

文章编号: 1000-7032(2024)08-1364-07

多功能乳酸钝化协助制备高效稳定的钙钛矿太阳能电池

侯 显^{1*}, 刘金龙¹, 许 鹤², 马洪振¹, 朱淑娟¹, 吴有智¹

(1. 兰州理工大学 材料科学与工程学院, 甘肃省新能源材料与器件技术创新中心, 甘肃 兰州 730050;

2. 济南新动能中小企业创新交流中心, 山东 济南 250000)

摘要: 空气环境中制备钙钛矿太阳能电池(PSCs)对于发展更高性价比的光伏器件具有重要意义。然而, 空气环境制备的钙钛矿层存在大量的阴阳离子缺陷, 严重影响器件性能。因此, 采用乳酸(OA)作为添加剂, 通过添加剂工程对混合阳离子钙钛矿薄膜缺陷进行有效调控。OA中的羧基能与钙钛矿中未配位的 Pb^{2+} 键合, 吡啶环上的含氮基团与未配位的 I^- 形成氢键, 在降低钙钛矿薄膜缺陷态密度的同时增大钙钛矿晶粒尺寸, 抑制载流子的非辐射复合。经OA钝化PSCs的光电转换效率(PCE)从19.89%提升到22.09%, 在空气环境中放置1 000 h还可保持93.85%的初始效率。

关键词: 钙钛矿太阳能电池; 乳酸; 缺陷钝化; 添加剂工程

中图分类号: TM914.4

文献标识码: A

DOI: 10.37188/CJL.20240114

Multifunctional Orotic Acid Passivation for Efficient and Stable Perovskite Solar Cells

HOU Xian^{1*}, LIU Jinlong¹, XU He², MA Hongzhen¹, ZHU Shujuan¹, WU Youzhi¹

(1. Gansu Provincial New Energy Materials and Devices Technology Innovation Center,

College of Materials Science and Engineering, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, China;

2. Jinan New Energy SME Innovation Exchange Center, Jinan 250000, China)

* Corresponding Author, E-mail: houx@lut.edu.cn

Abstract: It is great significance for the preparation of perovskite solar cells (PSCs) in the ambient air for its commercialization process. However, there are a lot of anion and cation defects appeared in perovskite film during the air environment prepare procedure, which seriously affects the device performance. Hence, orotic acid (OA) was used as additive to regulate the defects in mixed cation perovskite layer through additive engineering. The carboxyl group in OA can bond with the uncoordinated Pb^{2+} in the perovskite, and the nitrogen-containing group on the pyridine ring forms a hydrogen bond with the uncoordinated I^- , which can reduce the defect density and increase the grain size of the perovskite film, and inhibiting the non-radiative recombination of carriers. The photoelectric conversion efficiency (PCE) of PSCs passivated by OA increased from 19.89% to 22.09%, and which can keep 93.85% the initial PCE after 1 000 hours in the ambient air.

Key words: perovskite solar cells; orotic acid; defect passivation; additive engineering

1 引 言

有机无机杂化钙钛矿具有优异的光吸收性

能^[1]、理想的带隙宽度^[2]、可溶液法制备^[3]和成本较低^[4]等优势, 在光伏领域引起了广泛关注。然而, 基于溶液法制备的钙钛矿多晶薄膜存在较多缺

收稿日期: 2024-04-23; 修订日期: 2024-05-06

基金项目: 兰州理工大学红柳杰出青年人才支持项目(062210); 兰州理工大学博士科研启动基金(061806)

Supported by Hongliu Distinguished Young Talent Support Program Project of Lanzhou University of Technology (062210); Doctoral Scientific Research Foundation of Lanzhou University of Technology (061806)

陷,对钙钛矿太阳能电池(PSCs)器件的性能产生了严重的影响。这些缺陷根据能级状态分为浅层^[5]和深层^[6]两类。浅层缺陷位于导带底或价带顶边缘的位置,而深层缺陷处于带隙中间位置^[7]。浅层缺陷的离子特性使其在电场下通过薄膜迁移,带电缺陷则在钙钛矿界面和晶界处积累形成高电荷密度,从而导致激子发光猝灭。同时,离子迁移会改变钙钛矿晶体结构,影响电荷传输。深层缺陷会充当载流子陷阱和非辐射复合中心,导致载流子寿命下降^[8]。

Lewis酸/碱钝化是有效的减少缺陷的办法。Lewis酸可以通过配位键合或离子键合与钙钛矿中未配位的I⁻和PbI₃⁻形成路易斯加合物,Lewis碱则可以提供一对未配位电子与钙钛矿中未配位的Pb²⁺或Pb团簇配位,从而减少缺陷或陷阱,延长载流子寿命^[9]。通常,钝化剂中羧基官能团有利于缺陷钝化,其氢键能阻碍离子迁移,—C=O基则影响钙钛矿的结晶过程,有利于增大钙钛矿晶粒。此外,钝化剂中如果含氮官能团也有利于缺陷钝化,其通过氢键与I⁻结合,能够减缓钙钛矿晶体生长、引导晶体取向,并降低缺陷态密度和抑制I⁻迁移^[10]。

