



2'-羟基苯乙酮二步钝化钙钛矿缺陷

陈俊杰^a, 宋立新^b, 熊杰^b

(浙江理工大学, a. 材料科学与工程学院; b. 纺织科学与工程学院(国际丝绸学院), 杭州 310018)

摘要: 为钝化钙钛矿缺陷, 采用 2'-羟基苯乙酮(2-HA)以添加剂和表面改性剂的形式对钙钛矿薄膜进行二次处理, 分析其对钙钛矿薄膜形貌、结构和性能的影响。结果表明: 2-HA 分子的羰基可以与钙钛矿中失配的铅离子形成配位键, 从而钝化钙钛矿薄膜晶界处和表面的缺陷。2-HA 作为添加剂可促进钙钛矿结晶, 使得薄膜质量提升, 提升了薄膜光吸收能力。同时, 采用 2-HA 表面处理钙钛矿薄膜, 可进一步减少了薄膜表面的缺陷。此外, 位于钙钛矿表面的苯环增强了对空气水分的抵抗能力。因此, 经过 2-HA 钝化作用的钙钛矿薄膜在开放空气环境中可制备高效的太阳能电池, 光电转化效率达到 17.69%, 且长期稳定性得到提高。该研究为钙钛矿太阳能电池的商业化提供了一种简便的策略。

关键词: 2'-羟基苯乙酮; 钙钛矿; 太阳能电池; 缺陷钝化; 表面改性

中图分类号: TM914.4

文献标志码: A

文章编号: 1673-3851 (2022) 03-0195-08

Passivation of perovskite defects by 2'-hydroxyacetophenone in two steps

CHEN Junjie^a, SONG Lixin^b, XIONG Jie^b

(a. School of Materials Science & Engineering; b. College of Textile Science and Engineering (International Institute of Silk), Zhejiang Sci-Tech University, Hangzhou 310018, China)

Abstract: In order to passivate perovskite defects, perovskite films were treated twice using 2'-hydroxyacetophenone (2-HA) in the form of additive and surface modifier, and their effects on the morphology, structure and properties of perovskite films were analyzed. The results show that the carbonyl group of 2-HA molecules can form coordination bonds with mismatched lead ions in perovskite, thereby passivating the defects at the grain boundaries and surfaces of perovskite films. As an additive, 2-HA can promote the crystallization of perovskite, enhance the quality of films and improve the light absorption capacity of films. At the same time, the surface defects of perovskite films can be further reduced through surface treatment with 2-HA. In addition, the benzene ring on the surface of perovskite can improve resistance to air moisture. Therefore, the perovskite films passivated by 2-HA can be used to prepare efficient solar cells in open air environments. The photoelectric conversion efficiency can reach 17.69%, and the long-term stability is improved. This study provides a simple and convenient strategy for the commercialization of perovskite solar cells.

Key words: 2'-hydroxyacetophenone; perovskite; solar cell; defect passivation; surface modification

收稿日期: 2021-03-10 网络出版日期: 2021-05-18

基金项目: 浙江省自然科学基金项目 (LQ19E030020)

作者简介: 陈俊杰 (1993-), 男, 上海人, 硕士研究生, 主要从事钙钛矿太阳能电池方面的研究。

通信作者: 熊杰, E-mail: jxiong@zstu.edu.cn

0 引言

近年来,由于有机卤化物钙钛矿材料具有较强的光吸收能力、优异的载流子迁移率、长扩散长度和较低的制造成本,钙钛矿太阳能电池(Perovskite solar cell, PSC)吸引了众多科研工作者的关注^[1-2]。在短短数年内,PSC的光电转化效率(Power conversion efficiency, PCE)已从3.8%提高到了25.5%^[3-4]。多晶钙钛矿薄膜的表面和晶界处存在着大量的缺陷,尤其是形成能较低的碘空位,会导致大量铅离子失配,进而成为光生载流子的非辐射复合中心,降低了电池器件的工作效率^[5]。此外,由于碘空位的迁移能较低,在电池器件的工作条件下容易发生迁移,不利于电池器件长期工作^[6]。空气中的水分也会从钙钛矿薄膜表面的碘空位进入钙钛矿,使钙钛矿薄膜发生降解^[7]。因此,通过对钙钛矿薄膜进行缺陷钝化来提高电池器件性能是非常有必要的。

科研工作者们已研发了数种降低钙钛矿薄膜缺陷态的方法,包括溶剂退火、添加剂工程和表面改性^[8-11],其中,通过添加剂来钝化钙钛矿缺陷,较为简单、普遍且有效^[12]。当添加剂进入钙钛矿后,添加剂便可充当电子受体或施主,进而中和带电点缺陷。Li等^[13]通过在钙钛矿内引入氟化钠,由于氟离子与铅离子形成离子键填补了碘空位,降低了缺陷态。此外,钙钛矿添加剂也可以作为钙钛矿结晶的形核点,从而改善薄膜的质量。Zhang等^[14]在钙钛矿前驱体中添加赖氨酸,赖氨酸作为钙钛矿形核点从而使钙钛矿的晶粒尺寸提升。然而,添加剂的过量使用会导致形核点过多使得晶粒尺寸降低。晶粒尺寸的减少使得晶界数量上升,意味着薄膜缺陷重新增多。因此,由于添加剂的使用量受到限制,钙钛矿薄膜制备完毕后,晶体表面处依然存在着数量可观的缺陷态。因此,为进一步钝化钙钛矿薄膜缺陷需要对钙钛矿进行二次处理。

