

---

# 金属离子交联自组装分子空穴选择层助力高效稳定钙钛矿太阳能电池

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/38999.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！*

**金属离子交联自组装分子空穴选择层助力高效稳定钙钛矿太阳能电池。**

2026年3月27日，上海科技大学宁志军团队在Chem期刊发表了题为A metal-ion-linked self-assembled molecular layer as a robust hole-selective contact for perovskite solar cells的研究论文。

该研究基于传统自组装小分子材料，设计出一种金属连接分子多层结构。该多层结构展现出优异的结构和功能稳定性，实现了空穴选择接触的稳定构建，极大提升了钙钛矿太阳能电池器件的稳定性。论文的通讯作者是宁志军教授，第一作者是博士生周炜。

钙钛矿太阳能电池（PSCs）凭借其光电转换效率的快速提升，已成为极具前景的下一代光伏技术之一。其中，推动PSCs效率持续攀升的关键因素之一，就是空穴传输层材料的发展与迭代。近年来，尽管自组装单分子层（SAM）的开发显著推动了反式钙钛矿太阳能电池器件效率的提升，但当前器件的整体性能仍受限于SAM层的均匀性不足、稳定性欠佳的瓶颈。首先，溶液法制备的SAM薄层很难在导电玻璃衬底上实现均匀致密的覆盖，尤其是在表面粗糙度较高的掺氟氧化锡（FTO）衬底上。这种不均匀覆盖会导致钙钛矿与底部电极发生不良的直接接触，产生不可控的漏电通道并引入额外的界面能量损失。此外，这种不均匀的覆盖所造成的负面影响，在大面积电池器件中会被进一步放大，进而限制电池组件的光电转换效率。另一方面，SAM层往往表现出较差的稳定性，在光热老化条件下极易发生脱吸附以及自聚集现象。这种现象会严重影响SAM层的均匀性和载流子提取能力，进而限制了器件的长期运行稳定性。

在这项工作中，宁志军团队开发了一种金属离子交联自组装分子层结构（MiLSAM），用以替代传统自组装单分子层，作为器件的空穴选择接触层。该策略通过金属离子与SAM分子之间形成多重配位键，构建稳定的交联网络，抑制SAM小分子的脱吸附和自聚集，显著增强界面结构的稳定性。MiLSAM采用逐层沉积工艺制备而成，核磁与XPS谱图表征结果表明，ZrOCl<sub>2</sub>与SAM中的膦酸基团具有较强的反应活性，能够在FTO衬底上进行原位交联。通过转角XPS和SAM覆盖因子的计算，进一步证明了MiLSAM多层结构的成功形成。

