

# Symposium A04

## Solar Energy Materials and Solar Cells

### 太阳能材料与太阳能电池

2017年7月8-12日

**分会主席:**

邹德春

北京大学

张文华

中国工程物理研究院化工材料研究所

刘生忠

陕西师范大学

Robert P. H. Change

Northwestern University, USA

**联系人:**

刘昕航

中国工程物理研究院化工材料研究所

电话: 13591674104

邮箱: Liu741403663@caep.cn

## A-04. 太阳能材料与太阳能电池

分会主席：邹德春、张文华、刘生忠、Robert P.H.Change

### A04-01

#### 聚合物太阳能电池光伏材料的侧链工程

李永舫

中国科学院化学研究所

苏州大学

聚合物太阳能电池具有结构和制备过程简单、成本低、重量轻、可制备成柔性器件等突出优点，成为国内外研究热点领域之一。将富勒烯衍生物受体用 *n*-型有机半导体材料取代，可以克服富勒烯受体存在的可见光区吸光弱、能级调控困难和形貌稳定性差等缺点，近年来受到研究者的关注。多种性能优异的非富勒烯型受体被设计出来，如窄带隙 *n*-型聚合物受体 N2200 和有机半导体受体 ITIC 等。

给体和受体光伏材料的吸收互补和能级匹配是获得高效聚合物太阳能电池的关键。我们发展了一系列与窄带隙非富勒烯受体光伏材料吸收互补、基于噻吩取代苯并二噻吩(BDTP)与苯并三氮唑(BTA)单元的中间带隙二维共轭 D-A 共聚物给体材料，将 BTA 受体单元上的两个氢原子用氟原子取代得到的聚合物 J51、其 HOMO 能级下移 0.13 eV，同时空穴迁移率显著提高。使用 N2200 受体的全聚合物太阳能电池能量转换效率 (PCE) 达到 8.27，为全聚合物太阳能电池效率的文献报道最高值；使用 ITIC 的非富勒烯聚合物太阳能电池 PCE 达到 9.26。进而，根据先前烷硫基取代可以降低共轭聚合物 HOMO 能级的经验，将硫烷基引入到 BDTP 单元的噻吩共轭侧链上合成了聚合物 J61，其 HOMO 能级进一步降低，同时吸收光谱也有所红移。基于 J61 与 ITIC 的器件开路电压 ( $V_{oc}$ ) 和 PCE 分别提高到约 0.9 V 和 9.52%，通过器件进一步优化使效率达到了 10.57 %。进一步在聚合物的 BDTP 单元的噻吩共轭侧链上引入硅烷基来调制聚合物的电子结构和光伏性能，发现所得到的聚合物 J71 具有更低的 HOMO 能级。采用 J71 与 ITIC 共混制备的非富勒烯聚合物太阳能电池  $V_{oc}$  进一步提升至 0.94 V，器件效率达到 11.41%。

另外，通过将 ITIC 侧链苯环上的柔性链从对位移到间位，使得到的 *m*-ITIC 的电子迁移率显著提高，从而进一步提升了非富勒烯聚合物太阳能电池的光伏性能。基于 J61 为给体、*m*-ITIC 为受体的非富勒烯聚合物太阳能电池的 PCE 达到 11.77%。

### A04-02

#### 高电荷收集效率的激子型太阳能电池的研究

田建军

北京科技大学 100083

新型激子型太阳能电池，如量子点太阳能电池和钙钛矿太阳能电池，近年来发展迅速，成为国内外关注的热点之一。半导体量子点是一种三维尺寸小于波尔激子半径的原子团簇，单个量子点在一个高能光子作用下，理论上能产生多个激子（电子-空穴对），即多重激子效应，所构筑的激子型太阳能电池，可以突破传统 P-N 结太阳能电池的 Shockley-Queisser 极限模型（33%），理论上期望获得更高的光电转换效率（41%）。新型钙钛矿型太阳能电池兼具较高的光电转换效率和潜在极低的制备成本等优点引起世界高度关注，被 Science 杂志评为 2013 年度十大科技进展之一。短短几年内，光电转换效率由最初的 3% 发展到目前 20% 以上。但是，这些新型激子型太阳能电池结构中存在大量的界面缺陷，不仅降低了电荷注入和传输，还产生大量的电荷复合，导致电荷收集效率低。提高对活性材料（量子点或钙钛矿）引入界面修饰被

认为是一种有效提高电池效率的方法。本报告主要介绍了我们课题组近年来在新型太阳能电池材料界面调控研究方面的工作。

关键词：激子型太阳能电池；量子点；钙钛矿；电荷收集效率；界面修饰

#### A04-03

##### 高性能光伏应用的铅卤钙钛矿可控生长

赵一新

上海交通大学 200240

从 2012 年以来，铅卤钙钛矿  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  ( $\text{MAPbI}_3$ ) 凭借其可调控的宽光谱响应吸收、优异的光电转化效率以及低制备成本等优点，迅猛发展成为近年来光电转化材料研究的热点。针对钙钛矿的“一步法”和“两步法”制备方法存在的体积收缩和体积膨胀问题。通过引入可控量的  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Cl}$  和  $\text{HCl}$  等含  $\text{Cl}$  添加剂来实现调控制备高质量的钙钛矿材料“一步法”可控生长，以及通过开发多孔性  $\text{PbI}_2$  膜和预膨胀的  $\text{PbI}_2 \cdot x\text{CH}_3\text{NH}_3\text{I}$  和  $\text{HPbI}_2\text{Cl}$  的方法来调整“两步法”的体积膨胀问题。为了实现对于钙钛矿表面的有效钝化，通过气/固法在钙钛矿晶界实现  $\text{PbI}_2$  的可调控生长来有效钝化钙钛矿。通过  $\text{Br}$  离子引发  $\text{MAPbI}_3$  钙钛矿纳米晶的 Ostwald 熟化过程，从而使钙钛矿晶粒再生获得更大的晶粒并在钙钛矿表面实现有效的  $\text{Br}$  离子钝化。钙钛矿具有 2D 和 3D 两种晶体结构。通过引入  $\text{HCl}$  分子到 3D 钙钛矿中来构建 2D 钙钛矿，同时通过  $\text{HCl}$  的挥发来实现 2D-3D 的转化而得到 3D 钙钛矿，从而实现了通过离子交换导致的维度转换来制备高质量钙钛矿薄膜。此外，通过引入具有  $\text{NH}_3^+$  和  $\text{COO}^-$  双官能团的氨基酸到 3D 钙钛矿中，形成了 2D/3D 混合结构，获得量子效应可调的高荧光效率的铰链的 2D/3D 钙钛矿薄膜。

关键词：钙钛矿；太阳能电池；表面钝化

#### A04-04

##### 功能化碳基纳米材料在能源中的应用

张文华

中国工程物理研究院化工材料研究所 610200

纯碳基纳米材料如纳米管与石墨烯等，其表面化学惰性强，因而具有较高的化学稳定性；与此同时，高化学惰性意味着低催化活性，导致也限制了他们在催化科学中的应用，对其进行必要的功能化改性成为提升其催化活性的必要手段。

本实验采用原位化学合成的方法，制备了包覆金属纳米颗粒的氮元素掺杂碳纳米管复合材料，并对其作为染料敏化电池对电极材料的催化活性以及稳定性进行了深入研究。

扫描电镜、透射电镜结果表明，所得碳纳米管复合材料具有如下特点：1. 纳米管管壁石墨化程度高；2. 纳米管顶部包裹用于催化生长所残留的金属大颗粒；3. 纳米管管壁内部包裹尺寸为几个纳米的小金属颗粒。循环伏安、塔菲尔极化曲线以及阻抗谱等电化学表征表明该碳基复合材料具有比  $\text{Pt}$  更好的催化活性以及可逆性，同时具有极高的化学稳定性。使用包覆金属纳米颗粒的氮元素掺杂碳纳米管复合材料作为对电极的染料敏化电池取得了 8.82% 的转化效率，相较于  $\text{Pt}$  作为对电极的染料敏化电池在光电转化效率上提升了 10%。