本文将2'-羟基苯乙酮(2-Hydroxy acetophenone, 2-HA)依次以添加剂和表面改性剂的形式参与钙钛矿薄膜的制备过程,通过二次处理来制备一种低缺陷态和一定抗湿性的钙钛矿薄膜,对其表面形貌、化学组成、结晶性等性能等进行表征,并在空气环境中制备了钙钛矿太阳能电池,以分析二次处理对电池性能的影响。

1 实验部分

1.1 实验原料与试剂

N,N-二甲基甲酰胺(DMF,化学纯)和二甲基

亚砷(DMSO,化学纯)购自杭州高精细化工有限公司;碘化铅(PbI_2 , 99.98%)和甲基碘化铵(MAI, 99.98%)购自昆山桑莱特新能源科技有限公司;二氧化锡溶胶(SnO_2 , 15%)购自阿法埃莎(中国)化学有限公司;四[N,N-二(4-甲氧基苯基)氨基]螺二茚(spiro-MeOTAD)和苯基- C_{61} -丁酸甲酯(PCBM)购自西安宝莱特光电科技有限公司;无水乙醇($\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$,化学纯)购自天津市科密欧化学试剂;丙酮($\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$,分析纯)和三氯甲烷(CHCl_3 ,分析纯)购自杭州双林化工试剂有限公司;2'-羟基苯乙酮(2-Hydroxy acetophenone, 2-HA)和氯苯($\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}$,化学纯)购自阿拉丁试剂(上海)有限公司;去离子水为实验室自制。

1.2 实验方法

1.2.1 钙钛矿薄膜衬底的制备

用丙酮和乙醇依次超声清洗氧化铟锡玻璃基板,各20 min,用紫外光-臭氧处理ITO玻璃15 min,去除有机残留物。将质量分数为15% SnO_2 溶胶用去离子水稀释到3%。将稀释后的溶胶以转速4000 r/min下旋涂到ITO玻璃上,过程为30 s,然后在150 °C下退火30 min,制备 SnO_2 基底。

1.2.2 钙钛矿薄膜的制备

首先,将461.00 mg PbI_2 、159.00 mg MAI溶解在645 μL 的DMF和DMSO混合溶剂中获得钙钛矿前驱体溶液。将上述溶液制备两份,其中一份加入0.10 mg 2-HA。将两份溶液在60 °C下搅拌1 h。然后将两种钙钛矿前驱体溶液以2000 r/min旋转涂覆在 SnO_2 层上,10 s后转速提升至4000 r/min,此过程持续25 s。在这过程结束前15 s,将三氯甲烷动态旋涂到样品上,作为样品制备过程中的抗溶剂。旋涂完毕后,将样品在100 °C的加热板上热退火30 min,制备方法如图1所示。退火完毕后,获得两组钙钛矿薄膜,记作PVK和PVK+2-HA。将PVK+2-HA再分为两组,其中一组薄膜以3000 r/min旋涂上0.05 mg/mL 2-HA三氯甲烷溶液,后以80 °C退火5 min,进行二步钝化。最后获得三组样品,记做PVK、PVK+2-HA和PVK+2-HA/2-HA。

1.2.3 PSC和纯电子结构器件的组装

将每组钙钛矿薄膜各自分为两组,一组用于组装电池,另一组则用于制备纯电子器件。太阳能电池组装流程为:将65 mg/mL的spiro氯苯溶液以4000 r/min旋涂至薄膜表面,然后利用真空镀膜仪蒸镀厚度为80 nm的金属银作为电极,电池结构为

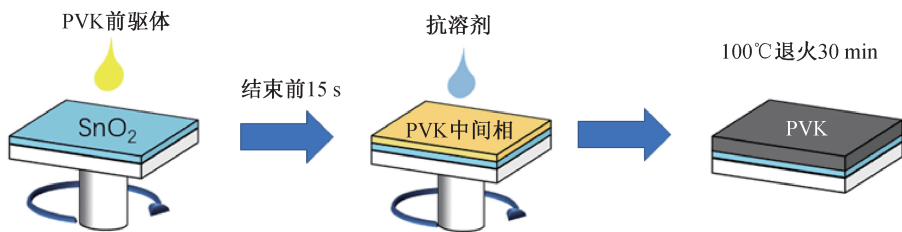


图 1 钙钛矿薄膜抗溶剂法制备示意图

ITO/SnO₂/PVK/spiro-MeOTAD/Ag。电池用以测量 2-HA。纯电子结构器件(钙钛矿层上下都是电子传输层)组装方法为:将 20 mg/mL 的 PCBM 氯苯溶液以 2000 r/min 旋涂在薄膜表面,然后利用真空镀膜仪蒸镀厚度为 80 nm 的金属银作为电极,纯电子结构器件为 ITO/SnO₂/PVK/PCBM/Ag,电池器件的有效面积为 0.06 cm²。

