

中国科学院物理研究所 E02组供稿  
北京凝聚态物理国家研究中心

第24期

2022年04月01日

## CsPbI<sub>3</sub>全无机钙钛矿太阳能电池取得新进展

有机-无机杂化钙钛矿太阳能电池近年来取得了飞速发展，光电转换效率已经可以与单晶硅电池相媲美。以CsPbI<sub>3</sub>为代表的全无机钙钛矿具有出色的光、热稳定性，且其~1.7 eV带隙是钙钛矿/硅叠层太阳能电池顶电池的理想选择，CsPbI<sub>3</sub>全无机钙钛矿太阳能电池已经成为新的研究热点而备受关注。尽管如此，CsPbI<sub>3</sub>钙钛矿吸收层存在缺陷密度相对较高，非辐射电荷复合较严重等问题，导致电池开路电压损失较大，电池效率偏低。改善CsPbI<sub>3</sub>多晶薄膜质量、降低缺陷密度及提高相稳定性，对于进一步提高CsPbI<sub>3</sub>电池效率和稳定性具有重要意义。

近年来，中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心孟庆波团队发展了一系列体相及界面调控方法，在高质量全无机钙钛矿薄膜、电池效率和稳定性提升方面开展了系统研究。例如，基于溶剂工程成功制备了稳定的全无机CsPb(Br, I)<sub>3</sub>钙钛矿太阳能电池 (J. Mater. Chem. A, 2018, 6, 19810)；利用卤化铵配位调控中间相及CsPbI<sub>3</sub>结晶过程，获得了高填充因子及18.71%光电转换效率 (Adv. Funct. Mater., 2021, 31, 2010813)；发展了硫脲/硫氰酸铵低温熔盐调控策略，利用熔盐中SCN<sup>-</sup>离子与Pb<sup>2+</sup>配位调控CsPbI<sub>3</sub>晶体生长，获得高质量CsPbI<sub>3</sub>薄膜和20.1%的光电转化效率 (Angew. Chem. Int. Ed., 2021, 60, 36)；利用锗掺杂策略，通过原位生成GeO<sub>2</sub>薄层钝化晶界和CsPbI<sub>3</sub>钙钛矿薄膜缺陷，显著提高CsPbI<sub>3</sub>薄膜和器件的湿度稳定性，在稳定光照和恒定偏压下连续工作3000小时电池性能几乎不衰减 (Adv. Energy Mater., 2022, 2103690)。

最近，该团队发现苯基三甲基季铵阳离子(PTA<sup>+</sup>)对称性高且分子间作用力较弱，既有较好的热稳定性，还具有很好的疏水性能。PTA<sup>+</sup>在钙钛矿退火过程中能够稳定存在并与PbI<sub>2</sub>作用，在CsPbI<sub>3</sub>钙钛矿晶界和表面原位形成宽带隙低维钙钛矿 (1D PTA-PbI<sub>3</sub>和2D PTA<sub>2</sub>PbI<sub>4</sub>)，这种低维钙钛矿能够有效钝化CsPbI<sub>3</sub>薄膜的晶界和表面缺陷，抑制非辐射复合，从而降低开压损耗。同时，疏水的低维钙钛矿能够减缓湿度对黑相CsPbI<sub>3</sub>的侵蚀，从而提高黑相CsPbI<sub>3</sub>的相稳定性。基于上述高热稳定性的低维钙钛矿钝化策略，CsPbI<sub>3</sub>无机钙钛矿太阳能电池效率达到21%，认证效率超过20%。这是迄今为止报道的CsPbI<sub>3</sub>钙钛矿太阳能电池最高效率。此外，上述器件还具有出色的工作稳定性和湿度稳定性。此工作为进一步提升CsPbI<sub>3</sub>相关光电器件性能及其在叠层电池方面应用具有一定的参考价值。

该研究成果以“Temperature-Reliable Low-Dimensional Perovskites Passivated Black-phase CsPbI<sub>3</sub> toward Stable and Efficient Photovoltaics”为题发表在Angewandte Chemie International Edition上 (DOI: 10.1002/anie.202201300)。中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心清洁能源实验室E02组博士研究生谭善为该论文的第一作者，物理所李冬梅研究员和孟庆波研究员为该论文的通讯作者。本研究得到了国家自然科学基金委 (11874402, 51872321, 52072402和51627803) 和科技部 (2018YFB1500101) 的支持。