碳包覆的金属颗粒可以促使电子由金属颗粒向碳纳米管转移，从而调控碳纳米管的电子结构，增加碳材料的催化活性位点，激活其催化活性；包裹在金属纳米颗粒外侧的碳材料可以有效地保护金属颗粒，避免腐蚀性溶液对金属颗粒的破坏，从而很好地保持了材料的稳定性；同时，石墨化的碳材料具有较高的导电性，有利于电子的传输和转移。进一步研究表明，相似的功能化改性的策略在石墨烯材料中同样有效。综上，碳材料的功能化改性在探索具有高催化活性、高稳定性的催化材料方面具有巨大的优势，在能源领域中展现出了巨大的应用前景。

关键词：碳基纳米材料；功能化改性；催化活性；稳定性

#### A04-05

##### 钙钛矿单晶薄膜与无旋涂高效率器件

胡劲松, 葛倩庆, 陈尧轩, 丁捷

中国科学院化学研究所 100190

The organic-inorganic hybrid perovskite single-crystalline thin films (SCTFs) are promising for enhancing the photoelectric device performance due to the higher carrier mobility, longer diffusion length and carrier lifetime arising from the reduced trap-state densities compared with polycrystalline films. However, bulk perovskite single crystals available today are not suitable for practical devices application due to the unfavorable thickness. In this presentation, we will first present a facile space-confined solution-processed strategy to on-substrate fabricate large-area hybrid perovskite SCTFs with comparable properties to bulk single crystals. Lastly, a facile fully spin-coating-free solution method will be introduced to fabricate large-area highly efficient PSCs.

关键词: 钙钛矿; 单晶薄膜; 无旋涂; 高效率

#### A04-06

##### MAPbBr<sub>3</sub> 平面异质结钙钛矿电池中异质结界面的电子输运性质调控研究

郑霄家, 张敏, 王增华, 张文华

中国工程物理研究院化工材料研究所, 新材料研究中心, 成都 610200

MAPbBr<sub>3</sub> 具有优异的光电子传输性质、高稳定性以及较大 (2.3eV) 且连续可调的禁带宽度, 是叠层器件中顶电池的理想候选材料。前期研究表明, 基于 TiO<sub>2</sub> 致密层作为空穴阻挡层的 MAPbBr<sub>3</sub> 平面异质结钙钛矿电池中由于 MAPbBr<sub>3</sub> 与 TiO<sub>2</sub> 之间的能级失配使得电子无法顺利导出, 进而影响器件的正常工作。

本项研究采用溶胶凝胶法制备 TiO<sub>2</sub> 致密层, 通过反溶剂结晶的方法在室温下制备 MAPbBr<sub>3</sub> 钙钛矿薄膜并应用于平面异质结钙钛矿电池中。选取[BMIM]BF<sub>4</sub> 离子液体对 TiO<sub>2</sub> 进行表面修饰来改善电子在 MAPbBr<sub>3</sub>/TiO<sub>2</sub> 界面的传递效率, 并探索性研究了[BMIM]BF<sub>4</sub> 离子液体对调控 MAPbBr<sub>3</sub>/TiO<sub>2</sub> 界面电子输运性质的影响。

开尔文探针测试及时间分辨荧光光谱结果表明[BMIM]BF<sub>4</sub> 可以降低 TiO<sub>2</sub> 的功函, 使 MAPbBr<sub>3</sub> 与 TiO<sub>2</sub> 之间的能级结构更为匹配, 进而有效促进电子从 MAPbBr<sub>3</sub> 向 TiO<sub>2</sub> 的转移。[BMIM]BF<sub>4</sub> 的界面改性的可以大幅度提高 MAPbBr<sub>3</sub> 平面异质结钙钛矿电池器件的转化效率。经过界面修饰的 MAPbBr<sub>3</sub> 平面异质结钙钛矿电池的转化效率从未修饰时的~0.2% 提升至~6%。

离子液体的界面修饰可以大大改善 MAPbBr<sub>3</sub> 平面异质结钙钛矿电池中 MAPbBr<sub>3</sub>/TiO<sub>2</sub> 异质结界面的电子输运性质, 有利于器件性能的提升。

关键词: 钙钛矿电池; 离子液体; 界面调控

#### A04-07

##### Low-cost hole-transport materials for efficient perovskite solar cells

Ze Yu

大连理工大学

In the past few years, the photovoltaic community has witnessed a rapid emergence of a new class of solid-state heterojunction solar cells based on solution-processable organometal halide perovskite absorbers.<sup>[1, 2]</sup> The energy conversion efficiency of solid-state perovskite solar cells (PSCs) has been quickly increased to 22% now. Perovskites materials have shown several unique characteristics, such as a broad spectral absorption range, large absorption coefficient, high charge carrier mobility and diffusion length. Hole-transport materials (HTMs),

which are essential components in PSCs, play a key in extraction and collection of photogenerated holes and transporting these charges to the metal electrode.<sup>[3]</sup> 2, 2', 7, 7'-tetrakis(N, N'-di-p-methoxyphenylamine)-9, 9'-spirobifluorene (Spiro-OMeTAD) has been the most widely used HTM in PSCs so far. However, the synthesis of such HTM requires multiple steps, thus resulting in high production costs and holding back the large-scale applications of PSC technologies to a great extent. In this work, we will present some low-cost and efficient HTMs developed very recently in our group for PSCs, including small molecules, organometallic complex copper phthalocyanine and conducting polymer poly(ethylenedioxythiophene) (PEDOT).<sup>[4]</sup> The photovoltaic performance of these newly designed HTMs were systematically investigated in mesoscopic conventional n-i-p PSCs. These findings offer new strategies for developing alternative HTMs for low-cost and efficient PSCs in the future.

Keywords: perovskite solar cells; hole-transporting materials; low-cost; efficient

#### A04-08

### 太阳能电池与材料的研究与发展

戴松元

华北电力大学

新材料的进步对于太阳能电池的发展具有重要的推动作用，本报告将从染料敏化、量子点以及钙钛矿这三个方面来阐述太阳能电池与材料研究之间的关系。对于染料敏化电池来说，氧化物光阳极、染料以及对电极这几种材料在近些年都取得了突出的进展。合成了一系列微米球并实现了实心球到空心球结构上的可控合成，特别是利用所合成的微米球吸附能力强、光散射性能好和电子复合率低等优点成功制备了 11.63% 的染料敏化电池。同时，建立和发展了一套完整的低成本溶液制膜技术，开发了环境友好、来源广泛、适合于大规模生产和应用的硫属化合物等高性能非铂对电极材料，电催化活性和稳定性均可媲美铂电极。基于“强分子内电荷转移型”的给受体染料能够拓宽吸收光谱，提升电池效率。另外，铜铟硫、镉硒碲、铜铟碲等新型量子点材料也显著提升了量子点电池的光电转换效率。更加突出的是，有机无机钙钛矿作为一种新兴的神奇光电材料，近年来已经使电池效率提升到了超过 22% 的水平。发展了一种新型的二维钙钛矿材料，可显著提升电池稳定性，在 90% 的湿度下电池性能保持 1000 小时无衰减。本报告将从上述几个方面论证材料进步对于太阳能电池的重要性。

