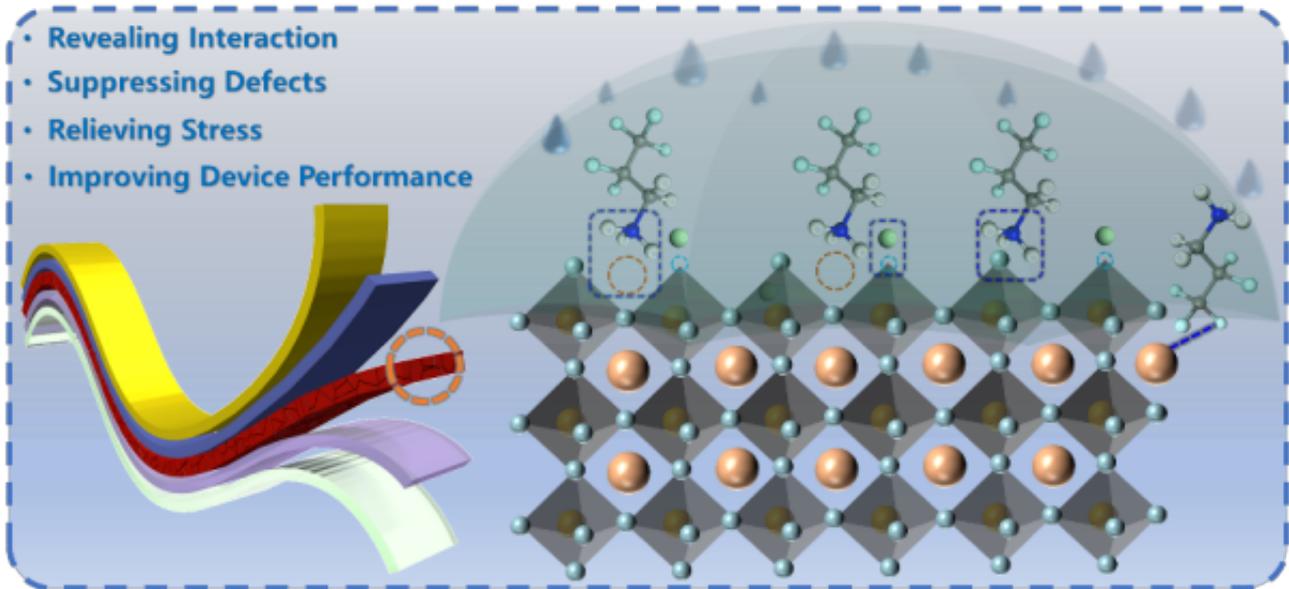


广州能源所等在缺陷钝化机制与柔性钙钛矿太阳能电池研究中获进展



柔性钙钛矿太阳能电池器件结构示意图及PFPACI钝化钙钛矿缺陷机理图

近日，中国科学院广州能源研究所联合俄罗斯科学院化学物理和药物化学问题研究中心、哈尔滨工业大学郑州研究院和美国路易斯安那理工大学微制造研究所等，在界面缺陷钝化机制与柔性钙钛矿太阳能电池研究方面取得进展。

钙钛矿表面和晶界处的陷阱状态是柔性钙钛矿太阳能电池（FPSC）进一步商业化的主要障碍之一。该研究将两种新颖的多功能氟化丙胺盐2,2,3,3,3-五氟丙胺盐酸盐（PFPACI）和3,3,3-三氟丙胺盐酸盐（TFPACI）原位引入光吸收层，以钝化钙钛矿表面和晶界缺陷，并提高FPSCs的性能。核磁共振结果验证了PFPACI和TFPACI与钙钛矿前驱体成分的强相互作用，该研究在二维核磁共振数据中推导出上述两种添加剂与碘化甲脒形成的超分子配合物结构，提出了钝化剂分子在钙钛矿成膜之前与其预先组织形成氢键的重要性。实验和密度泛函理论计算表明，由于氟烷基较高的电负性，PFPACI可能更倾向于解离为R-NH₃⁺-Cl⁻的形式。因此，2,2,3,3,3-五氟丙胺盐与甲脒空位缺陷的结合强于其与3,3,3-三氟丙胺盐的结合，同时阴离子Cl⁻与碘化甲脒空位缺陷及FPSCs中未配位的铅离子之间具有足够强的相互作用，导致PFPACI可以均匀覆盖于钙钛矿薄膜的整个表面，并更有效地与空穴传输层能级匹配。研究发现，经PFPACI原位修饰的FPSCs实现23.59%的光电转换效率，在1000小时后仍保有89.8%的初始效率，表现出优异的运行稳定性。

相关研究成果发表在《先进功能材料》（Advanced Functional Materials）上，并已申请国家发明专利。研究工作得到科学技术部和中国科学院的支持。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/211879.html>