1.3 测试与表征

1.3.1 钙钛矿薄膜的性能测试

用扫描电子显微镜(Vltra55,德国 Carl Zeiss 半导体公司)观察和记录薄膜的形貌;用 X 射线衍射仪(美国 Thermo Fisher Scientific 公司)分析薄膜的结晶情况,扫描范围为 $2\theta = 10.0^\circ \sim 50.0^\circ$,扫描速度为 $5^\circ/\text{min}$,使用 Cu 靶为放射源;用 X 射线光电能谱仪(K-Alpha 美国 Thermo Fisher Scientific 公司)分析薄膜内 Pb 和 I 元素的化学环境,来检验 2-HA 与钙钛矿薄膜之间的作用;使用紫外-可见分光光度计(UV-Vis, 上海美谱达仪器有限公司)测定薄膜的吸收光谱,来检验 2-HA 对薄膜对可见光吸收能力的影响;使用光致发光光谱仪(PG2000-Pro-EX, 上海理想光学有限公司)记录薄膜瞬态光致发光(PL),测量不同钙钛矿薄膜之间的荧光能力;用动态/静态接触角仪器(JCY 系列,上海方瑞仪器有限公司)测量薄膜表面的水接触角,判断薄膜的抗湿能力(液滴为 2 μL)。

1.3.2 PSC 和纯电子器件的性能测试

对于纯电子结构器件,用数字源表(Keithley 2400-SCS,美国泰克公司)进行空间电荷模拟电流测量,测量其暗态 $J-V$ 特性。对于钙钛矿电池,电化学阻抗谱(EIS)由电化学工作站(ZYEARE PRO,上海辰华仪器有限公司)获得。将电池器件置于一个标准模拟太阳光(AM 1.5G, 100 mW/cm²)下照射,并用数字源表(Keithley 2400-SCS,美国泰克公司)测试电池器件的电流密度和电压($J-V$)特性。

2 结果与讨论

2.1 2-HA 的钝化机理分析

2'-羟基苯乙酮分子钝化钙钛矿缺陷示意如图 2 所示。2-HA 分子由羟基、羰基、亚甲基和苯环组成,其 3D 分子结构示意图如图 2 中右上角所示。图 2 表明:当 2-HA 分子以一次处理(添加剂)和二次处理(表面改性剂)的形式引入钙钛矿材料时,化学性质活泼的羟基可以与晶体表面的 I 生成氢键,使 2-HA 分子结合在钙钛矿薄膜的晶界和表面处。在原本 2-HA 分子内部的氢键平衡被打破的情况下,羰基可以与失配 Pb²⁺ 或其他带正电荷的缺陷结合,生成配位键,钝化了带电缺陷^[15]。其中,2-HA 对钙钛矿薄膜的一次处理与二次处理的原理是相同的,二次处理进一步减少了薄膜表面的缺陷态。此外,薄膜表面的苯环可抵抗空气中水分对钙钛矿的侵蚀,有利于提升电池器件的光电转化效率与长期稳定性。

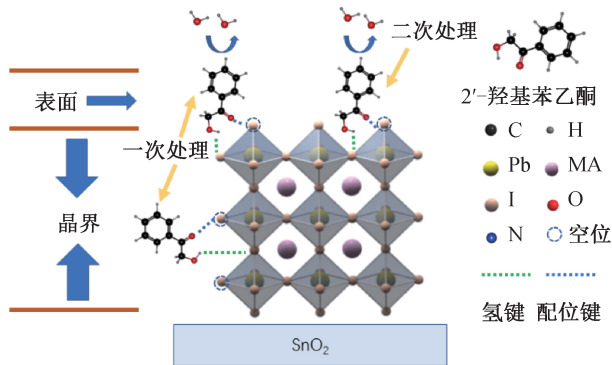


图 2 2'-羟基苯乙酮分子钝化钙钛矿缺陷示意

为了验证 2-HA 是否可以与钙钛矿材料生成配位键,进而钝化钙钛矿的缺陷,使用 XPS 能谱研究了 2-HA 与钙钛矿之间的相互作用。图 3 为 PVK 和 PVK+2-HA 的 XPS 能谱。从图 3(a)中可以看出,添加 2-HA 后,钙钛矿的 XPS 全谱图上没有明显的变化,说明 2-HA 的引入,没有明显改变钙钛矿的元素组成。图 3(b)是钙钛矿的 O 1s 光谱,因为钙钛矿薄膜是在开放空气环境下制备,钙钛矿吸附空气中

的氧,其中 PVK 膜在 532.17 eV 处的峰对应晶体表面吸附氧的峰,而 2-HA 引入后,PVK+2-HA 膜在 532.77 eV 处存在一个峰位,且峰宽明显变宽。O 1s 峰位的变化和峰宽的增加是因为除了晶体表面的吸附氧,钙钛矿内出现了属于羟基与羰基的氧元素,表明 2-HA 成功进入了钙钛矿薄膜。图 3(c)是钙钛矿薄膜的 I 3d 光谱,图 3(c)中可以看出,引入 2-HA 后 I

元素的结合能增强了 0.31 eV,这是因为 2-HA 的羟基与钙钛矿的 I⁻ 生成了氢键,I 元素给氢键提供了电子,使得核外电子云密度下降,使得原子核对剩余电子的束缚能增强,因此,I 元素的结合能增强。Pb 元素结合能也增强了(见图 3(d)),表明 Pb²⁺ 与羰基形成了配位键,提供了电子,2-HA 分子可以钙钛矿材料生成配位键,钝化带电缺陷。