#### A04-09

### 有机染料的分子设计及其染料敏化太阳能电池

王忠胜

复旦大学化学系，上海市分子催化和功能材料重点实验室，教育部 2011 能源材料化学协同创新中心 (2011-iChEM) 200438

尽管受钙钛矿太阳能电池研究的冲击，研究者对染料敏化太阳能电池(DSSC)的关注开始下降，DSSC 仍然具有很高的研究价值和美好的应用前景。染料敏化剂是 DSSC 的核心组分，承载着捕获入射光，产生光生电子的功能，其光吸收性质的优劣直接决定了 DSSC 的光电流和光伏性能。

为了拓宽染料敏化剂的光吸收范围和吸收强度，赋予染料分子抑制电荷复合的功能，本文设计合成了一系列纯有机染料，用作 DSSC 的敏化剂。

我们将两个 D- $\pi$ -A 分支连接在一起，合成了具有双 D- $\pi$ -A 结构的染料分子。与单 D- $\pi$ -A 结构相比，双 D- $\pi$ -A 结构可以降低分子间的相互作用力，抑制电荷复合，从而可以产生较高的短路光电流、开路光电流和能量转化效率。另外，将具有不同吸电子能力的基团（例如喹啉、苯并噻二唑、三氮唑等）插入到 D- $\pi$ -A 骨架中，可以调控染料分子的 HOMO 和 LUMO 能级，有效地拓宽光吸收范围和吸收强度，大幅度提高光伏性能。

我们的结果表明，通过选取不同的有机单元，可以构筑形形色色的有机染料，对其光吸收性质和能级进行优化，不仅可以产生较高的能量转化效率，还具有很好的长效稳定性。

关键词：染料敏化太阳电池，有机染料，分子设计

#### A04-10

##### 溅射硒化法制备 $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S},\text{Se})_4$ 薄膜太阳电池：从材料制备到器件研究

张毅<sup>1</sup>，武莉<sup>2</sup>，李建军<sup>1,3</sup>，孙云<sup>1</sup>

1. 南开大学光电子薄膜器件与技术研究所
2. 南开大学物理科学学院
3. 暨南大学信息学院

$\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}_x\text{Se}_{1-x})_4$  (CZTSSe) 是一种锌黄锡矿结构(kesterite)直接带隙半导体材料。相比于传统高效薄膜太阳电池 CIGS 和 CdTe, CZTSSe 的原料储量丰富，环境友好。因此，CZTSSe 作为一种具有巨大潜力的低成本、绿色、环保型薄膜太阳电池，将会在未来满足不断增长的清洁能源需求中发挥巨大的作用。本文介绍了南开大学化合物薄膜太阳电池研究组近年来在 CZTSSe 电池研究方面的研究进展。

采用溅射硒化法制备 CZTSSe 薄膜，其他各层薄膜采用常规工艺制备。用 XRD、XRF、SEM、变温 I-V、TRPL、AS 谱及 Raman 等对样品进行表征。

通过研究，解决了 CZTSSe 薄膜制备过程中的一些关键问题，澄清了 Cu 的叠层顺序与构建器件之间的直接关系，并明确了硒化过程中薄膜的反应机理。在通过深入研究，提出了解决 CZTSe 薄膜电池欧姆接触的方法，提出了一种 Se 气氛可控的制备 CZTSe 的方法，研究了 Zn/Sn 比不同时吸收层中载流子浓度变化与器件耗尽区宽度的关系，并进而明确耗尽区宽度与器件性能之间的关系。由此提出了研制 CZTSSe 薄膜电池努力的方向。

研究表明，CZTSSe 是一种很有潜力的化合物薄膜太阳电池，本组研制出效率为 10.4% 的 CZTSe 电池（经第三方认证）。同时本研究也提出了研制 CZTSSe 薄膜电池努力的方向。

关键词：CZTSSe，欧姆接触，溅射硒化法，薄膜太阳电池

#### A04-11

##### 钙钛矿太阳能电池材料的力光电多场耦合效应及其对光伏转换性能的影响

赵晋津<sup>1,2</sup>，贾春媚<sup>1,1</sup>，刘正浩<sup>1,1</sup>，李江宁<sup>1,2</sup>

1. 石家庄铁道大学
2. 中国科学院深圳先进技术研究院

随着人类经济社会的发展，能源与环境问题日益突出，发展清洁、高效和低成本的可再生能源成为全球科技领域面临的一个重大命题。太阳能取之不尽用之不竭，其有效利用对于优化能源结构、减少环境污染、延缓全球变暖等具有重要意义。基于有机金属卤化物的钙钛矿太阳能电池自 2009 年出现以来，在短短 8 年时间内，转换效率从 3.8% 快速提升至 20% 以上，其提升速度前所未有，远远超过其他类型的太阳能电池。<sup>1,2</sup> 钙钛矿有机金属卤化物材料  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$  具有与  $\text{BaTiO}_3$  相同的晶体结构，其中  $\text{CH}_3\text{NH}_3^+$  为有机阳离子，X 为  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Br}^-$ ,  $\text{I}^-$  等卤素离子。 $\text{Pb}^{2+}$  与 X 形成正八面体对称结构  $\text{PbX}_6$ ，而  $\text{CH}_3\text{NH}_3^+$  则分布在八面体组成的中心，进而形成三维的周期性结构。<sup>3</sup> 其能隙约为 1.5eV，激子结合能较低，微米级厚的薄膜可充分吸收 800 nm 以下的太阳光，因而具有优异的光伏性能，又因其原料丰富、价格低廉、可溶液加工、可较低温制备，使有机金属卤化物钙钛矿太阳能电池迅速成为下一代光伏技术中最具潜力的技术分支。然而，金属有机卤化物因其钙钛矿结构与多场耦合性能，也遇到了其他类型太阳能电池材料未曾遇到的一些问题：钙钛矿太阳能电池在光辐照下激发载流子，与有机金属卤化物的铁电畴和畴界、自发极化与翻转以及离子运动和电化学反应产生强烈的相互作用，进而改变其光电转换与输运性质，影响材料的结构与器件的性能。本文发展了一种原位跨尺度多场耦合原子力显微表征方法，深入揭示钙钛矿有机金属卤化物材料

的力电光多场耦合效应，阐明铁电极化、压电效应和离子运动对材料光伏转换的影响，为进一步提升钙钛矿太阳能电池光电转换效率提供指引。

关键词：铁电；离子运动；力电光耦合；钙钛矿太阳电池；原子力显微镜

#### A04-12

### 复合气凝胶材料在染料敏化太阳能电池光阳极中的应用

高相东

中国科学院上海硅酸盐研究所 200050

染料敏化太阳能电池（DSSC）是新型薄膜太阳能电池的典型代表，虽然其最高光电转换效率低于目前研究热点钙钛矿太阳能电池，但在电池器件制作成本、稳定性、大面积制备工艺、装饰性等方面具有其他新型类型电池无法替代的优势，在当今微型/低功耗电子器件、柔性可穿戴装备日益成为今后社会发展大趋势的大背景下，DSSC 必将以其独特优势占据一席之地。纳米多孔光阳极是 DSSC 的核心和关键，针对 DSSC 光阳极微观结构与功能优化的研究长期以来一直吸引了人们的广泛关注。探索具有特殊结构和光电功能的新材料在光阳极中的应用对推动 DSSC 光电转换效率的继续提高、深入理解纳米尺度光电转换现象的本质及调控方法，具有重要意义。本报告旨在探讨“气凝胶”这种具有超高比表面积、高孔容的典型纳米多孔材料在光阳极中的应用研究。