Fang等^[11]将5-氨基-2-氟苯甲酸氟化羧酸(5-AFA)引入钙钛矿前驱体溶液中,5-AFA中的羧基与未配位的Pb²⁺形成加合物,延缓了钙钛矿晶体生长,最终得到的高质量钙钛矿薄膜提高了PSCs的光电转换效率(PCE)和稳定性。含氮(如—NH₂)或氮官能团的Lewis碱也显示了对钙钛矿材料的有效钝化,通过形成加合物减少非辐射电荷复合,提高载流子寿命,提高PSCs的性能和稳定性。Peng等^[12]将2-脒基嘧啶盐酸盐(APC)引入钙钛矿中,通过嘧啶氮固定了未配位的Pb²⁺,同时通过与未配位的I⁻形成氢键,调节钙钛矿结晶并钝化缺陷,最终得到25.17% PCE长期稳定的PSCs。

本文将多功能有机物乳清酸(OA)引入(FAPbI₃)_{0.95}(MAPbBr₃)_{0.05}钙钛矿来钝化薄膜缺陷。OA中含氮官能团与钙钛矿中未配位的I⁻形成氢键,羧基与未配位的Pb²⁺结合,有效降低了薄膜缺陷态密度。在OA钝化作用下,PSCs的PCE由19.89%提升到22.09%,且在空气环境中放置1 000 h后仍能保持初始PCE的93.85%,展现出极强的稳定性。

2 实验

2.1 原料

ITO导电玻璃购自优选科技有限公司;甲基溴化铵(MABr)、甲基氯化铵(MACl)、甲脒氢碘酸盐(FAI)、碘化铅(PbI₂)、溴化铅(PbBr₂)、双三氟甲磺酰亚胺锂(Li-TFSI)、4-叔丁基吡啶(TBP)、2,2',7,7'-四[N,N-二(4-甲氧基苯基)氨基]-9,9'-螺二芴(Spiro-OMeTAD)和乙腈(ACN)购自西安浴日光能有限公司;氧化锡(SnO₂)胶体溶液由Alfa-Aesar公司获得;乳清酸(OA)购自麦克林公司;N,N-二甲基甲酰胺(DMF)、二甲基亚砜(DMSO)、氯苯(CB)、丙酮(CP)、异丙醇(IPA)和无水乙醇(EA)购自国药化学试剂有限公司。

2.2 器件制备

将ITO玻璃依次在CP、IPA、EA中超声清洗15 min,氮气吹干后紫外臭氧处理20 min。SnO₂前驱体溶液(体积分数15%的SnO₂胶体分散剂用去离子水稀释至3%)以3 000 r/min在ITO上旋涂30 s,随后150 ℃加热30 min,冷却后再紫外臭氧处理20 min。钙钛矿前驱体溶液(0.014 g MABr, 0.024 g MACl, 0.218 g FAI, 0.045 g PbBr₂, 0.643 g PbI₂)溶于800 μL DMF和200 μL DMSO获得对照器件钙钛矿前驱体溶液。此外,分别添加1 mmol/L、5 mmol/L和10 mmol/L OA得到不同浓度OA掺杂的钙钛矿前驱体溶液。将上述钙钛矿前驱液旋涂在SnO₂层上,转速4 000 r/min,时间30 s,并在第15 s时滴加反溶剂CB,旋涂结束后在150 ℃退火20 min形成钙钛矿层。随后,将Spiro-OMeTAD溶液(72.3 mg Spiro-OMeTAD、28.8 μL TBP和17.5 μL Li-TFSI的ACN溶液(520 mg/mL)溶于1 mL CB)以3 000 r/min的转速旋涂在钙钛矿层上。上述所有制备过程均在空气环境中完成。最后,真空蒸镀80 nm厚的银作为电极,完成器件的组装。

2.3 表征测试

用扫描电子显微镜(SEM, Zeiss Gemini 300)观察钙钛矿薄膜的表面形貌。紫外可见分光光度计(UV-vis, Lambda3)、X射线光电子光谱仪(XPS, D8-Advance)和傅里叶变换红外光谱仪(FTIR, FT-IR-670)分析钙钛矿薄膜的光吸收特性、电子状态以及结合键。使用爱丁堡FLS1000荧光光谱仪检测了光致发光(PL)和时间分辨光致发光(TRPL)光谱。使用上海胜焱电子科技有限公司的

太阳能电池测试系统(SS-X)和量子效率测试系统(QE-R)测试电池的光电特性及量子效率(EQE)。KS-CS300H电化学工作站用来测试器件的奈奎斯特曲线、莫特肖特基曲线和暗电流曲线。

3 结果与讨论

图 1(a)是 OA 的静电势图, $-\text{COOH}$ 中 O 区域表现出负电势, 而 $-\text{NH}$ 和 $-\text{COOH}$ 上的 H 区域表现出正电势, 它们很容易分别与少电子和富电