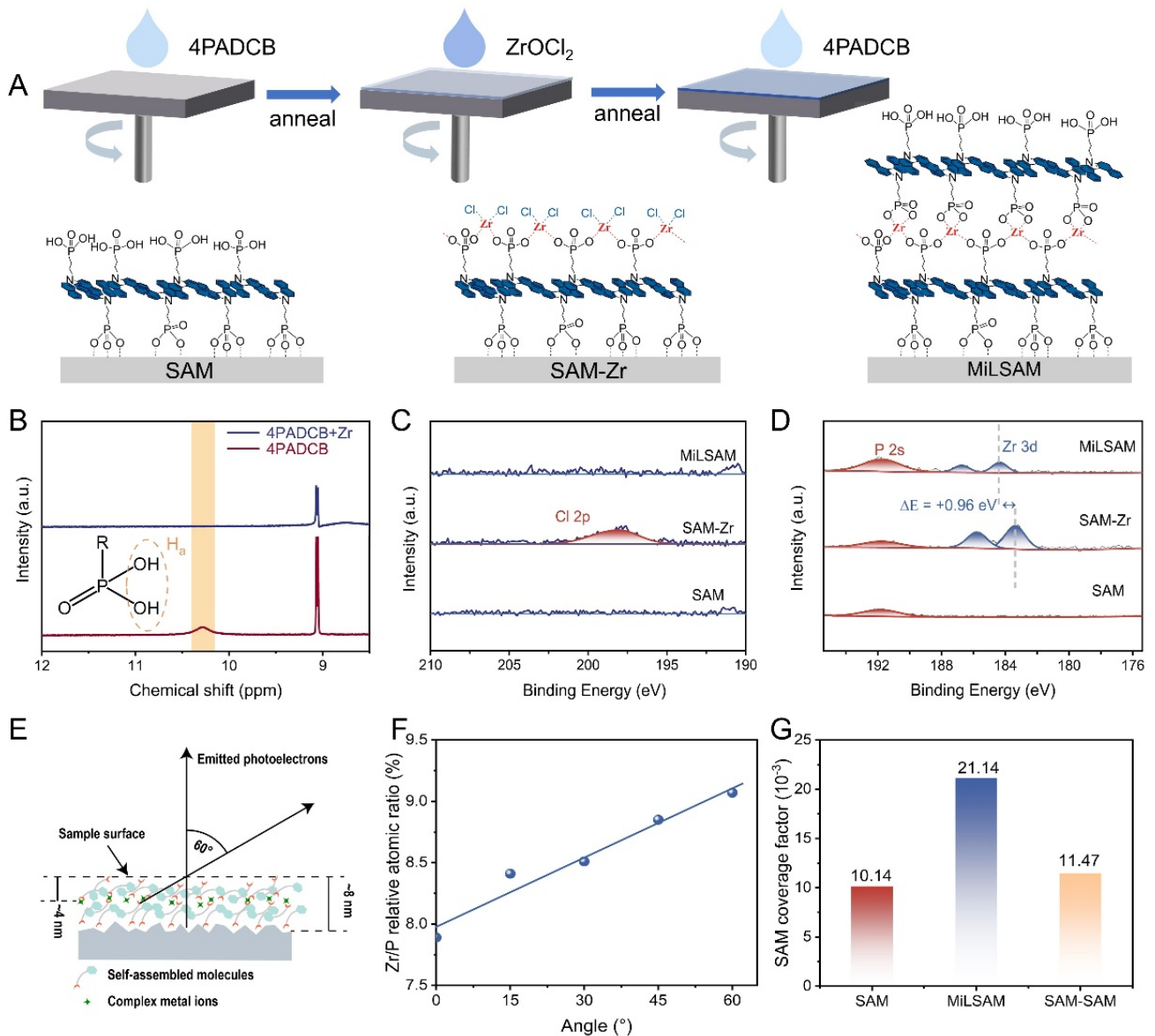


图1：MiLSAM空穴选择接触层的制备与分析。

通过AFM-IR和KPFM测试发现，MiLSAM结构的构建显著提升了SAM分子在FTO衬底表面的覆盖度与衬底的电势均匀性，可以有效减少埋底界面局部的不良接触位点，抑制界面处的非辐射复合。同时，MiLSAM在光热老化过程中表现出更优异的结构与表面电势稳定性，能够在器件运行过程中维持高效的空穴提取，抑制界面电荷积累。