气凝胶是一类具有低密度（0.003 -0.3 g/cm<sup>3</sup>）、高比表面积（200-2000 m<sup>2</sup>/g）、高孔容（>2.0cm<sup>3</sup>/g）的轻质纳米多孔材料，在工业绝热绝冷、半导体器件、新材料等诸多领域都具有不可替代的重要作用。气凝胶内部孔道丰富、高孔容的特点使其非常适合与其它半导体纳米材料复合，从而获得传统材料或方法无法获得的高比表面积、高电子输运速率等特性，是染料敏化太阳能电池、锂离子电池、超级电容器等领域的研究新热点。

本报告以目前研究较多的氧化硅/氧化钛气凝胶为研究对象，重点介绍通过材料复合手段制备可用于染料敏化太阳能电池光阳极的气凝胶新材料，包括“氧化硅-氧化钛复合气凝胶”、“多级结构氧化钛气凝胶”、“纳米钛酸锂气凝胶”三种典型光阳极，重点讨论复合气凝胶的制备思路、气凝胶引入对光阳极光学、电学性能的影响规律，展望今后可能的若干发展方向。最后也将介绍通过有机无机复合手段制备“双亲”气凝胶及其在乳化油废水治理方面的应用。

关键词：染料敏化太阳能电池，光阳极，气凝胶

#### A04-13

### 有机胺基团改变对钙钛矿材料性能的影响

江琳沁，李小燕，余运龙，邱羽

福建江夏学院 350108

基于有机-无机杂化材料  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  制备的薄膜太阳能电池被称为钙钛矿型太阳能电池。2009 年，Kojima 等首次研制出钙钛型太阳能电池，效率为 3.8%。自此后，此项研究以迅猛之势发展，并引起科学界与工业界的极大关注。时至今日，钙钛矿  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  电池光电转换效率已达 22.1%。 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  具有较高的光吸收系数，较低的成本及易于制备等优势，但约为 1.55 eV 的带隙仍高于光伏材料的理想带隙（1.1 - 1.4 eV），同时提高在空气中的稳定性也是后续研究中需要重点解决的问题。

前期研究表明  $\text{ABX}_3$  型钙钛矿材料的禁带宽度与它的晶体结构密切相关。对于典型的  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ ，有机阳离子 A 基团为甲胺基（ $\text{CH}_3\text{NH}_3^+$ ），尽管已有文献研究 A 基团变化对材料光电性能的影响，但对于改变 A 基团中的烷基链长或胺基数会对材料的光吸收性质、空气稳定性及光电特性产生何种影响，迄今为止尚缺乏相应的系统研究。

本研究选取了一系列具有不同烷基链长或胺基数的有机化合物，合成具有不同有机胺阳离子的钙钛矿型材料，通过 X 射线衍射谱测试样品的化学组成和表征薄膜的空气稳定性，利用紫外可见吸收光谱表征样

品的光吸收行为，以期寻求烷基胺基对钙钛矿型材料光电性能影响的规律，并为寻找新材料提供一定的理论与实验基础。

研究发现选用 1,3-二氨基丙烷为原材料，所合成的 $(\text{CH}_2)_3(\text{NH}_3)_2\text{PbI}_4$  钙钛矿型材料带隙可约为 1.3 eV，处于半导体最佳带宽（1.1 ~ 1.4 eV）范围内，同时其空气稳定性也大大增强，利用此材料初步制备的太阳能电池具有一定的光电转换效率。

关键词：钙钛矿，烷基胺，光吸收，光伏

#### A04-14

##### Interface Morphology Control and Printing Fabrication for Organic and Perovskite Solar Cells

Junliang Yang<sup>1</sup>, Zhang Chujun<sup>1</sup>, Wu Han<sup>1</sup>, Wang Chunhua<sup>1</sup>, Gao Yongli<sup>1,2</sup>

1. Institute of Super-microstructure and Ultrafast Process in Advanced Materials, School of Physics and Electronics, Central South University, Changsha, Hunan, China

2. Department of Physics and Astronomy, University of Rochester, Rochester, NY 14627, USA

Organic solar cells continuously attract much attention due to their potential as low cost and lightweight sources of renewable energy. The power conversion efficiency (PCE) of state-of-the-art organic solar cells, based on bulk heterojunction and tandem structures, can reach over 12.0 %, as result of progress in new materials, device engineering, device physics, etc. [1,2]. Especially, there has been an unexpected breakthrough and rapid evolution of highly efficient solar cells based on organic-inorganic hybrid perovskite materials, of which the PCE has been over 22 % [1,3]. However, large-area organic solar cells processed by printing or coating techniques, especially through a roll-to-roll (R2R) process, still have many issues, and the PCE of large-area organic solar cell modules is much lower than those of smaller, spin-coated devices. The interface is one of the important issues that influence both small-size and printed large-area organic or perovskite solar cells. In this presentation, we will show our research progress on the control of interface morphology and the fabrication via printing techniques for organic and perovskite solar cells [4-10]. It is very important to obtain high-quality interface materials for improving the performance and stability of these solar cells, as well as optimizing printed thin films and solar cell devices.

Keyword: organic solar cells; perovskite solar cells; interface; morphology; printing

#### A04-15

##### 碲化镉多晶薄膜的原位退火对薄膜性质及器件性能的影响

武莉莉，徐航，李康，李创，李春秀，张静全，冯良桓

四川大学 材料科学与工程学院 610065

碲化镉薄膜太阳能电池是光伏发电领域效率较高的三种薄膜太阳能电池之一。CdTe 多晶薄膜作为太阳能电池的吸收层，其生长过程至关重要，直接决定着器件的性能。因此，非常有必要深入研究 CdTe 薄膜的生长过程，为更高效率的 CdTe 薄膜太阳能电池的研制提供重要理论依据。用于高效碲化镉太阳能电池的多晶碲化镉薄膜一般采用近空间升华法或蒸汽输运法沉积。这两种沉积方法都是高温快速成膜的过程，但薄膜的生长过程不仅与其自身的沉积过程有关，而且还涉及薄膜沉积后的原位退火和后处理工艺过程。原位退火处理对 CdTe 薄膜的性质有重要影响，然而这方面的研究工作却鲜见报道。本文研究了用近空间升华法沉积 CdTe 薄膜后的原位退火对 CdTe 多晶薄膜的性质和电池性能的影响，主要结果如下：（1）相比较原位退火时间，原位退火温度对 CdTe 多晶薄膜性质及器件性能影响更大。当温度为 500℃左右时，原位退火处理将有利于 CdTe 多晶薄膜在（311）和（400）等方向生长，降低 CdTe 多晶薄膜结晶性，导致 CdTe 薄膜太阳能电池器件性能降低。原位处理时间有一个最优值（10 分钟），当处理时间小于最优值时，复合中心随着处理时间的增加而减少，少子寿命最长；当处理时间过大时，又有可能形成新的复合中心和缺陷，少子



寿命减小。(2) 降温速率减慢有利于 CdTe 薄膜太阳能电池短路电流密度的增加, 并提高转换效率, 但降温速率不宜过慢, 理想降温速率在 5°C/min 附近。降温速率从自然冷却, 减慢到 1~2°C/min 时, 电池在 400 nm 到 500 nm 波长范围的量子效率明显提高, 且降温速率为 5°C/min 时, 电池在 600 nm 到 700 nm 波长范围的量子效率也有所提高。综上, 原位退火能显著提高 CdTe 薄膜太阳能电池的性能。基于对碲化镉薄膜生长过程的全面认识, 优化其生长工艺参数, 严格控制热过程, 已制备出转换效率大于 17% 的 0.5cm<sup>2</sup> 的碲化镉太阳能电池。