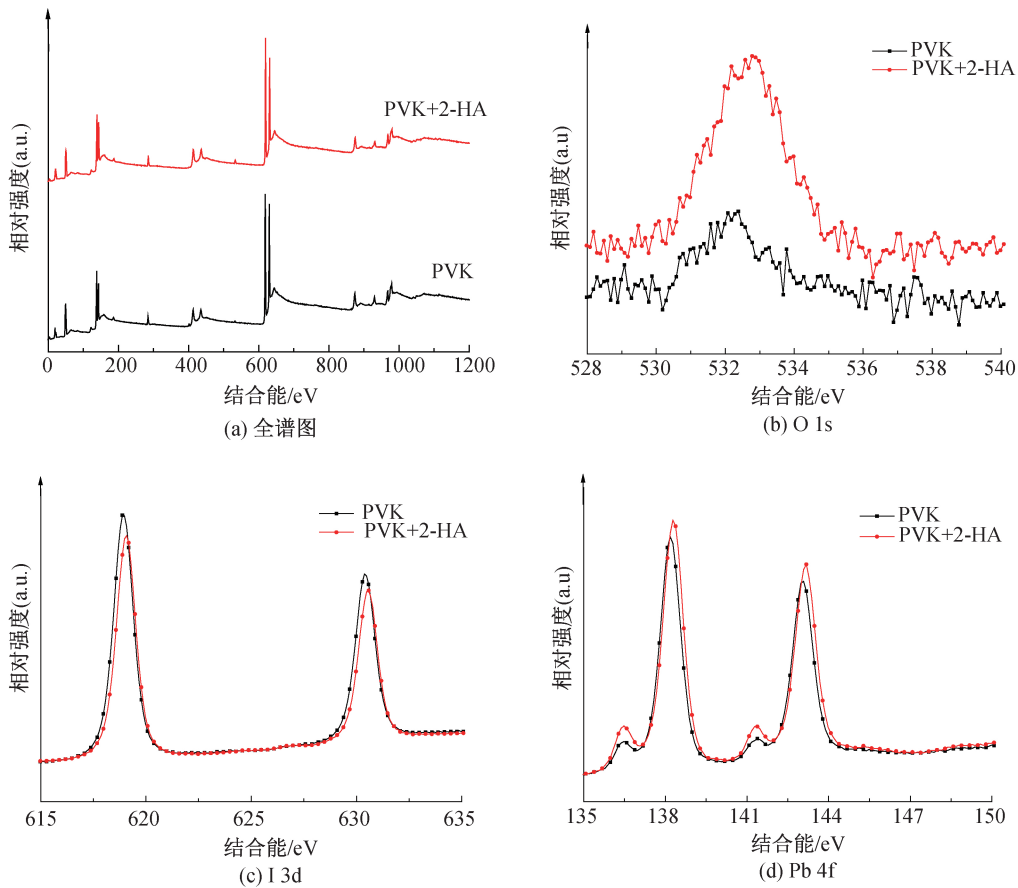


图 3 含有或无 2-HA 钙钛矿薄膜的 XPS 谱图

2.2 钙钛矿薄膜形貌分析

图 4 是 PVK、PVK + 2-HA 和 PVK + 2-HA/2-HA 薄膜的俯视 SEM 图。图 4 表明,PVK 膜表面的一些区域存在着缝隙较大的晶界和孔洞,这是薄膜形成时因为钙钛矿非均匀形核导致的结果;PVK +

2-HA 和 PVK + 2-HA/2-HA 薄膜都表现出良好的表面覆盖和致密性,这是 2-HA 分子使钙钛矿均匀形核的缘故^[16];而 PVK + 2-HA 薄膜和 PVK + 2-HA/2-HA 薄膜之间几乎没有差异,则说明通过 2-HA 表面改性钙钛矿薄膜没有对薄膜形貌产生明显影响。

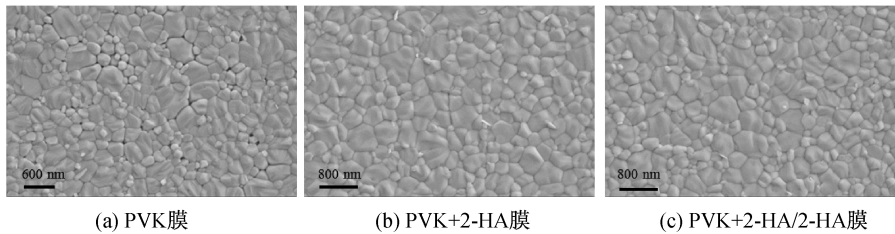
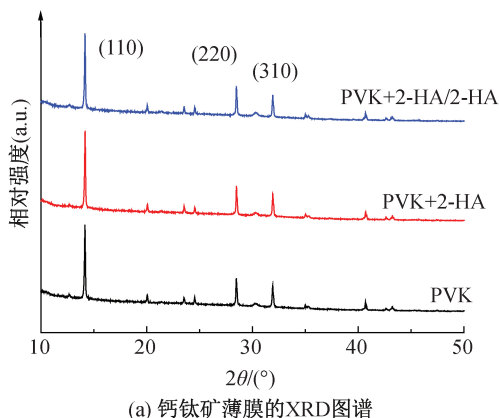