子的基团相互作用^[13]。图 1(b)、(c)分别是对照器件和 OA 钝化后钙钛矿薄膜的 SEM 图。相比于对照器件, 添加 5 mmol/L OA 后出现更大尺寸的晶粒, 且表面形貌更加平整。这可能与 OA 与钙钛矿晶粒相互作用减缓了钙钛矿晶粒的生长速度有关。图 1(d)、(e)分别是对照器件和 OA 钝化后器件的横截面 SEM 图。可以发现 OA 添加的钙钛矿层晶粒尺寸更大, 有利于载流子的纵向传输。

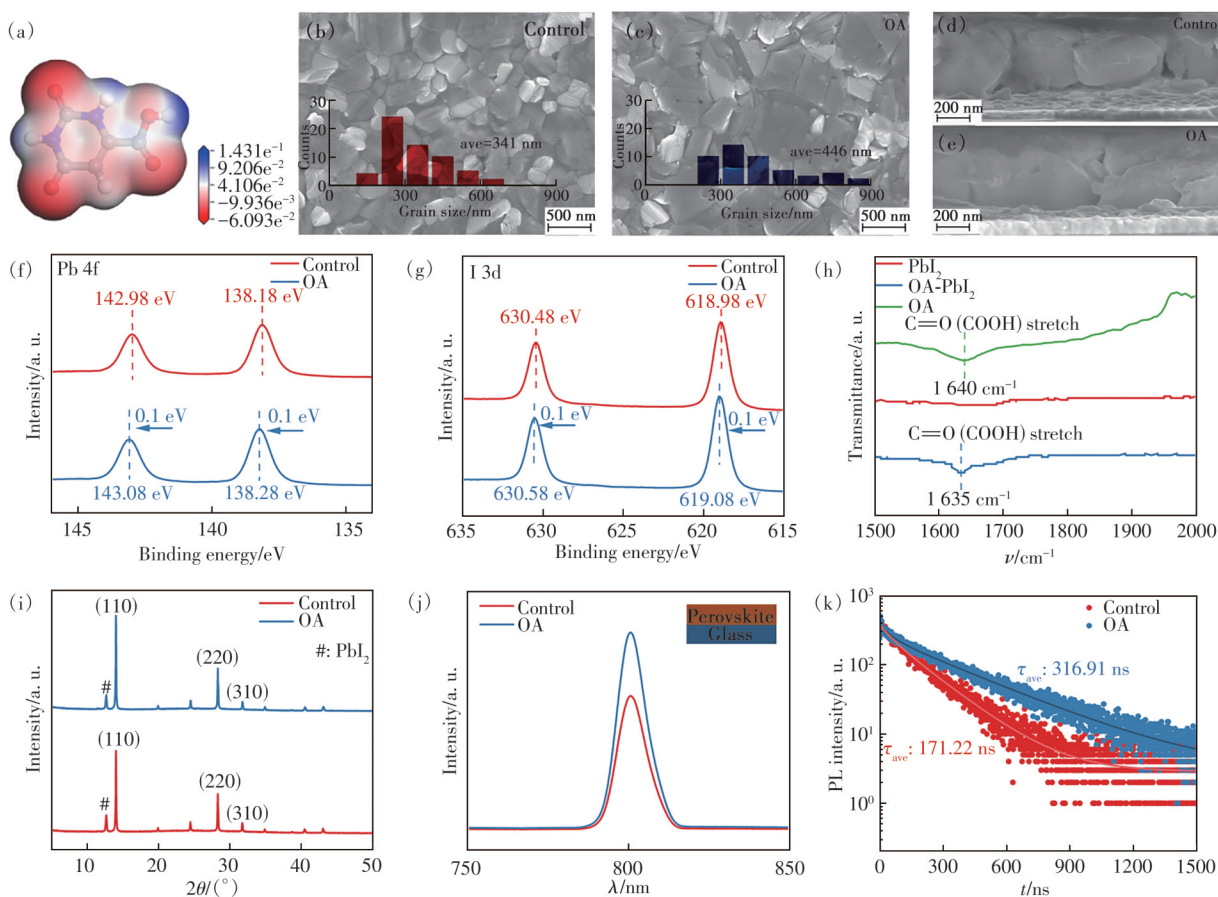


图 1 (a)OA 的静电势图;(b)~(c)对照器件和添加 OA 的钙钛矿薄膜 SEM 照片;(d)~(e)对照器件和添加 OA 器件横截面 SEM 照片;(f)~(g)对照薄膜和添加 OA 钙钛矿薄膜的 Pb 4f、I 3d 轨道的 XPS 谱;(h) PbI_2 、OA- PbI_2 和 OA 的 FTIR 谱;对照和添加 OA 的钙钛矿薄膜的 XRD 谱(i)、PL 谱(j)和 TRPL 谱(k)