关键词: 太阳能电池, 碲化镉薄膜, 生长过程, 退火

#### A04-16

##### 量子点敏化太阳能电池

钟新华

华南农业大学 510642

量子点敏化太阳能电池 (QDSC), 是用纳米化的半导体 (俗称量子点, QD) 作为光捕获材料来进行光电转换的光伏电池, 具有高效率, 低成本、长寿命潜质, 是极具竞争力的新型第三代太阳能电池。近年来我们 (1) 通过能带耦合调控电子结构的思想, 设计合成出一系列 type-II 核/壳, 及合金复合结构量子点, 并高密度负载, 实现了量子点材料宽光谱吸收与高电子注入效率的统一, 获得了高的光电流; (2) 提出了降低电子态密度抑制电荷复合的新机制, 通过在光阳极表面生长 ZnS、SiO<sub>2</sub> 宽带隙材料来降低其表面的电子态密度, 从源头上抑制电荷复合、提高了光电压; (3) 创立了增加活性位点提高对电极催化活性的新思路, 发展出网状基底限域锚定催化材料增加活性位点的新策略, 发明了高催化活性的钛网负载介孔碳对电极, 增加了填充因子。取得了被同行认定为: 2012 年(5.4%), 2013 年(6.7%), 2014 年(7.0%), 2015 年(9.3%) 和 2016 年(11.6%) QDSC 效率新记录。

关键词: 太阳能电池, 量子点敏化太阳能电池, 量子点

#### A04-17

##### Novel back contact to enhance the performance of CdTe solar cells

潘锋

北京大学深圳研究生院新材料学院

To improve the performance of CdTe thin film solar cells, controllable formation of good back contact is a key issue. However, it is challenging to attain a stable back contact with low resistance and fit energy level matching with CdTe layer. In general, back contact with Cu dopant is an efficient way to increase the short-circuit current density (J<sub>sc</sub>) and the fill factor (FF). For further improvement, we used atomic layer deposition (ALD) of Aluminum oxide (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) to optimize the back contact of CdTe thin film solar cells. An improved efficiency, up to 12.1%, is found with the 1 nm Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> deposition (CdTe/Cu<sub>x</sub>Te/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), compared with the efficiency of 10.7% without Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> modification. The performance improvement is attributed to the surface modification of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> layer with rectification and tunneling effects. We further studied the mechanism through establishing the interfacial energy band diagram configuration of the ALD Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Cu<sub>x</sub>Te by experiment of X-ray photoelectron spectroscopy and the first-principles calculations. The band alignment with optimized layer thickness (about 1 nm ALD Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) could be concluded as the key factor for rectification and tunneling effects. We also developed novel p-type and metallic dual-functional back contact structures for CdTe thin film solar cells. On the one hand, a new back contact structure of CdTe/ALD Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Cu was developed to control Cu diffusion into the CdTe layer. The formation of annealed dual-functional Cu-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> atomic layer can not only increase the open-circuit voltage (V<sub>oc</sub>) and FF due to the p + p model with a favorable energy level, but also avoid the decrease of J<sub>sc</sub> because of its metallic conductive property. On the other hand, we found an appropriate p-type conductive semiconductor film,

digenite  $\text{Cu}_9\text{S}_5$  nanocrystalline film, as the back contact and electrode. With good conductivity,  $\text{Cu}_9\text{S}_5$  nanocrystalline film produces a successive gradient-doping region by the controllable Cu diffusion, which greatly reduces the contact potential barrier. Remarkably, it achieved a comparable power conversion efficiency (PCE, 11.3%) with the traditional metal back electrode (Cu/Au thin films, 11.4%) and a higher PCE (13.8%) with the help of the Au assistant film. Finally, we also developed high work function (5.42 eV)  $\text{MoS}_2$ -based p-type semiconductor material as the back contact of CdTe solar cells. The efficiency was improved by 2.6% compared with the traditional cells, mainly from the great improvement in short-circuit current density ( $J_{sc}$ ) due to the favorable energy levels at the CdTe/ $\text{MoS}_2$ -based thin film interface and the unique thickness-dependent conductivity of  $\text{MoS}_2$ -based thin film.

#### A04-18

##### 钙钛矿晶态材料的设计合成与光电应用

匡代彬

中山大学 510275

卤化物钙钛矿材料因其具有高消光系数、宽吸收光谱、长的载流子扩散距离和高的载流子迁移率等特殊的光电性能近年来引起了国内外的广泛关注，在太阳电池、发光二极管、光电探测器等领域呈现出了非常广阔的应用前景。我们发展了一种空间限域反温度结晶 (SLITC) 的方法，在 FTO 玻璃上成功制备了  $120 \text{ cm}^2$  的  $\text{MAPbBr}_3$  晶体膜薄片，该方法具有原位生长、面积大、厚度可控以及晶体质量高等优点。基于  $\text{MAPbBr}_3$  晶体膜的窄频带响应光电探测器展现了宽的线性响应范围 ( $10^{-4} \sim 10^2 \text{ mW cm}^{-2}$ )，高的光谱选择性 (61.3 dB) 和  $f_{3\text{dB}}$  (110 kHz)。通过进一步优化 SLITC 生长方法，在  $\text{TiO}_2$ -coated FTO 玻璃基底上制备出厚度最薄为  $16 \mu\text{m}$ ，尺寸为  $6 \times 8 \text{ mm}$  的  $\text{MAPbBr}_3$  单晶薄片，得到了最高为 7.11% 的光电转换效率 (PCE)，并表现出突出的稳定性。另外，我们使用溶液冷却结晶法合成了  $\text{FA}_{0.84}\text{MA}_{0.16}\text{Pb}(\text{I}_{0.84}\text{Br}_{0.16})_3$  微米单晶，并以此为前驱体制备了钙钛矿薄膜。该方法可以提高前驱体溶液的纯度，均一性和稳定性，得到晶界数目更少，晶体尺寸更大，载流子迁移率更高的钙钛矿薄膜，从而显著减少了薄膜中缺陷-复合中心的产生，有效促进了载流子在钙钛矿内部以及界面处的传输。使用微晶作为前驱体制备得到的钙钛矿太阳电池最高可实现 18.3% 的 PCE，同直接采用各组分原料溶解制备前驱体的方法相比提升了 ~21%，且在 700 h 老化后能维持 ~92% 的效率，2000 h 老化后仍能维持 ~83% 的效率。利用反溶剂法合成了  $\text{CsPbBr}_3$  量子点-氧化石墨烯复合材料，并首次开展了其在光催化  $\text{CO}_2$  方面的应用。研究表明通过对钙钛矿晶态材料的结构设计和可控合成，有望大大提升太阳电池的光电转换效率和稳定性，并可拓展其在光催化和光电探测器方面的应用。