图 4 钙钛矿薄膜的 SEM 图

为了揭示一次处理和二次处理对钙钛矿晶体结构情况的影响,对钙钛矿薄膜进行了 XRD 测试,结

果如图 5(a)所示。由图 5(a)可知,所有的样品都描绘了相似的特征峰,表明钙钛矿晶体结构的主峰位

于 13.92° 、 28.27° 和 31.67° , 分别对应于 (110)、(220) 和 (310) 晶面。对比 PVK 和 PVK+2-HA 谱线, 谱线中的峰没有明显升高或者降低, 所以加入 2-HA 不会影响钙钛矿的结晶度。并且, 谱线的峰位没有明显的左右偏移, 说明以添加剂形式引入的 2-HA 分子只是在钙钛矿薄膜的晶界和表面处存在, 没有进入钙钛矿晶格引起晶格的膨胀或者收缩。对比 PVK+2-HA 和 PVK+2-HA/2-HA 的 XRD 谱线可以得知当使用 2-HA 二次处理钙钛矿时, 即



使在 80°C 下加热 5 min 后, 也没有形成新相。为了分析钙钛矿薄膜光学性能的变化, 对钙钛矿薄膜进行了 UV-Vis 分析, 结果如图 5(b) 所示。5(b) 表明, 经过 2-HA 一次处理和二次处理后, 薄膜光吸收强度会增加。因为与 PVK 薄膜相比, PVK+2-HA 和 PVK+2-HA/2-HA 薄膜的覆盖率更高, 没有孔隙^[10]。而 2-HA 二次处理钙钛矿薄膜没有对薄膜的形貌以及相成分造成影响, 所以 PVK+2-HA 和 PVK+2-HA/2-HA 薄膜的吸光度没有明显差异。

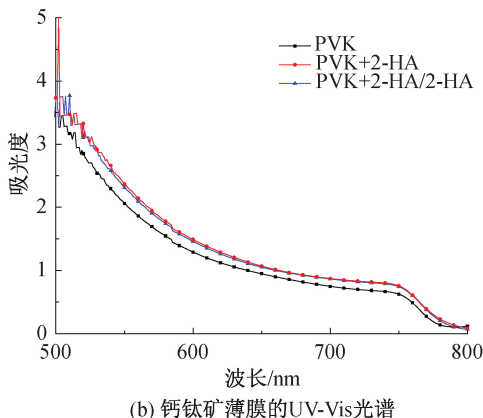


图 5 钙钛矿薄膜的 XRD 图谱和 UV-Vis 光谱

2.3 钙钛矿薄膜内部缺陷态分析

为了分析 2-HA 钝化导致的薄膜缺陷态的变化, 用 PL 光谱表征了制备的所有钙钛矿薄膜。在钙钛矿薄膜进行 PL 测试时, 钙钛矿在受到光照时会产生光生载流子。在 PL 测试中, 对于未建立电池回路的钙钛矿层, 薄膜产生的载流子无法被传输从而发生载流子复合。当 PL 信号强度越高时, 薄膜内缺陷态越少, 非辐射性复合受到了抑制, 即载流子复合以可产生荧光的辐射性复合为主。因此, 对于钙钛矿薄膜, PL 强度越大, 薄膜带电缺陷越少。与 PVK 薄膜相比, 薄膜 PVK+2-HA 和 PVK+2-HA/2-HA 的光致发光峰强度较强, 如图 6(a) 所示。增强的 PL 峰说明, 钙钛矿薄膜的带电缺陷因为 2-HA 分子的钝化而减少。其中, PVK+2-HA/2-HA 的 PL 峰信号是样品组中最强的, 说明 2-HA 二次处理薄膜进一步减少了薄膜缺陷态。为了进一步估计钙钛矿层的缺陷密度, 对器件 ITO/SnO₂/PVK/PCBM/Ag 进行了空间电荷限制电流 (SCLC) 测量。当半导体材料中存在缺陷时, 对其注入的载流子会被缺陷态中。注入载流子的密度会随着施加电压的增加而增大, 越来越多的缺陷态会被载流子填充; 使所有缺陷态被载流子填充的电压称为陷阱填充极限电压 (V_{TFL})。在 SCLC 模型中, V_{TFL} 的

测量是获得钙钛矿材料缺陷密度粗略估计的常见而简单的方法之一。图 6(b) 为纯电子结构器件的暗态 J - V 谱线图, V_{TFL} 可以从曲线拐点的横坐标得到。从图 6(b) 中可以观察到, 薄膜经过 2-HA 两次处理后, V_{TFL} 逐步降低, 依次为 0.85、0.44 V 和 0.33 V。陷阱态密度 N_{trap} 计算^[17] 如式(1)所示:

$$N_{\text{trap}} = \frac{2\epsilon_0\epsilon_r V_{\text{TFL}}}{qL^2} \quad (1)$$