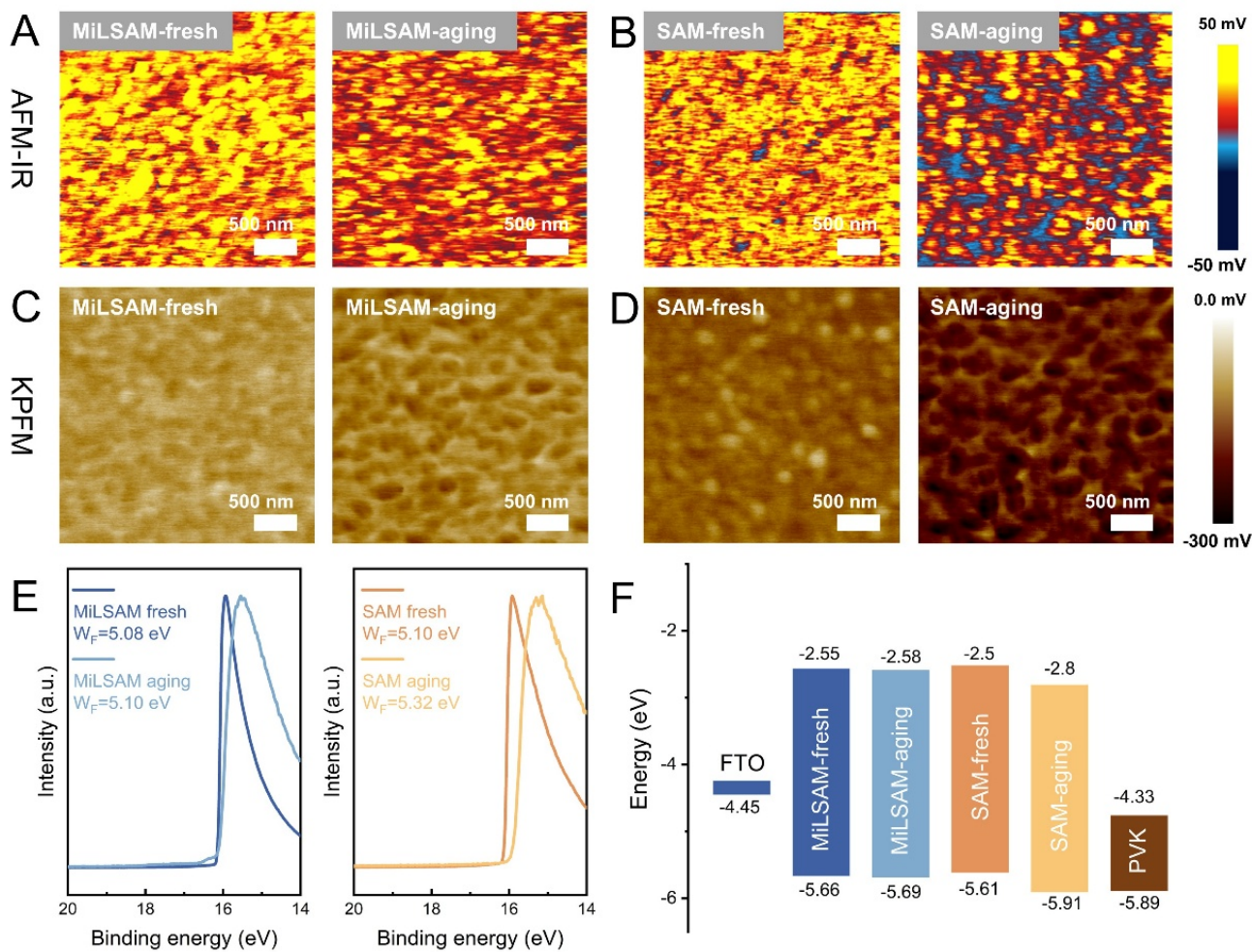


图2：MiLSAM的形貌以及功能稳定性分析。

通过分析老化前后钙钛矿的埋底界面发现，MiLSAM层的构建可以有效减少钙钛矿埋底界面在光热老化过程中的降解与不利的相变，有效抑制了埋底界面孔洞的生成。这可以归因于MiLSAM稳定的结构与表面电势，有效抑制了界面电荷积累与不良接触，进而提升钙钛矿薄膜及器件整体的稳定性。