关键词：有机-无机钙钛矿；量子点；钙钛矿单晶；太阳电池；光催化

#### A04-19

##### 铅锡混合卤素钙钛矿电池的光电性能及稳定性研究

刘江，王刚，宋镇，廖成，梅军

中物院成都科学技术发展中心 610200

对  $\text{ABX}_3$  钙钛矿结构晶格 B 的位置开展成分调控具有显著的意义，一方面这可以代替有毒金属铅，提高电池环境友好性；另一方面，可能获得更低禁带宽度的吸收层活性材料。本工作详细研究了铅锡混合卤素钙钛矿  $\text{FAPb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{I}_3$  材料的光电性能，荧光光谱和电池量子效率结果都指出铅锡混合薄膜的禁带宽度随着 Sn 含量的变化出现先降低再升高的现象。当 50 mol% 的 Sn 掺入到 FA 基钙钛矿结构中后，禁带宽度甚至能低至 1.28 eV，光吸收范围变宽。由于  $\text{Sn}^{2+}$  比  $\text{Pb}^{2+}$  体积小，少量 Sn 掺入到  $\text{FAPbI}_3$  结构中后，可显著降低薄膜生成钙钛矿的退火温度，纯  $\text{FAPbI}_3$  薄膜需要在  $150^\circ\text{C}$  下进行退火，而  $\text{FAPb}_{0.9}\text{Sn}_{0.1}\text{I}_3$  薄膜只需在  $100^\circ\text{C}$  下进行退火。尽管含  $\text{Sn}^{2+}$  的钙钛矿材料对空气非常敏感，但我们发现少量 Sn 的添加可以显著提

升器件电流，并且器件在无水无氧的环境下仍具有不错的稳定性。无水无氧的环境可通过严格的制备和封装工艺去获得，因而 Sn 元素的调控对钙钛矿器件的应用可能仍具有一定的实际意义。

关键词：钙钛矿，低铅，光吸收，稳定性，平面结构

#### A04-20

##### **Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 钝化 TiO<sub>2</sub> 纳米棒阵列作为高效的电子传输层制备高性能蒸发沉积 FAPbI<sub>3</sub> 钙钛矿太阳能电池**

张亚男<sup>1,2</sup>, 李博<sup>1</sup>, 张芦元<sup>1</sup>, 尹龙卫<sup>1</sup>

1. 山东大学 材料科学与工程学院, 材料液固结构演变与加工教育部重点实验室, 中国 济南 250061
2. 泰山学院 化学化工学院, 中国 泰安 271021

目的：与电荷转移相关的界面工程在促进钙钛矿太阳能电池(PSCs)的性能方面起着至关重要的作用。

方法：我们首次报道 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 层钝化的 TiO<sub>2</sub> 纳米棒(NRs)阵列作为电子传输层(ETL)用于热蒸发沉积的甲脒碘化铅 (FAPbI<sub>3</sub>)PSCs。

结果：Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 钝化的 TiO<sub>2</sub>NRs 可以产生明显的荧光淬灭现象，有效地提高电荷提取并阻碍 ETL 和 FAPbI<sub>3</sub> 界面间的电荷复合。基于热蒸发沉积的 FAPbI<sub>3</sub> 吸收层和 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-TiO<sub>2</sub> 电子传输层的 PSCs 表现出优良的光电性能，显示光电转换效率为 14% 并且几乎无磁滞现象，器件的重现性和稳定性良好。

结论：显著提高的器件性能可以归因于以下三个因素：首先，氧化铝缓冲层作为一个屏障能有效延缓电子在 ETL 中逆向的运输并阻碍载流子重组。其次，氧化铝钝化可以提高 TiO<sub>2</sub>/FAPbI<sub>3</sub> 界面接触，减缓 TiO<sub>2</sub>/FAPbI<sub>3</sub> 界面的表面缺陷引起的电子捕获效应，有利于电子提取并运输到电极。第三，蒸发的沉积方法有助于获得极其均匀 FAPbI<sub>3</sub> 无孔薄膜和紧凑的界面。

关键词：蒸发 FAPbI<sub>3</sub>；钙钛矿太阳能电池；Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 缓冲层；载流子复合率；电子传输层

#### A04-21

##### **New hole transport materials for perovskite and dye sensitized solar cells**

孙立成<sup>1,2</sup>

1. 大连理工大学
2. 瑞典皇家工学院

Hole-transporting material (HTM) plays an important role in scavenging photo-generated holes in perovskite solar cells (PSCs) and in regenerating the oxidized state of the photosensitizer in solid-state dye-sensitized solar cells (ssDSCs), and it also aides the charge transport of holes to the counter-electrode. 2, 2', 7, 7'-tetrakis(N, N'-di-p-methoxyphenylamine)-9, 9'-spirobifluorene (Spiro-OMeTAD) is a well-known HTM and has been the most successful HTM in both PSCs and ssDSCs. However, the complicated synthetic route and purification procedure render a high production cost for this HTM, which significantly limits its potential large-scale application in the future. There is therefore a good motivation to explore alternative HTMs with low cost and high performance in PSCs and ssDSCs. With this in mind, we recently developed a series of new organic HTMs combining facile synthetic routes and excellent photovoltaic performance. For example, a spiro[fluorene-9,9'-xanthene] (SFX) based organic HTM (coded as X60) has been designed and synthesized using a two-step synthetic route. PSC and ssDSC devices based on such a HTM afforded a power conversion efficiency (PCE) of 7.3% and 19.8% in ssDSCs and PSCs, respectively, under 100 mW cm<sup>-2</sup> AM1.5G solar illumination. To the best of our knowledge, this is the first example of an easily synthesized spiro-structured HTM that shows comparable performance with respect to the well-known HTM Spiro-OMeTAD in both ssDSCs and PSCs. Thus, the facile synthesis of X60 from commercially available starting materials makes this HTM very promising for large-scale industrial production in the future.

#### A04-22

##### 低温 SnO<sub>2</sub> 电子传输层及高效平面钙钛矿太阳能电池

方国家

1. 武汉大学物理科学与技术学院
2. 武汉大学深圳研究院

本文在制备高效稳定的钙钛矿太阳能电池的研究基础上，主要对钙钛矿电池的电子传输层做了系统深入的研究工作。主要工作如下：

1. 运用一种低温溶液法制备的 SnO<sub>2</sub> 纳米晶薄膜作为电子传输层，从而代替了传统的需要高温烧结的 TiO<sub>2</sub>。制备的 SnO<sub>2</sub> 不仅可以作为电子传输层还可以作为减反层。此外，SnO<sub>2</sub> 的光电性能的研究结果表明，低温溶液法制备的 SnO<sub>2</sub> 具有更加合适的带隙和更高的电子迁移率。所以平面的钙钛矿电池采用低温溶液法制备的 SnO<sub>2</sub> 电子传输层具有更高的短路电流密度，开路电压，填充因子和超过 17% 的光电转换效率。

2. 创新性的使用富勒烯钝化的 SnO<sub>2</sub> 量子点作为电子传输层，这将更加有利于钙钛矿电池中的电子传输和空穴阻挡。同时在钙钛矿的前驱体中加入少量的 Pb(SCN)<sub>2</sub>，可以使得钙钛矿的晶粒显著变大。并且还导致残余的 PbI<sub>2</sub> 对钙钛矿的晶界钝化，从而有效的降低了钙钛矿电池的暗电流和离子迁移，所以也降低了平面钙钛矿电池的磁滞效应和增加了电池的性能。平面的钙钛矿电池使用这种经过晶界钝化的钙钛矿吸光层和富勒烯钝化的 SnO<sub>2</sub> 电子传输层可以取得最高为 20.78% 的反扫效率。

3. 结合了蒸发法制备的更加廉价稳定的 CuPc 空穴传输层和 PbS 插入层，成功制备了高效、稳定的钙钛矿电池（器件 2000h 效率无衰减）。

关键词：钙钛矿电池；SnO<sub>2</sub>；电子传输层；低温

#### A04-23

##### 钙钛矿太阳能电池中高效与高稳定的无机界面工程

陈炜

华中科技大学 430074

钙钛矿太阳能电池的稳定性问题和部分材料的高成本限制了其应用前景。无机界面材料获取容易，稳定性高，基于无机界面电荷传输材料的界面工程，有望同时实现器件的高效率和高稳定性。在钙钛矿膜层上制备无机界面薄膜，需要解决能级匹配，导电性，形貌致密性等问题，同时应避免薄膜制备过程对底层钙钛矿的破坏。