其中: ϵ_0 代表真空介电常数; ϵ_r 代表钙钛矿相对介电常数; V_{TFL} 代表陷阱填充极限电压; q 代表电子电荷; L 代表钙钛矿薄膜的厚度。

根据式(1)可计算得到, PVK+2-HA 薄膜和 PVK+2-HA/2-HA 薄膜的缺陷态密度是 PVK 薄膜的 48% 和 38%。所以, 2-HA 成功减少了钙钛矿的缺陷态, 这可以使 PSC 获得了更高的开路电压 (V_{OC}) 和填充因子 (FF)。

2.4 钙钛矿太阳能电池相关性能分析

为了分析 2-HA 钝化钙钛矿对 PSC 器件的影响, 将上述钙钛矿薄膜在空气中组装成了电池器件。图 7(a) 为电池器件的薄膜电化学阻抗 (EIS) 图谱, 图中的插图为等效电路图, R_s 为内部串联电阻, R_{rec} 是电子-空穴复合电阻, 详细的 EIS 参数在表 1 中列出。随着 2-HA 对钙钛矿的两次处理的进行, R_{rec} 逐

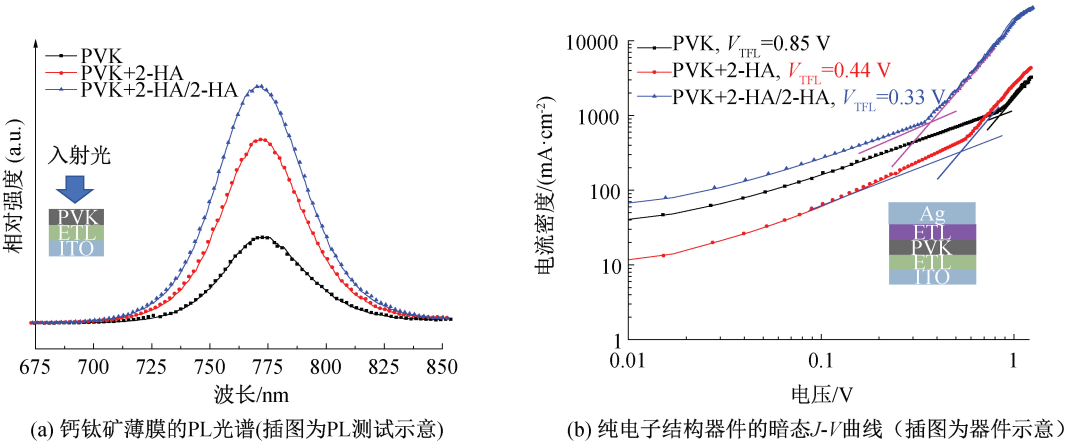


图6 钛矿薄膜的 PL 光谱和 SCLC 图谱

步增加,分别为 11873.02、17811.36 Ω 和 22194.84 Ω 。这因为缺陷钝化使钙钛矿内缺陷态减少,载流子难以在电池回路内发生非辐射复合,所以 R_{rec} 增加。同时, R_{s} 下降,分别为 55.98、41.69 Ω 和 42.60 Ω ,这是因为经过 2-HA 处理的钙钛矿薄膜覆盖率更高,更利于界面电荷传输。所以,2-HA 二次处理钙钛矿薄膜可以有效提升电池器件内部的电荷传输。图 7(b) 为 PSC 器件的 J - V 曲线,光伏参数在表 1 所示。原始器件的光电转化效率为 12.90% ($J_{\text{sc}} = 21.06 \text{ mA/cm}^2$ 、 $V_{\text{oc}} = 0.96 \text{ V}$ 、 $FF =$

63.80%)。当 2-HA 一次处理钙钛矿薄膜后,器件的光电转化效率提高到 15.96% ($J_{\text{sc}} = 21.75 \text{ mA/cm}^2$ 、 $V_{\text{oc}} = 1.04 \text{ V}$ 、 $FF = 70.56\%$)。当钙钛矿薄膜经过 2-HA 二次处理后,器件的光电转化效率再次提升 17.69% ($J_{\text{sc}} = 23.07 \text{ mA/cm}^2$ 、 $V_{\text{oc}} = 1.07 \text{ V}$ 、 $FF = 71.66\%$)。根据对钙钛矿薄膜的分析,电流,电压和填充因子的增加可以归因于薄膜缺陷态的减少和薄膜质量的提高。所以,使用 2-HA 二次处理钙钛矿薄膜可以提高 PSC 的光电转化效率。

