

学院文化

当前位置: 首页 > 学院文化 > 学院新闻

学院新闻

教工之家

原创天地

中瑞科学家联合研究, 成功破解钙钛矿稳定性国际难题, 成果荣登《Science》杂志

发布时间: 2020-10-02

近日, 复旦大学信息科学与工程学院詹义强、郑立荣和瑞士洛桑联邦理工大学 (EPFL) Anders Hagfeldt, Michael Graetzel团队合作, 成功通过一种气相辅助生长方法实现了室温稳定的 α -FAPbI₃ (黑相甲脒铅碘) 钙钛矿材料, 并且制备出了光电转换效率大于23%的高效稳定太阳能电池。该项突破为钙钛矿材料在高效轻质光伏电池、新型LED和其它光电器件系统等应用奠定了基础, 对太阳能清洁能源的泛在利用、新型柔性大面积光电器件与系统、以及智能机器人自主供电等具有重要意义。10月2日, 相关研究成果以“Vapor-assisted deposition of highly efficient, stable black-phase FAPbI₃ perovskite solar cells”为题为于《科学》(Science) 杂志在线发表 (<https://doi.org/10.1126/science.abb8985>)。联合团队经过两年多的紧密合作和努力, 从实验设计、分子动力学模拟、到无数次实验试验和改进、多次补充实验并验证, 最终取得突破。即使在疫情形势最为严峻的时段也没有停止工作。论文第一作者卢海洲2017-2019年为复旦大学信息学院博士后, 现为EPFL博士后。詹义强和郑立荣为论文的共同通讯作者。该项工作得到了高峰学科-上海智能电子与系统研究院, 博士后科学基金, 国家自然科学基金(61774046) 和中国博士后国际交流引进计划的资助。



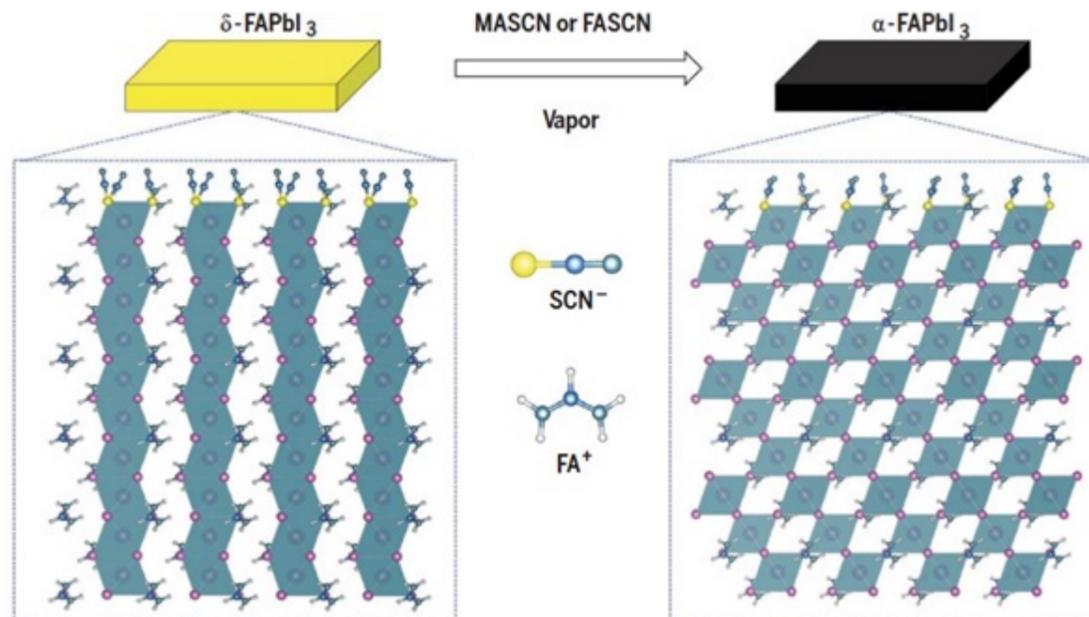


图1. 有机气相辅助沉积技术分子动力学过程：（左） δ 相FAPbI₃面共享八面体结构（右） α 相FAPbI₃角共享八面体结构

气相辅助生长，破解相稳定性难题

金属卤化物钙钛矿因其卓越的光电性能和低温制备工艺得到了广泛的关注，并被研制成太阳能光伏电池、发光二极管（LED）、激光器和光电探测器等。在过去的10年内，基于钙钛矿的太阳能电池，其功率转换效率也从起初的3.8%上升到近来的20%以上。