Fig. 1 (a)Electrostatic potential diagram of orotic acid(OA). SEM image of control perovskite films(b) and with OA additive (c). Cross-section SEM image of control device(d) and with OA additive(e). The XPS spectra of the Pb 4f(f) and I 3d (g) of the control perovskite films and with OA additive. (h)FTIR spectra of PbI_2 , OA- PbI_2 and OA. XRD spectra(i), PL spectra(j) and TRPL spectra(k) of the control perovskite films and with OA additive

结合 XPS 和 FTIR 测试表征了 OA 与钙钛矿晶粒之间的相互作用。图 1(f)、(g)分别是钙钛矿薄膜 XPS 谱的 Pb 4f 轨道和 I 3d 轨道谱线。图 1(f)中对照器件钙钛矿薄膜的 Pb 4f $7/2$ 和 Pb 4f $5/2$ 特征峰分别位于 138.18 eV 和 142.98 eV, 引入 OA 后分别移动到了 138.28 eV 和 143.08 eV, 这表明

$-\text{COOH}$ 与未配位的 Pb^{2+} 之间可能存在相互作用^[14]。图 1(g)中对照器件 I 3d $3/2$ (618.98 eV) 和 I 3d $5/2$ (630.48 eV) 的特征峰分别移动到 619.08 eV 和 630.58 eV, 增加的结合能说明 $-\text{NH}$ 与 I 之间形成了氢键 ($\text{N}-\text{H}\cdots\text{I}$) 相互作用, 导致 I 元素的化学状态发生改变。图 1(h)是 PbI_2 、OA-

PbI₂、OA 的 FTIR 谱线, OA 在 1 640 cm⁻¹ 处出现 C=O 伸缩振动峰, OA-PbI₂ 中该伸缩振动峰移至 1 635 cm⁻¹ 处, PbI₂ 的谱线无该振动峰, 这表明 OA 中的 C=O 与 PbI₂ 存在相互作用。图 1(i) 为 OA 钝化前后钙钛矿薄膜的 XRD 谱, 在 14.03°、28.27°、31.72° 处的衍射峰分别对应钙钛矿晶体的 (110)、(220) 和 (310) 平面。引入 OA 后特征峰没有发生偏移, 也无新峰出现, 表明 OA 的引入不影响钙钛矿的晶体结构; 但 OA 钝化后 (110) 衍射峰的半高宽 (FWHM) 由 0.137 降到 0.119, 表明 OA 添加剂也有助于增大薄膜的晶粒尺寸, 这与 SEM 图结果一致。此外, 引入 OA 后位于 12.7° 的 PbI₂ 峰强度降低, 这表明 OA 抑制了钙钛矿薄膜中 PbI₂ 缺陷的生成。最后, 结合稳态荧光光谱 (PL) 和时间分辨光致发光光谱 (TRPL) 分析 OA 钝化对钙钛矿薄膜光生载流子行为的影响。如图 1(j) 所示, 在普通玻璃上制备钙钛矿薄膜, OA 钝化前后的钙钛矿薄膜均在 800 nm 出现了发光峰, 但 OA 钝化钙钛矿薄膜的 PL 峰高于对照薄膜, 这可能与 OA 钝化后, 钙钛矿薄膜缺陷态密度降低, 产生的电子-空穴对数量增加有关。图 1(k) 为对照器件和 OA 钝化钙钛矿薄膜的 TRPL 谱, 通过公式 (1) 拟合瞬态荧光光谱曲线^[15]:

$$I = A_1 \exp\left(-\frac{t}{\tau_1}\right) + A_2 \exp\left(-\frac{t}{\tau_2}\right), \quad (1)$$

得到反应衰减寿命的时间参数 τ_1 和 τ_2 。其中 τ_1 代表与双分子辐射复合相关的缓慢衰减寿命, τ_2 代表与缺陷引起的非辐射复合相关的快速衰减寿命。通过公式 (2):

$$\tau_{\text{avg}} = \frac{A_1 \times \tau_1^2 + A_2 \times \tau_2^2}{A_1 \times \tau_1 + A_2 \times \tau_2}, \quad (2)$$

计算出对照薄膜和 OA 钝化薄膜的激子平均寿命 τ_{avg} 分别为 171.22 ns 和 316.91 ns, 较长的激子寿命表明 OA 钝化能有效减少钙钛矿薄膜缺陷, 抑制非辐射复合。

图 2(a) 是添加不同浓度 OA 钝化的 PSCs 器件在 1 个太阳标准光照下的 J - V 曲线, 对照器件的 V_{oc} 为 1.11 V, J_{sc} 为 22.83 mA/cm², FF 为 78.49%, PCE 为 19.89%。器件的光电性能随添加 OA 浓度的提高而增加, OA 添加浓度为 5 mmol/L 获得最佳的光电性能, V_{oc} 为 1.14 V, J_{sc} 为 23.87 mA/cm², FF 为 81.18%, PCE 为 22.09%。当添加 10 mmol/L OA 时, 过量的添加剂形成杂质缺陷反而使器件的性能降低, 所有器件的光电参数见表 1。