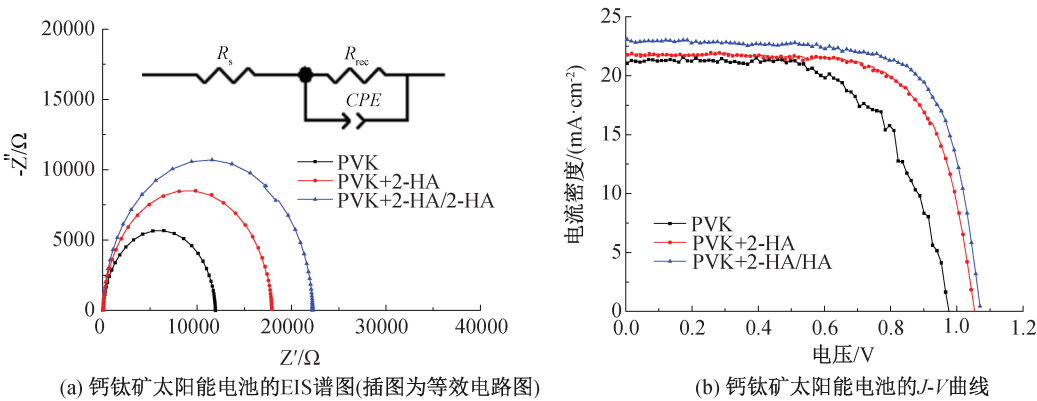


图7 钙钛矿太阳能电池的 EIS 谱图和 J - V 曲线图

表 1 钙钛矿太阳能电池的光伏参数

样品	$J_{\text{sc}}/(\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2})$	V_{oc}/V	$FF/\%$	$PCE/\%$	R_{s}/Ω	R_{rec}/Ω
PVK	21.06	0.96	63.80	12.90	55.98	11873.02
PVK+2-HA	21.75	1.04	70.56	15.96	41.69	17811.36
PVK+2-HA/2-HA	23.07	1.07	71.66	17.69	42.60	22194.84

2.5 钙钛矿太阳能电池稳定性能分析

图 8 为三种薄膜的水接触角数码照片。未经过 2-HA 处理的薄膜水接触角为 38.1°(见图 8(a)),经过 2-HA 一次处理的薄膜的水接触角增加至 42.8°(见图 8(b)),而经过 2-HA 二次处理的薄

膜的水接触角增加至 58.6°(见图 8(c))。根据 2-HA 分子钝化钙钛矿缺陷的原理,经过 2-HA 处理的钙钛矿薄膜表面存在疏水苯环,使薄膜对水分有一定抵抗的能力,对电池器件的稳定性是有利的。

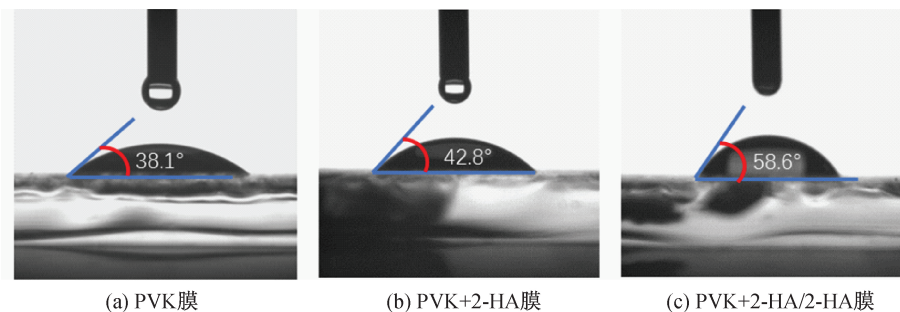


图 8 钙钛矿薄膜的水接触角

将电池器件放置于空气(25 °C, 相对湿度约 50%)中 100 h, 在这期间追踪了电池器件光电效率变化趋势, 钙钛矿太阳能电池的光电转化效率随时间的变化趋势图如图 9 所示。图 9 表明, 经过二步处理的电池在 100 h 后依旧可以保持 79.1% 的初始光电效率, 而原始器件在 20 h 后便迅速衰弱; 表明 2-HA 通过钝化钙钛矿薄膜缺陷和提升薄膜抗湿性使电池的长期稳定性获得了提升。

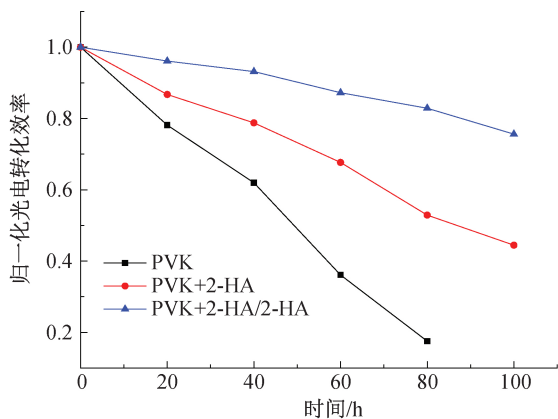


图 9 钙钛矿太阳能电池光电转换效率随时间的变化趋势图

图 10 是三种钙钛矿薄膜放置于空气中 100 h 后钙钛矿薄膜的 XRD 图谱。图 10 表明, 经过 100 h 时效后, 未经过 2-HA 处理的钙钛矿薄膜内出现了大量的 PbI_2 相; 经过 2-HA 一次处理的钙钛矿薄膜, 出现了 PbI_2 相, 但薄膜内依然存在着可观的钙钛矿相, PbI_2 相的占比也有所下降, 其原因可能是钙钛矿晶粒表面存在的 2-HA 分子填补了碘空位, 减缓了水分降解钙钛矿; 经过 2-HA 二次处理的钙钛矿薄膜, 其薄膜表面的疏水苯环的数量增多, 因此在 100 h 后二次处理得薄膜降解程度较低。