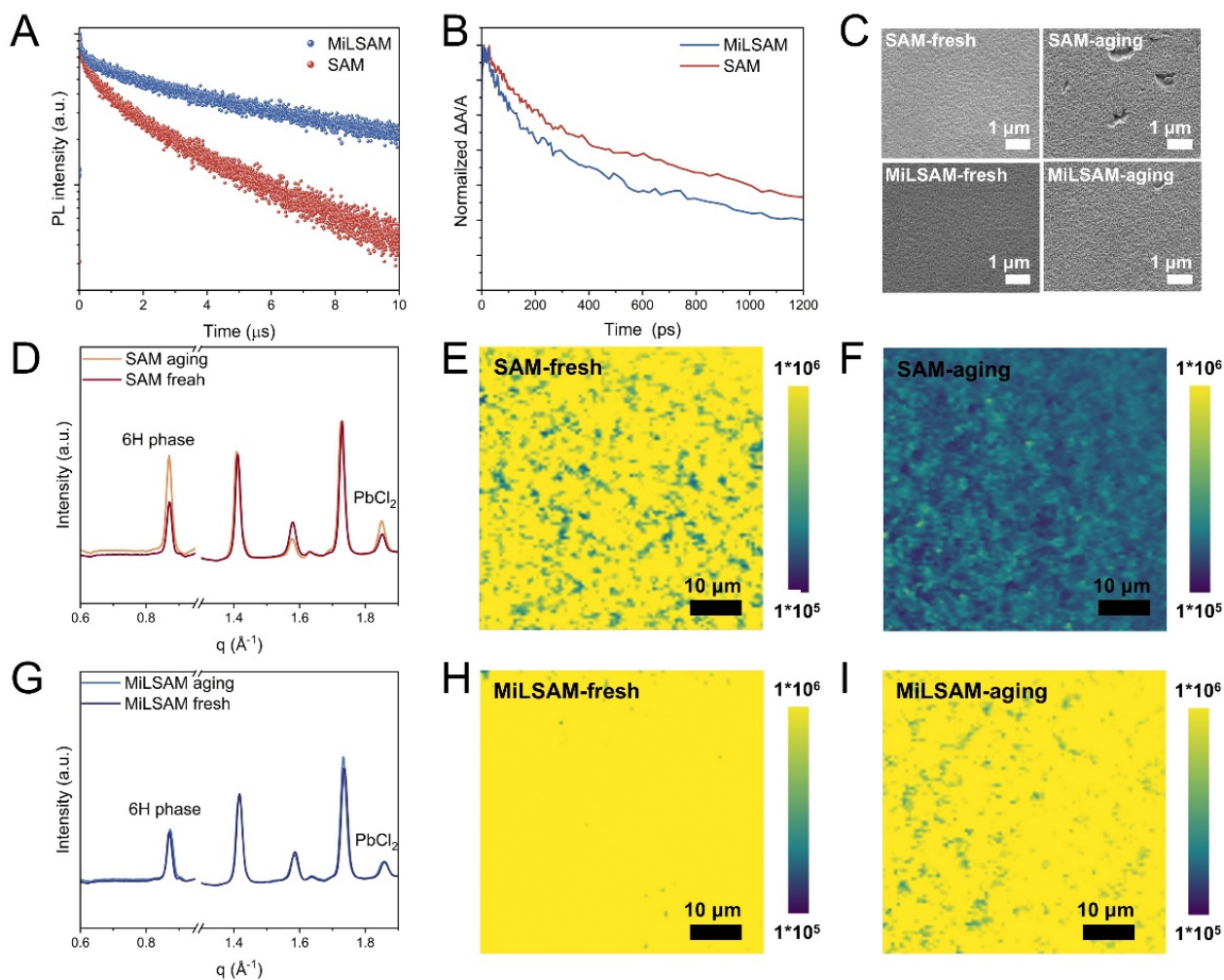


图3：钙钛矿埋底界面稳定性分析。

基于该策略制备的反式小面积器件实现了最高26.7%的光电转换效率，面积为1cm<sup>2</sup>的器件光电转换效率达25.75%。与此同时，MiLSAM基器件表现出优异的热稳定性，在符合ISOS-L-3协议的加速老化条件下测试1000 h后仍能保持初始效率的近90%。