为了验证 OA 钝化对提升器件性能不是个例, 每种器件随机各挑选 25 个测试其 PCE。如图 2(b) 所示, 添加 OA 器件的 PCE 均有提升, 且 5 mmol/L OA 器件 PCE 最高且有更好的重复性。鉴于添加 5 mmol/L OA 的器件性能最佳, 后续的研究主要集中在对比组和 5 mmol/L OA 的器件。图 2(c) 是对照器件和 5 mmol/L OA 器件的正向扫描 (FS) 和反向扫描 (RS) J - V 曲线。二者之间的迟滞因子 (H) 由公式 (3) 计算得出^[16]:

$$H = \frac{\eta_{\text{RS}} - \eta_{\text{FS}}}{\eta_{\text{RS}}}, \quad (3)$$

η 为器件 PCE。对照器件 RS 和 FS 的 PCE 分别为 19.89% 和 19.35%, H 为 2.71%。5 mmol/L OA 器件的 RS 和 FS 得到的 PCE 分别为 22.09% 和 21.55%, H 降至 2.45%。详细参数见表 2。这表明使用 OA 钝化后, 器件的 J - V 迟滞效应得到了有效抑制, 这可能与 OA 钝化后钙钛矿晶粒尺寸增大, OA 中的 -COOH 和 -NH 锚定钙钛矿晶粒中游离的 Pb²⁺ 及 I⁻, 以及减少了载流子迁移过程中的非辐射复合有关。

图 2(d) 为对照器件和 5 mmol/L OA 器件的 EQE 曲线及其对应的积分电流密度曲线。5 mmol/L OA 器件的 EQE 曲线在整个光吸收范围内均高于对照曲线, 这与 OA 钝化降低了钙钛矿薄膜缺陷态密度、减少了载流子复合相关。由 EQE 曲线得到的对照器件和 5 mmol/L OA 器件的积分电流密度分别为 21.81 mA/cm² 和 22.38 mA/cm², 与 J - V 曲线中的 J_{sc} 相对应。

在最大功率点下测试器件的 PCE 和电流密度稳态输出性能, 如图 2(e) 所示。在 600 s 时间内, OA 钝化的器件在最大功率点输出的电流密度和 PCE 分别为 22.62 mA/cm² 和 21.71%, 高于对照器件的 21.13 mA/cm² 和 19.01%, 且更为稳定。进一步, 通过器件 V_{oc} 与光强对数之间的关系曲线来判断 PSCs 中的载流子非辐射重组程度^[17]:

$$V_{\text{oc}} = m k_{\text{B}} \times \frac{T}{q} \times \ln \frac{I}{I_0}, \quad (4)$$

其中, m 表示理想因子, k_{B} 是玻耳兹曼常数, T 表示绝对温度, I 为光强, q 为基本电荷。如图 2(f) 所示, OA 器件的 m 值为 1.53, 对照器件的 m 值为 1.99, 表明 OA 器件中表面非辐射复合和双分子重组得到了明显抑制。为了揭示 J - V 曲线中 V_{oc} 增大的原因, 莫特-肖特基曲线如图 2(g) 所示。PSCs 的内置电势 (V_{bi}) 值从与偏置轴的交点中提