我们的系列工作显示，通过多元氧化物材料体系和掺杂技术可实现低温制备的无机界面薄膜的电学性质调控，同时无机界面薄膜提供额外化学屏蔽作用，最终同时实现电池器件的高效率和高稳定性。第一个工作，基于 NiMgLiO/MAPbI<sub>3</sub>/PCBM/TiNbO<sub>x</sub> 反式平面结构电池，通过喷雾热解制备 NiMgLiO 和溶胶凝胶制备 TiNbO<sub>x</sub> 多元氧化物界面层，掺杂实现电导率的提升，使得小面积电池效率达到 18.3%，并实现国际上第一个大面积电池（1cm<sup>2</sup>）认证效率记录 15.0%。无机界面薄膜具有良好的化学稳定性和湿气屏蔽作用，实现了器件 1000 小时光照老化效率损失

关键词：钙钛矿太阳能电池，无机界面工程，多元氧化物，化学屏蔽

#### A04-24

##### Highly efficient perovskite solar cells: Microstructure and device stability

Xudong Yang, Han Chen, Liyuan Han

School of Materials Science and Engineering, Shanghai Jiao Tong University

In recent years, organic-inorganic hybrid perovskite solar cells have become a new representative low-cost and highly efficient photovoltaic technology, triggering intense research around the world. It is highly desired to realize highly efficient and stable devices for large scale applications.

Here, I would like to introduce our research progress in this field.

(1) From the aspect of fabricating highly efficient perovskite solar cells, spin-coating is the mostly used method. However, this method is not suitable for fabricating large-area uniform films. To solve this problem, we developed a new film deposition method, soft-cover deposition, which has a high raw materials utilization ratio and the ability to fabricate large-area uniform perovskite films with fewer microscopic defects. This method enabled a power conversion efficiency comparable to that obtained through spin-coating method on solar cells with an area of  $1 \text{ cm}^2$ . In addition, the homogeneity of perovskite film deposited on a  $51 \text{ cm}^2$  substrate through soft-cover deposition method is much higher than that deposited through spin-coating. All above indicate that the soft-cover method has great potential in mass production.

(2) The stability of perovskite solar cell is a key factor hampering its final commercialization. From this aspect, we developed fullerene-graphene based electron transporting materials, which effectively inhibited the degradation caused by ion migration. After 500 hours aging test under  $85 \text{ }^\circ\text{C}$ , the devices retained 95% of its initial efficiency and the absolute efficiency value was higher than 15%. This work paves a way to the achievement of high efficiency and stability simultaneously.

#### **A04-25**

**钙钛矿太阳能电池：**

**从分子设计、结晶控制到器件构筑**

逢淑平

中国科学院青岛生物能源与过程研究所 266101

目的：钙钛矿太阳能电池是基于有机-无机杂化钙钛矿材料的新型太阳能电池。自 2009 年首次报道至今，短短 6 年时间即突破了 22% 的光电转化效率，已超过多晶硅太阳能电池。其可以实现全溶液法制备，因而极大的简化了生产工艺，降低了成本。最近几年，其在稳定性方面不断得到提升，已初步显示良好的商业化前景。而目前的制备工艺是制约其进一步大规模发展的瓶颈问题之一。

方法：目前常用的有机-无机钙钛矿材料体系与传统纯无机太阳能材料区别在于有机阳离子的存在，我们课题组近期的研究重点是通过有机单元的作用调控钙钛矿的成分和修复钙钛矿薄膜缺陷结构。研究不同有机阳离子或分子在钙钛矿薄膜材料中交换机理，探讨离子交换在促进钙钛矿相转化过程。

结果：最终实现了对混合阳离子钙钛矿材料中有机阳离子的连续变化和有效调控，开发了精确控制有机离子和分子交换工艺过程，这为将来制备高效率钙钛矿太阳能电池提供重要的理论和实验基础。

结论：钙钛矿的有机离子与钙钛矿骨架结构的弱化学作用为我们提供了调控光电转换性质和薄膜形态和结晶性的重要手段，其亦将在将来的商业化大规模制备中起到关键作用。

关键词：钙钛矿太阳能电池；氢键；薄膜修复

#### **A04-26**

**化学添加剂工程实现简单制备高效稳定钙钛矿太阳电池**

吴永真<sup>1</sup>，韩礼元<sup>2</sup>

1. 华东理工大学，化学与分子工程学院，精细化工研究所

2. National Institute for Materials Science, Japan

目的：可溶液加工的有机-无机杂化钙钛矿太阳电池的光电转换效率已经超过 20%，可媲美已商业化的无机化合物薄膜太阳电池（如 CIGS、CdTe 等），但钙钛矿光伏技术的实用化仍面临稳定性低、缺乏大面积器件制备方法等问题。总所周知，钙钛矿薄膜形貌和结晶质量是影响钙钛矿太阳电池性能的最关键要素，但目前的薄膜制备方法大多面临操作复杂、重复性低、难以实现大面积制备等问题，且结晶质量难以控制。

方法：在本工作中，我们将汇报一种化学添加剂工程策略实现简单制备大面积高质量钙钛矿薄膜，其具有钙钛矿晶体尺寸大、缺陷浓度低、表面平整、覆盖度高等特点。

结果：采用最简单、使用最光伏的甲胺铅碘钙钛矿 ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ )，通过简单的一步旋涂制备过程，我们在 1 平方厘米尺寸的器件上获得了超过 19% 的光电转换效率，并得到第三方公证。更为重要的是，我们发现钙钛矿结晶质量的提高对稳定性，特别是热稳定性有显著的改善作用。基于我们高质量  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  薄膜的电池器件效率在 85 °C 存放条件下 500 小时后仍能保持初始效率的 80% 以上。

结论：钙钛矿的结晶质量的改善有助于同时提升器件性能和稳定性，化学添加剂工程是实现溶液法简单制备高质量钙钛矿薄膜的一条有效途径。

关键词：钙钛矿太阳电池；高效率；稳定性；大面积；缺陷浓度

#### **A04-27**

### **Management of Perovskite Intermediates for Highly Efficient Inverted Planar Heterojunction Perovskite Solar Cells**

Yonghua Chen

Nanjing tech University

Owing to their high absorption coefficient, tunable bandgaps, high ambipolar charge mobility, low exciton binding energy, long electron and hole diffusion lengths, organic-inorganic hybrid perovskites, e.g.,  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$  ( $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$ ), offer promising routes for the development of low-cost and high-performance optoelectronic devices. High-quality perovskite film is a prerequisite to both perovskite solar cells and LEDs operation.

Here, we report a high-efficiency perovskite solar cell and a perovskite LED employing the same perovskite film via managing perovskite intermediates. The process utilizes the rapid formation of perovskite intermediate phases between  $\text{PbI}_2$  and methylammonium acetate to retard the reaction between  $\text{PbI}_2$  and MAI. The formation of  $\text{MAPbI}_3$  was allowed via the exchange of  $\text{I}^-$  anion from the neighboring MAI molecules to the perovskite intermediate phases replacing  $\text{Ac}^-$  anion. The photovoltaic device exhibits very high solar-to-electric PCE of 18.09%, which is one of the top performances based on organic/polymer charge transporting layer. Moreover, the intense NIR electroluminescence (EL) was also achieved with an external quantum efficiency of 0.53% and a high radiance of  $10.02 \text{ W sr}^{-1}\text{m}^{-2}$ , which represents one of the most efficient perovskite NIR devices. Our findings reveal that perovskite intermediate play an important role in facilitating homogeneous nucleation or modulating the crystallization kinetics.

