

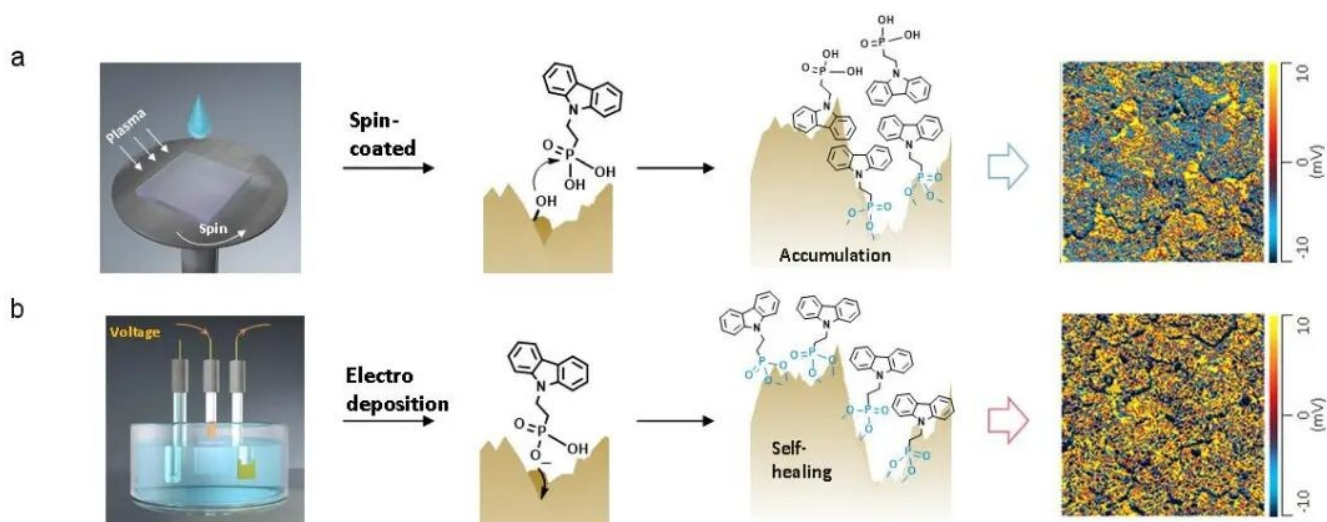
科学家在自组装分子界面层可控构筑方面取得突破

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/40658.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！

科学家在自组装分子界面层可控构筑方面取得突破。华南理工大学材料科学与工程学院研究员应磊、教授李宁团队，针对传统溶液法（旋涂、浸泡、刮涂等）制备自组装分子（SAMs）界面层时存在的覆盖不均、锚定不牢及功能调控受限等瓶颈，创新性地提出电沉积自组装策略，为倒置钙钛矿太阳能电池的高效化与稳定化提供了全新的界面构筑平台。7月2日，相关成果发表于《自然》。



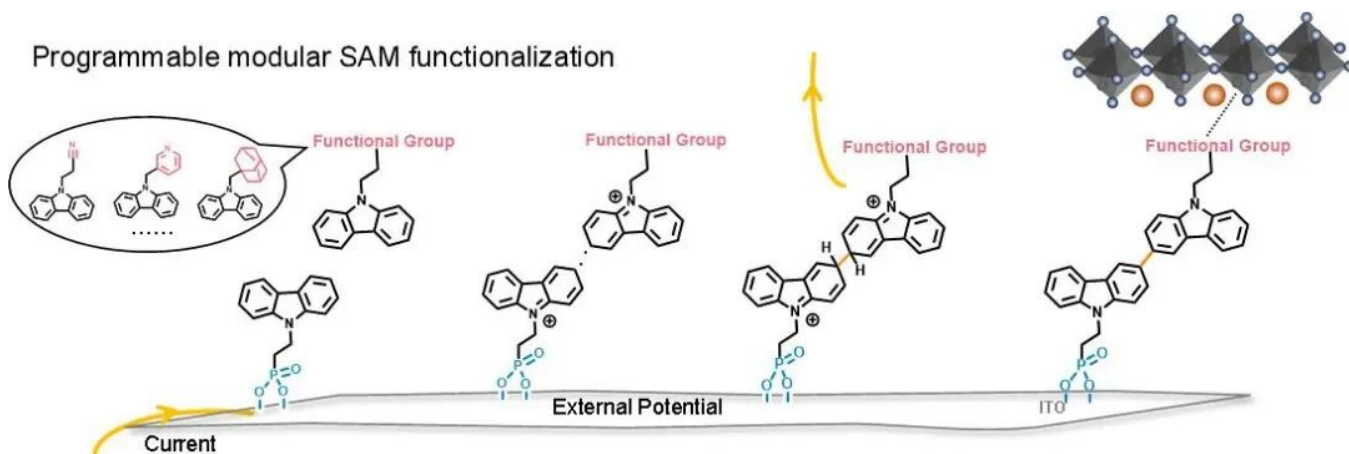
旋涂法和电沉积法制备自组装分子示意图。研究团队供图，下同

在倒置钙钛矿太阳能电池中，位于透明电极（ITO）与钙钛矿吸光层之间的SAMs超薄界面层（厚度约单分子层）直接影响电荷提取、钙钛矿薄膜结晶质量及器件长期稳定性。传统溶液法依赖分子扩散与物理吸附，易受ITO表面纳米级粗糙度影响，导致局部团聚或覆盖缺陷；同时，分子层内结合较弱的组分在器件运行中可能脱附或迁移，制约了大面积组件的均匀性与可靠性。

针对上述问题，研究团队引入周期性变化电化学电位，引导SAMs分子在ITO表面持续调整构象、填补空位并实现再锚定。还原电位促进分子中磷酸基团的去质子化，增强其与ITO表面活性位点的相互作用；循环电位则为分子重排提供驱动力，使初始覆盖不足的区域逐步得到修复，最终形成更均匀、致密且稳定的电极界面。

为阐明界面成键机制，团队采用 ^{18}O 同位素示踪技术追踪界面化学键中氧原子的来源。结果表明

，旋涂样品主要呈现ITO表面羟基参与的脱水缩合特征，而电沉积样品则保留了更多来自分子自身的18O，证明去质子化磷酸根参与界面结合的贡献显著增加。这表明电沉积提供了一条对ITO表面羟基依赖较低、更为高效的互补锚定路径，有效增加了锚定位点密度并提升了分子层稳定性。



电沉积提供模块化构筑平台示意图。

在获得均匀稳定的基础SAM层后，研究团队进一步通过电化学氧化偶联引入不同功能单元：氰基可改善钙钛矿前驱液润湿性，吡啶基团增强埋底界面缺陷钝化，金刚烷基团则可调控钙钛矿成核与结晶过程。该策略使电沉积不再局限于分子层制备方法，而升级为可按需集成多种功能模块的通用界面构筑平台。

得益于更均匀的界面覆盖、更牢固的分子锚定及针对性的功能协同，器件电荷提取效率显著提升，界面复合与传输损耗得到有效抑制。基于此策略，小面积倒置钙钛矿太阳能电池实现了26.8%的光电转换效率，面积为65平方厘米的光伏模组效率达21.3%。同时，器件在光照、高温、高湿及反向偏压等严苛老化条件下均展现出优异的长期稳定性。

该研究将电沉积调控的自组装分子形成过程与后续功能化模块设计有机结合，为高效稳定钙钛矿光伏器件的分子界面工程及可扩展制造开辟了新的技术路径。（来源：中国科学报 朱汉斌）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41586-026-10844-6>

作者：应磊等 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