但是，此类材料的最大缺点就是热稳定性差，严重制约了其实际应用。其中甲脒铅碘钙钛矿(FAPbI₃)因其良好的热稳定性和接近理想带隙等特点而备受瞩目，被视为最有潜力走向实用的材料之一。然而研究发现 FAPbI₃在室温下会从光活性的黑相(α 相)转变成非光活性的黄相(δ 相)，进而造成材料降解及电池性能衰减。虽然通过掺杂混合等可以得到室温稳定的 α -FAPbI₃薄膜，但是在实际工作条件下会带来相分离以及吸收谱蓝移等问题。因此，如何获得稳定的纯 α -FAPbI₃薄膜成为了钙钛矿太阳能电池研究领域的国际难题。合作团队深入研究FAPbI₃的相变机理，创新性地开发了MASCN（硫氰酸甲基铵）气相辅助生长技术。基于此项技术，能够在较低退火温度下（100° C）成功将FAPbI₃从 δ 相完全转化为 α 相，并保持长期稳定。

合作团队借助分子动力学模拟，首次厘清了SCN⁻离子的作用机制：SCN⁻离子优先吸附于 δ 相FAPbI₃表面，由于Pb²⁺与S之间的强亲和力作用，SCN⁻离子取代了与Pb²⁺成键的I⁻离子，将 δ 相FAPbI₃面共享八面体结构的顶层瓦解，并过渡到 α 相FAPbI₃的角共享结构。顶层结构的转变形成模板化效应，自上而下，将 δ 相FAPbI₃完全转化为 α 相FAPbI₃。由于表面SCN⁻离子跟Pb²⁺之间的强亲和力作用，形成了稳定的表面结构，约束了体 α 相FAPbI₃。在500小时、85° C的加热老化实验测试中，该 α -FAPbI₃薄膜保持零衰减，呈现出卓越的热稳定性。

低温制备工艺，促进柔性大面积泛在应用

合作团队低温制备的FAPbI₃钙钛矿太阳能电池的效率超过23%，并在最大功率点追踪500小时后，依然保持原有性能的90%以上，体现了其超高工作状态稳定性。此外，复旦团队采用全低温制备工艺近期还成功在PET基材上制备了效率高达20%的柔性太阳



能电池，使得未来太阳能泛在利用成为可能，例如可以与建筑物、汽车车身等一体化集成，实现无处不在的太阳能清洁高效利用，与飞艇囊体和智能昆虫翅膀等柔性集成，实现飞行器和柔性智能机器人等的轻质高效自主供电。此外，实验测量表明，除了卓越的光伏性能，该材料也可以在低至0.75V的开启电压下实现电致发光，在未来大面积柔性显示、照明和可穿戴电子等领域也具有应用潜力。

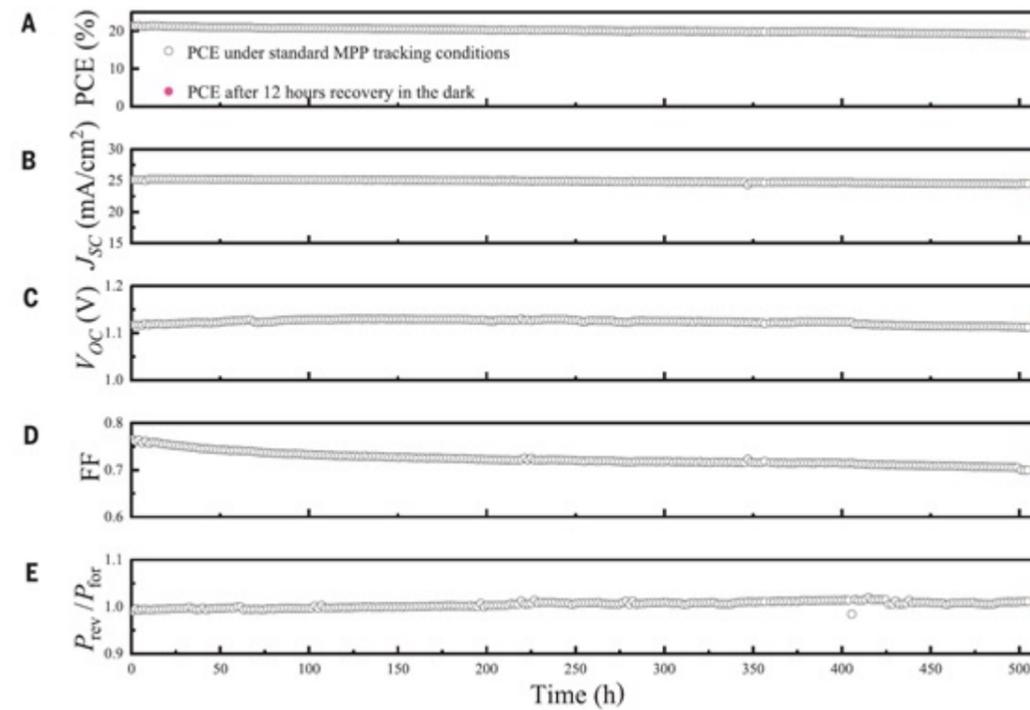


图2. 气相辅助沉积FAPbI₃电池工作条件500小时稳定性研究：（A）能量转换效率（B）短路电流（C）开路电压（D）填充因子（E）正反扫功率比值

论文链接: <https://science.sciencemag.org/content/370/6512/eabb8985>