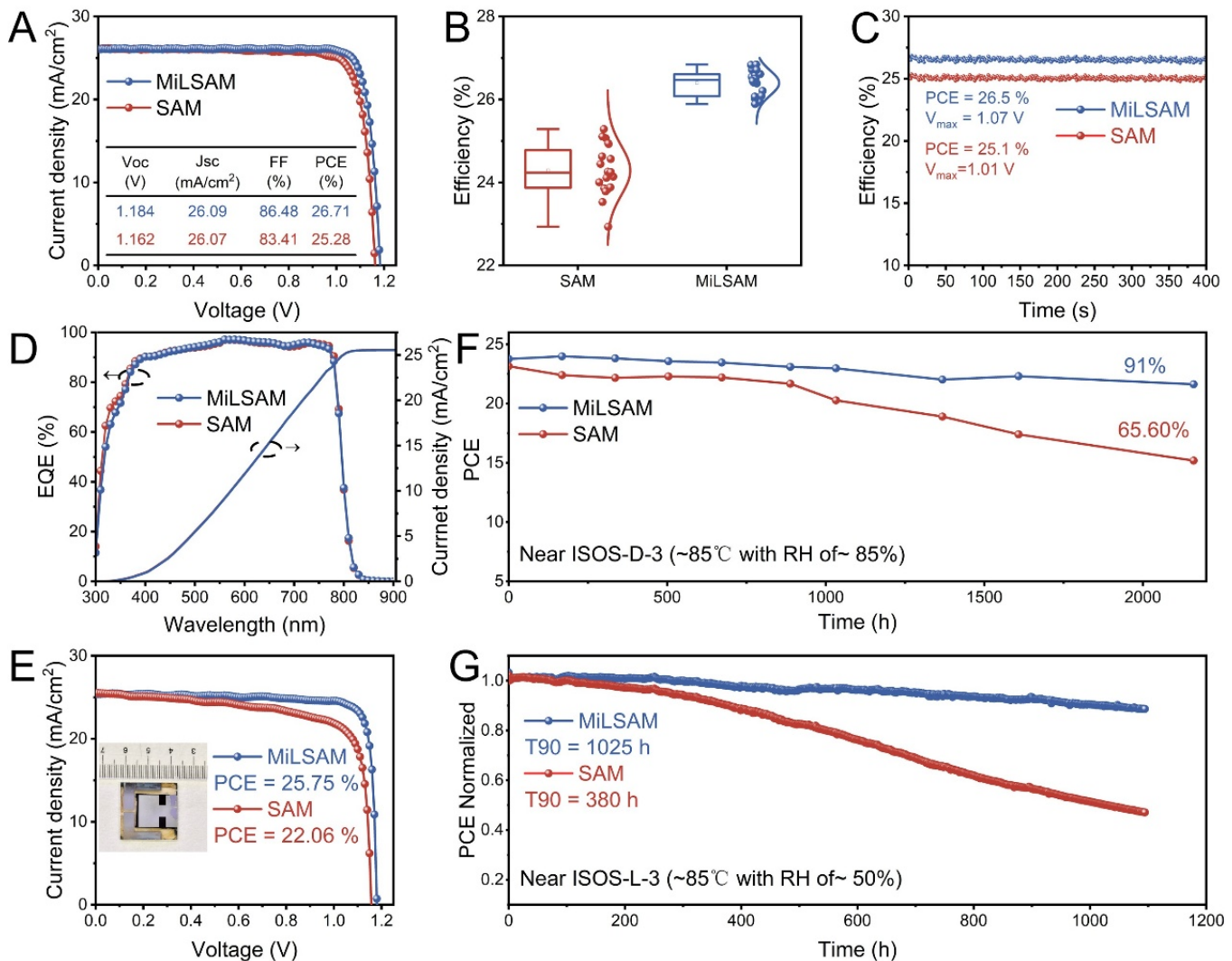


图4：器件光电性能与稳定性。

该研究构建了一种新型的金属离子交联的自组装分子空穴传输层，发现其界面稳定性在延长器件使用寿命中的关键作用，为构建高效稳定的钙钛矿光伏器件提供了一条极具应用前景的新途径。（来源：科学网）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1016/j.chempr.2026.102965>

作者：宁志军等来源：《化学》

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