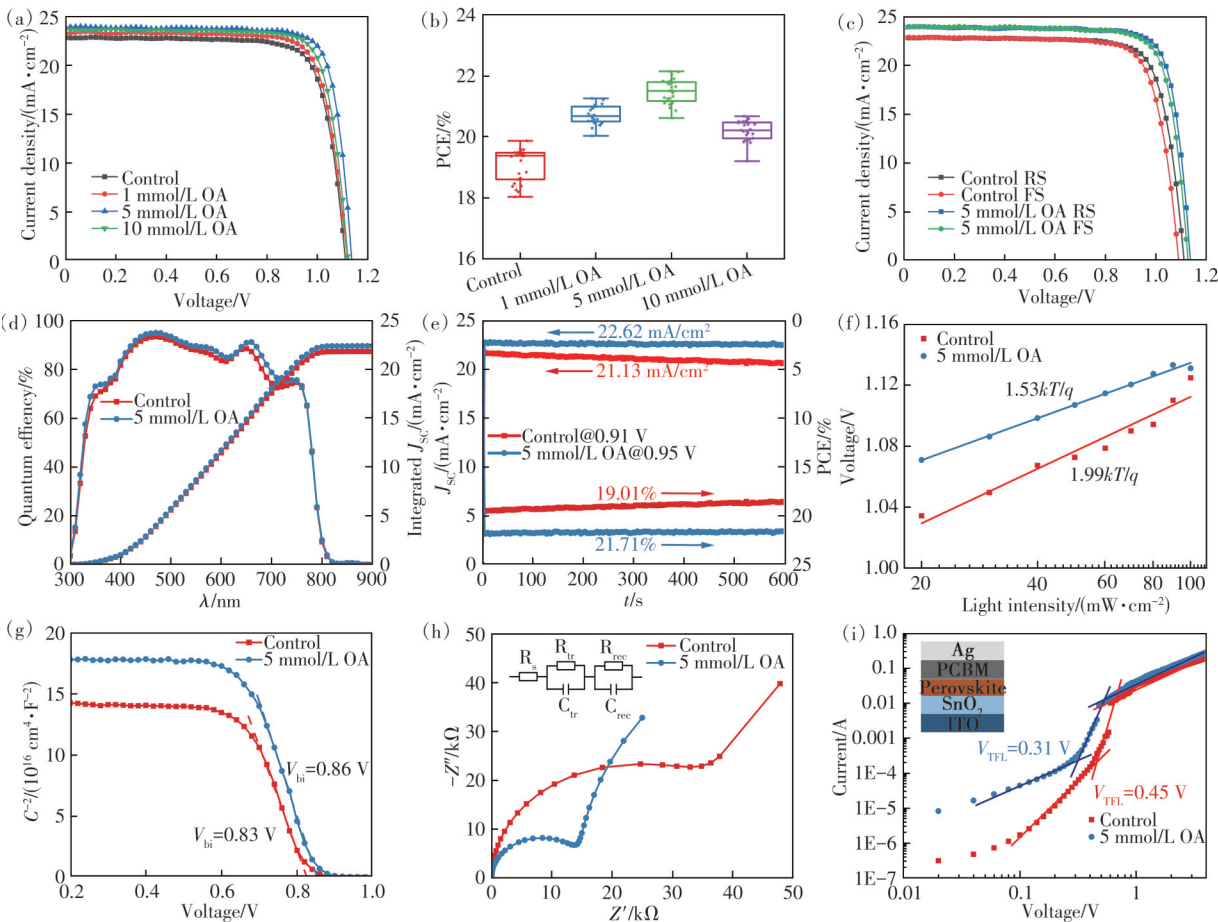


图 2 (a)对照器件与添加不同浓度 OA PSCs 的 J - V 曲线;对照器件与 5 mmol/L OA 器件的 PCE 统计分布箱线图(b),正向和反向扫描 J - V 曲线(c),EQE 谱(d),最大功率点稳态 PCE 和光电流密度曲线(e), V_{oc} 与光强度依赖曲线(f),莫特-肖特基曲线(g),奈奎斯特曲线(h),纯电子传输层器件的暗态 I - V 曲线(i)

Fig. 2 (a) The J - V curves of the control PSCs and the PSCs with different concentrations of OA. Control and 5 mmol/L OA device: (b) the PCE statistical distribution box plots, (c) forward and reverse scanning J - V curves, (d) EQE curves, (e) maximum power point steady-state PCE and photocurrent density, (f) V_{oc} and light intensity dependence curves, (g) Mott-Schottky curves, (h) Nyquist curves, (i) dark I - V curves of only electronic device

表 1 对照器件和不同浓度乳酸钝化的 PSCs 光伏参数

Tab. 1 The photovoltaic parameters of Control and different concentrations OA passivated PSCs

Devices	V_{oc}/V	$J_{sc}/(\text{mA} \cdot \text{cm}^{-2})$	FF/%	PCE/%
Control	1.11	22.83	78.49	19.89
1 mmol/L OA	1.12	23.67	80.31	21.29
5 mmol/L OA	1.14	23.87	81.18	22.09
10 mmol/L OA	1.12	23.26	78.94	20.56

表 2 对照器件和 5 mmol/L OA 器件的正、反扫描光伏参数

Tab. 2 The photovoltaic parameters of Control and 5 mmol/L OA PSCs with forward scan(FS) and reverse scan(RS)

Devices	V_{oc}/V	$J_{sc}/(\text{mA} \cdot \text{cm}^{-2})$	FF/%	PCE/%	HI/%
Control RS	1.11	22.83	78.49	19.89	2.71
Control FR	1.09	22.83	77.77	19.35	
5 mmol/L OA RS	1.14	23.87	81.18	22.09	2.45
5 mmol/L OA FR	1.13	23.91	79.76	21.55	

取,对照器件和 OA 添加器件的 V_{bi} 分别为 0.83 V 和 0.86 V。由于 OA 钝化降低了缺陷能级,使更多的载流子有效扩散,导致能带弯曲和耗尽区变宽,即势垒电容减小, V_{bi} 增大,与 J - V 曲线中 V_{oc} 增