文章链接: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/anie.202201300>

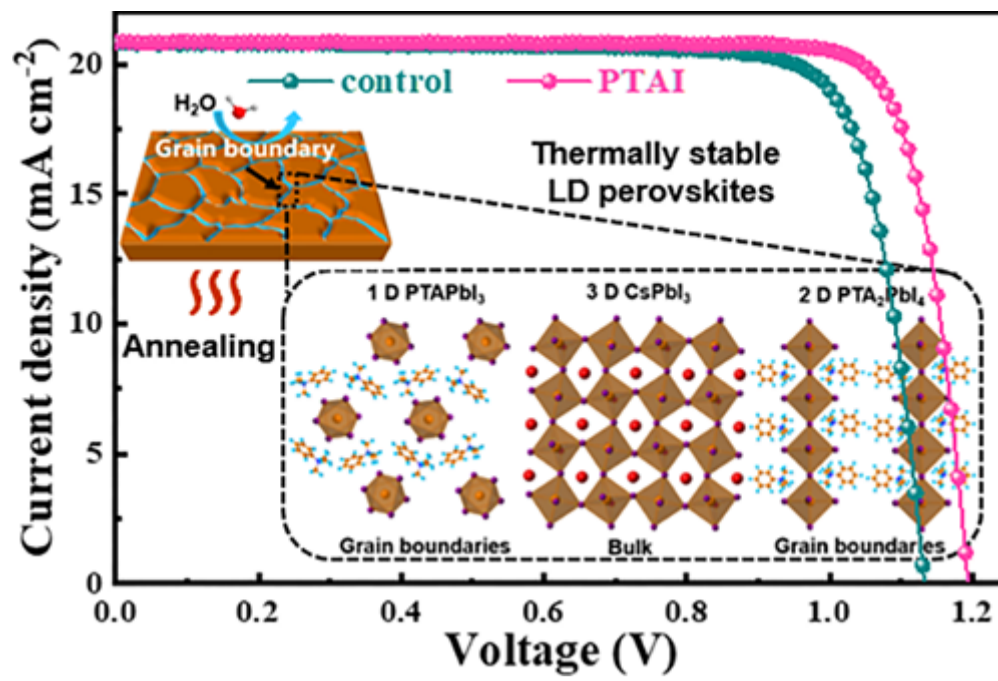


图1. 基于PTAI低维钙钛矿钝化策略所制备的CsPbI<sub>3</sub>钙钛矿电池的J-V特性曲线及低维钙钛矿在CsPbI<sub>3</sub>晶界处分布示意图。

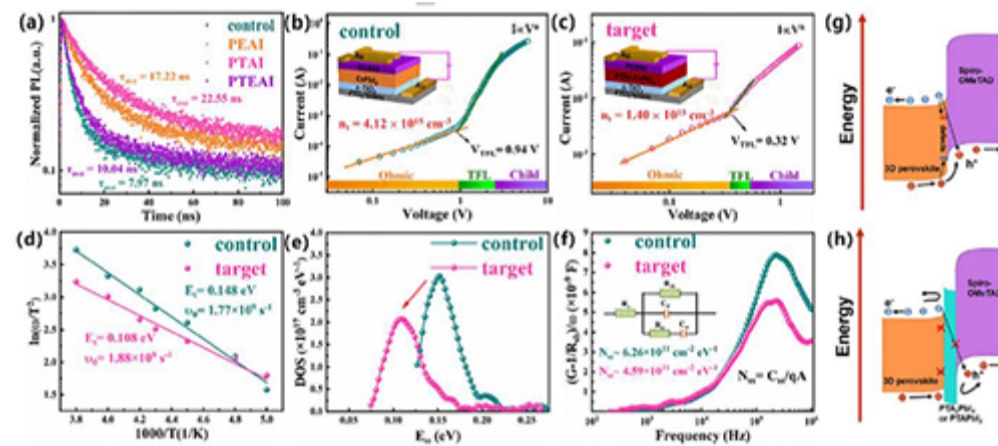


图2. 太阳能电池性能表征：(a) 基于不同有机阳离子所制备CsPbI<sub>3</sub>薄膜的瞬态荧光光谱 (TRPL)；暗态空间电荷限制电流 (SCLC)：(b) 对比组和(c) 实验组；基于导纳光谱推出 (d) 阿伦尼乌斯关系，用于计算缺陷能级和特征转换频率，(e) 缺陷态密度分布，(f) 界面缺陷；CsPbI<sub>3</sub>/spiro-OMeTAD界面复合的示意图：(g) 对比组和 (h) 实验组。

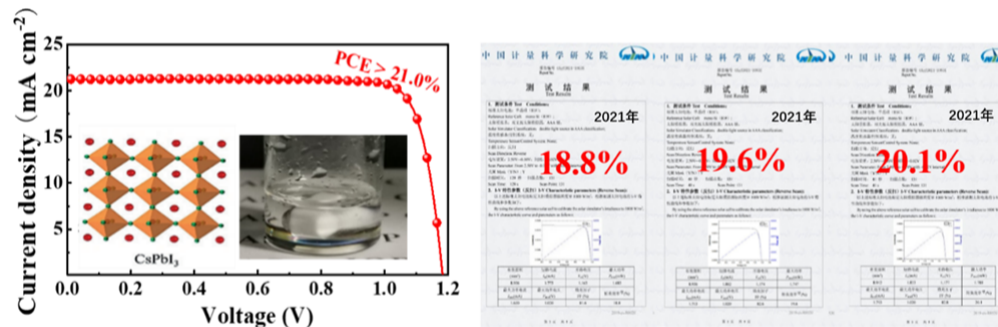


图3. 全无机电池连续认证效率