚定分子对于氧化镍/钛矿界面反应的调控机制。

图4：界面处载流子动力学过程和复合机制。

图5：反式钙钛矿电池的器件性能和长期稳定性。

相关论文信息：<https://doi.org/10.1016/j.joule.2024.101815>

作者：徐保民等 来源：《焦耳》

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