加的结果相互对应^[18]。图2(h)是在黑暗条件下测试的器件交流阻抗谱,用来分析OA钝化后钙钛矿层与电荷传输层界面间的电荷传输能力的变化。测试频率设置在 $1 \times 10^{-1} \sim 1 \times 10^5$ Hz,添加0.3 V的正向偏置电压,插图是器件的模拟等效电路图。OA添加器件的图谱表现出了高频小圆、低频大圆的走向,高频的半圆半径越小意味着器件的串联电阻减小,低频的半圆半径越大,说明其对应器件的复合电阻越大,钙钛矿层内非辐射复合的阻力变大,载流子的寿命变长^[19]。使用空间电荷限制电流技术测量电流密度和电压曲线研究钙钛矿薄膜的缺陷态密度和载流子行为。如图2(i)所示,器件结构为ITO/SnO₂/Perovskite/PCBM/Ag。钙钛矿薄膜的陷阱填充极限电压(V_{TFL})通过公式(5)计算^[20]:

$$V_{\text{TFL}} = \frac{en_{\text{trap}}L^2}{2\epsilon\epsilon_0}, \quad (5)$$

其中, e 代表电子电荷量, n_{trap} 代表缺陷态密度, L 代表钙钛矿薄膜的厚度, ϵ 代表钙钛矿的相对介

电常数, ϵ_0 代表真空介电常数。添加OA器件和对照器件的 V_{TFL} 分别为0.31 V和0.45 V,由公式(5)得出两种器件的缺陷态密度分别为 $1.37 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 和 $1.99 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$,结果表明OA钝化后钙钛矿薄膜的缺陷态密度显著降低。

钙钛矿薄膜的缺陷也影响到PSCs的长期稳定性。图3(a)、(b)分别是对照器件和添加OA的钙钛矿薄膜的水接触角测试,分别为 48.27° 和 63.82° ,表明OA添加的薄膜有更好的疏水性,这可能与OA钝化后薄膜晶粒尺寸增大以及更加平整致密有关。分别测试对照钙钛矿薄膜(图3(c))和添加OA的钙钛矿薄膜(图3(d))在85% RH环境中放置0 d、3 d、5 d和8 d的UV-Vis图,发现添加OA的薄膜吸光度下降得更为缓慢,表明钝化后的钙钛矿薄膜更加稳定。图3(e)为在15%~30% RH、20 °C的空气环境中测试的PSCs PCE随时间变化曲线,1 000 h后OA钝化的PSCs保留初始PCE的93.85%,展现出极佳的稳定性,而对照器件仅能保持其初始PCE的84.53%。

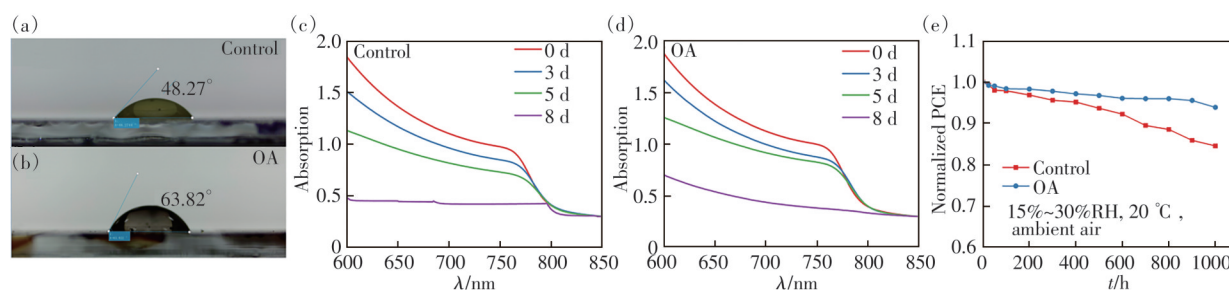


图3 对照钙钛矿薄膜(a)和5 mmol/L OA钙钛矿薄膜(b)的水接触角测试;对照钙钛矿薄膜(c)和OA钝化钙钛矿薄膜(d)的UV-Vis曲线随时间变化曲线;(e)对照器件和OA钝化PSCs在空气环境中的PCE随时间变化曲线

Fig.3 Water contact test of the Control (a), OA added perovskite film (b). UV-Vis curve of Control (c), OA added perovskite film (d) wet stability test. (e) Aging curve of control and OA added PSCs in ambient air

4 结 论

本文通过添加剂工程,将OA引入了钙钛矿前驱体溶液中,在大气环境下制备了ITO/SnO₂/Perovskite/Sprio-OMeTAD/Ag结构的PSCs。OA中的羧基基团和含氮基团可分别与未配位的Pb²⁺、I⁻结合钝化钙钛矿层的深浅能级缺陷,通过多种表征测试证明了OA能够减少钙钛矿薄膜缺陷状态、增大晶粒尺寸,进而抑制载流子的非辐射复合,延长载

流子寿命。OA钝化的PSCs表现出22.09%的PCE,高于对照器件19.89%的PCE。添加OA的PSCs在空气环境中放置1 000 h后仍能保持其初始PCE的93.85%,展现出极佳的稳定性。本文为在空气环境中制备高性能钙钛矿太阳能电池提供了思路。

本文专家审稿意见及作者回复内容的下载地址:
<http://cjl.lightpublishing.cn/thesisDetails#10.37188/CJL.20240114>.