3 结 论

本文使用 2-HA 对钙钛矿薄膜二次处理来钝化钙钛矿薄膜的缺陷, 分析了 2-HA 对钙钛矿太阳能电池性能的影响, 获得以下主要结果:

a) 2-HA 分子的羰基填补了钙钛矿晶界的碘空

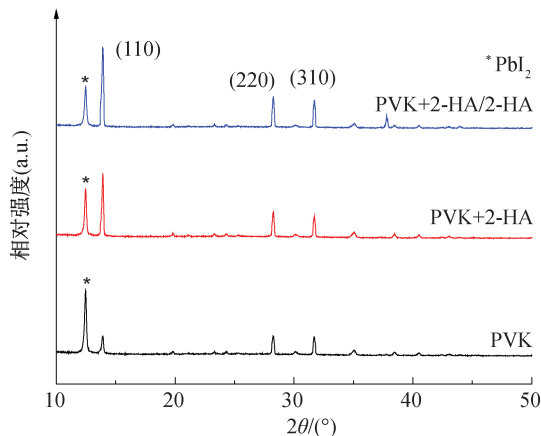


图 10 100 h 时效后的钙钛矿薄膜的 XRD 图谱

位, 降低了薄膜缺陷态密度, 抑制光生载流子发生非辐射复合, 提升了太阳能电池的光电转化效率。

b) 2-HA 分子促进钙钛矿结晶进而减少了钙钛矿薄膜表面的孔隙, 改善了钙钛矿薄膜的质量, 使薄膜的可见光吸收能力增强, 增强了电池光电流。

c) 2-HA 分子的疏水苯环使钙钛矿薄膜的抗湿能力增强, 进而提升了太阳能电池的长期稳定性, 在空气(25 °C, 相对湿度约 50%)中放置 100 h 后依旧可以保持 79.1% 的初始光电转化效率。

参考文献:

- [1] 赵一新, 韩宏伟. 金属卤化物钙钛矿光电材料和器件[J]. 物理化学学报, 2021, 37(4): 11-13.
- [2] 缪晔辰. 国内异质结钙钛矿太阳能电池研究现状[J]. 电子技术, 2021, 50(3): 8-11.
- [3] Batmunkh M, Zhong Y L, Zhao H J. Recent advances in perovskite-based building-integrated photovoltaics[J]. Advanced Materials, 2020, 32(31): 2000631.
- [4] Zhang S S, Liu Z H, Zhang W J, et al. Barrier designs in perovskite solar cells for long-term stability[J]. Advanced Energy Materials, 2020, 10(35): 2001610.
- [5] Liu N, Yam C Y. First-principles study of intrinsic defects in formamidinium lead triiodide perovskite solar cell absorbers[J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2021, 23(1): 1-10.

- 2018,20(10): 6800-6804.
- [6] Eames C, Frost J M, Barnes P, et al. Ionic transport in hybrid lead iodide perovskite solar cells[J]. Nature Communications,2015,6:7947.
- [7] Wang Y B, Wu T H, Barbaud J, et al. Stabilizing heterostructures of soft perovskite semiconductors[J]. Science, 2019, 365(6454):687-691.
- [8] Liu C F, Yuan J F, Masse R, et al. Interphases, interfaces, and surfaces of active materials in rechargeable batteries and perovskite solar cells[J/OL]. Advanced Materials, 2020 [2021-03-08]. <https://doi.org/10.1002/adma.201905245>.
- [9] Peng H, Cai M, Zhou J, et al. Structurally reinforced all-inorganic CsPbI₂Br perovskite by nonionic polymer via coordination and hydrogen bonds[J]. Solar RRL, 2020, 4(9): 2000216.
- [10] 李兴鳌, 刘维, 楚亮. 钙钛矿太阳能电池缺陷钝化的研究进展[J]. 南京邮电大学学报(自然科学版), 2021 (1):9-16.
- [11] Wu T H, Wang Y B, Li X, et al. Efficient defect passivation for perovskite solar cells by controlling the electron density distribution of donor- π -acceptor molecules[J]. Advanced Energy Materials, 2019, 9 (17): 1803766.
- [12] Du J H, Feng L P, Guo X, et al. Enhanced efficiency and stability of planar perovskite solar cells by introducing amino acid to SnO₂/perovskite interface [J]. Journal of Power Sources, 2020, 455:227974.
- [13] Li N X, Tao S X, Chen Y H, et al. Cation and anion immobilization through chemical bonding enhancement with fluorides for stable halide perovskite solar cells [J]. Nature Energy, 2019, 4(5):408-415.
- [14] Zhang W, Liu X J, He B L, et al. Enhanced efficiency of air-stable CsPbBr₃ perovskite solar cells by defect dual passivation and grain size enlargement with a multifunctional additive[J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2020, 12(32): 36092-36101.
- [15] Zhang L Q, Cao K, Qian J, et al. Crystallization control and multisite passivation of perovskites with amino acid to boost the efficiency and stability of perovskite solar cells [J]. Journal of Materials Chemistry C, 2020, 8(48):17482-17490.
- [16] Liu X P, Wu J H, Yang Y Q, et al. Additive engineering by bifunctional guanidine sulfamate for highly efficient and stable perovskites solar cells[J]. Small, 2020, 16(47): 2004877.
- [17] Jin S, Wei Y L, Rong B, et al. Improving perovskite solar cells photovoltaic performance using tetrabutylammonium salt as additive[J]. Journal of Power Sources, 2020, 450:227623.

(责任编辑:唐志荣)