参 考 文 献:

[1] DE ROO J, IBÁÑEZ M, GEIREGAT P, *et al.* Highly dynamic ligand binding and light absorption coefficient of cesium

- lead bromide perovskite nanocrystals [J]. *ACS Nano*, 2016, 10(2): 2071-2081.
- [2] GHOSH B, FEBRIANSYAH B, HARIKESH P C, *et al.* Direct band gap mixed-valence organic-inorganic gold perovskite as visible light absorbers [J]. *Chem. Mater.*, 2020, 32(15): 6318-6325.
- [3] ATHAYDE D D, SOUZA D F, SILVA A M A, *et al.* Review of perovskite ceramic synthesis and membrane preparation methods [J]. *Ceram. Int.*, 2016, 42(6): 6555-6571.
- [4] LI Z Q, ZHAO Y Z, WANG X, *et al.* Cost analysis of perovskite tandem photovoltaics [J]. *Joule*, 2018, 2(8): 1559-1572.
- [5] LIU X X, CHENG Y H, TANG B S, *et al.* Shallow defects levels and extract detrapped charges to stabilize highly efficient and hysteresis-free perovskite photovoltaic devices [J]. *Nano Energy*, 2020, 71: 104556.
- [6] POLYAKOV A Y, SMIRNOV N B, SHCHEMEROV I V, *et al.* Trap states in multication mesoscopic perovskite solar cells: a deep levels transient spectroscopy investigation [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2018, 113(26): 263501.
- [7] ZHOU Y, POLI I, MEGGIOLARO D, *et al.* Defect activity in metal halide perovskites with wide and narrow bandgap [J]. *Nat. Rev. Mater.*, 2021, 6(11): 986-1002.
- [8] HU Z S, LIN Z H, SU J, *et al.* A review on energy band-gap engineering for perovskite photovoltaics [J]. *Solar RRL*, 2019, 3(12): 1900304.
- [9] CAI W X, WANG Y D, SHANG W Z, *et al.* Lewis base governing superficial proton behavior of hybrid perovskite: Basicity dependent passivation strategy [J]. *Chem. Eng. J.*, 2022, 446: 137033.
- [10] FENG X, LIANG X F, FANG Z, *et al.* Defects in perovskite solar cells and their passivation strategies [J]. *Chem. Select*, 2023, 8(45): 202302617.
- [11] FANG K, WANG J T, LIU H, *et al.* Enhancing the performance and stability of perovskite solar cells through the introduction of the multifunctional additive 5-amino-2-fluorobenzoic acid [J]. *Solar RRL*, 2023, 7(24): 2300766.
- [12] WU Y H, WANG Q, CHEN Y T, *et al.* Stable perovskite solar cells with 25.17% efficiency enabled by improving crystallization and passivating defects synergistically [J]. *Energy Environ. Sci.*, 2022, 15(11): 4700-4709.
- [13] SU H, ZHANG J, HU Y J, *et al.* Modulation on electrostatic potential of passivator for highly efficient and stable perovskite solar cells [J]. *Adv. Funct. Mater.*, 2023, 33(34): 2213123.
- [14] YEOM K W, PARK N G. Reducing hole trap density in Sn-Pb perovskite solar cells *via* molecular phenylhydrazine [J]. *Solar RRL*, 2024, 8(7): 2400068.
- [15] CHEN J, LV J, LIU X L, *et al.* A study on theoretical models for investigating time-resolved photoluminescence in halide perovskites [J]. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2023, 25(11): 7574-7588.
- [16] JAHANBANI S, GHADARI R. Theoretical study of optoelectronic performance of hole-transporting material quinoxaline-based with architecture (D-A-D) in perovskite solar cells: a DFT method [J]. *J. Mol. Liq.*, 2024, 398: 124296.
- [17] LUO D Y, SU R, ZHANG W, *et al.* Minimizing non-radiative recombination losses in perovskite solar cells [J]. *Nat. Rev. Mater.*, 2020, 5(1): 44-60.
- [18] WU Y T, CHANG B H, WANG L, *et al.* Intrinsic dipole arrangement to coordinate energy levels for efficient and stable perovskite solar cells [J]. *Adv. Mater.*, 2023, 35(18): 2300174.
- [19] PROCHOWICZ D, TRIVEDI S, PARIKH N, *et al.* In the quest of low-frequency impedance spectra of efficient perovskite solar cells [J]. *Energy Technol.*, 2021, 9(7): 2100229.
- [20] 张康杰, 闫伟博, 辛颖. 苯乙胺钝化钙钛矿埋底界面提高太阳能电池性能 [J]. *发光学报*, 2023, 44(9): 1636-1643.
- ZHANG K J, YAN W B, XIN H. Passivation of perovskite buried-interface using phenethylamine for enhanced solar cell performance [J]. *Chin. J. Lumin.*, 2023, 44(9): 1636-1643. (in Chinese)



侯显(1990-),男,甘肃天水人,博士,副教授,2018年于华东师范大学获得博士学位,主要从事钙钛矿太阳能电池,光电探测器的研究。

E-mail: houx@lut.edu.cn