Keywords: perovskite Solar cells, Perovskite LEDs

#### **A04-28**

### **Efficient planar perovskite solar cells with improved stability**

Shibin Li

University of Electronic Science and Technology of China

Perovskite solar cells (PSCs) have been developed rapidly recently, and efficient planar PSCs are regarded as the most promising replacement of the Si solar cells. However, the environmental instability of perovskite solar cells is an important issue that must be solved. We demonstrated that the surface passivation of electron transport layer (ETL) of PSCs can reduce the density of electron traps and suppress photocatalytic decomposition of perovskite films. Due to the improved electronic property of ETL, the planar heterojunction PSCs exhibit negligible hysteretic J-V behavior. The initial performance and long term stability in atmospheric environment under continuous illumination are also effectively improved. The efficiency just dropped from 17.2% to 15.03%

after 250 h continuous exposure under full spectrum simulated sunlight in air. Fabrication of highly efficient planar PSCs with improved stability provides a pathway for commercialization of PSCs.

Keywords: perovskite solar cells, stability, planar, surface passivation

#### A04-29

### First-principles Study of Defect Control in Thin-film Photovoltaic Materials

Suhuai Wei

Beijing Computational Science Research Center

First-principles study of photovoltaic (PV) materials plays an important role in developing PV technologies because it can provide useful physical insights, fresh perspective and new design principles for developing innovative PV materials with high solar cell efficiency and reduced cost. A good solar cell absorber material should have appropriate band gap (1.0 ~ 1.5 eV) with high solar light absorption and correct band location/alignment relative to the extraction layers to form a good interface with contacting layer. More importantly, a good solar cell material also should have good defect properties so that it can be doped well such that charge carriers can be created easily to generate the required electric field and has less defect-induced recombination centers such that it has high carrier life time and minority carrier mobility so photo-generated charge can be easily collected. Currently, most issues related to PV absorbers can be traced back to certain defect related issues. In this talk, using thin-film solar cell absorber materials CdTe, CIGS, and CZTS as examples, I will discuss how theoretical first-principles studies can be used to better understand the defect properties and improve the solar cell performance.

Keywords: Thin-film solar cell, defects, first-principles calculation

#### A04-30

### 全天候太阳能电池初探

唐群委

中国海洋大学 266100

太阳能电池是一种将光能转换为电能的能量转换器件。目前已开发的太阳能电池都需要在太阳光直接照射下实现电力输出，而在阴、雨、雾（霾）、夜晚等暗光天气发电效率很低甚至不能发电。中国气象数据显示，我国平均日照时间约为 3000 小时/年（占全年总时间的 34.2%），这意味着太阳能电池 65.8% 的时间因处于暗光环境而不能正常发电。因此，延长太阳能电池的发电时间具有重要的科学意义和重大的应用前景。

利用太阳能电池特性对微纳限域空间内光学与电子学行为极为敏感的特点，通过将具有能量转换的功能单元组装在染料敏化太阳能电池界面，充分发挥电池的界面效应，构建了具有将雨和太阳光中的能量转换为电能的新型太阳能电池集成器件，最终使太阳能电池具备了在光照、雨天、夜晚持续发电的能力，这为将来设计可在任何天气发电的全天候太阳能电池提供了技术支撑和理论依据。

目前，通过研究石墨烯、石墨烯基复合材料、合金、导电聚合物等在染料敏化太阳能电池中的界面工程，设计了雨天发电的太阳能电池，其光照（AM1.5, 100mW/cm<sup>2</sup>）下的光电转换效率达到 10% 以上，而在雨天产生的电流和电压最高分别为 3.9 微安/滴和 120 微伏/滴。阐明了阳离子（雨）/电子（界面材料）双电层电容的充放电行为是实现太阳能电池雨天发电的这一机理问题；此外，利用储光—发光材料对电池的界面修饰实现了染料敏化太阳能电池在夜晚发电数小时。

太阳能电池形态从“光照发电”向“全天候发电”改变是对传统概念的一种突破。虽然“全天候太阳能电池”的研究理念尚处于起步阶段，但已表现出较大的发展潜力和广泛的社会关注，通过关键材料和技术的不断革

新,有望突破太阳能电池的理论极限。通过结构优化,可以设计具有应用前景的高性能全天候太阳能电池技术。

关键词: 全天候太阳能电池; 能量转换材料与器件; 染料敏化太阳能电池

#### A04-31

##### 高性能染料敏化太阳电池材料的创新设计与可控制备

花建丽

华东理工大学 200237

针对染料敏化太阳电池(DSSCs)中的关键高性能染料分子材料的开发与结构和功能调控这个科学问题,创新提出了D-A- $\pi$ -A、D- $\pi$ -A-A和D-D- $\pi$ -A构型敏化染料分子设计新模型,精准合成一系列具有宽光谱和高摩尔消光系数的纯有机敏化剂。创新提出新增电荷离“阱”(“electron trap”)的创新分子设计思路,设计合成了一系列新型的含有强吸电子性能单元作为额外受体共轭桥的D-A- $\pi$ -A型敏化剂,实现了更好调整敏化剂能带、扩大光谱吸收范围,改善给体电子分布和提高染料稳定性,进一步提高了电池的光电转换效率和寿命,其电池的转换效率提高到9.40%;创新发展了不含羧基的双电子受体D- $\pi$ -A-A构型敏化染料分子,有效地拓宽了染料的吸收光谱、提高了材料的稳定性和光电转换效率,为获得更稳定的高效新型宽光谱染料敏化剂提供了一个全新的思路;对于D-D- $\pi$ -A构型敏化分子,额外大给体基团的引入不仅作为有效电子给体,同时通过尺寸效应抑制电子回传、电荷复合,提高了电子寿命,实现了10.65%光电转换效率;开发了一系列用于全固态染料敏化太阳电池的大给体染料敏化剂,其全固态半透明DSSCs的光电转换效率高达7.5%。该薄膜全固态DSSCs在具备高效的光电转换性能的同时也具有极好的半透明性,在光伏建筑一体化(BIPV)以及光伏窗户等领域具有极大的发展潜力。

关键词: 染料敏化太阳电池; 敏化剂; 额外受体; 大给体

#### A04-32

##### 混合溶剂热退火法制备18.13%效率的混合有机阴阳离子平板异质结钙钛矿太阳能电池

董航

西安电子科技大学 710071

目的: 通过掺入有机阴阳离子和改进制作工艺提高钙钛矿太阳能电池成膜特性和性能。

方法: 通过混合溶剂热退火法制备混合阴阳离子平板异质结钙钛矿太阳能电池即在100:1的IPA(Isopropanol)和DMF(N,N-Dimethylformamide)中对结构为ITO/PEDOT:PSS/FAMAI3-xBrx/PCBM/BCEP/Ag的钙钛矿太阳能电池进行一步法混合溶剂热退火。

结果: 最终制成的混合有机阴阳离子平板异质结钙钛矿太阳能电池开路电压(Voc)为1.07V,短路电流(Jsc)为21.16mA/cm<sup>2</sup>,填充因子(FF)为80.00%,光电转换效率(PCE)为18.13%。

结论: 对钙钛矿太阳能电池进行一步法混合溶剂热退火可以有效地提高薄膜的结晶度并增大晶粒尺寸,形成表面平滑且高密度的钙钛矿层,而且混合有机阴阳离子可以提高钙钛矿薄膜的结晶度,吸光性以及载流子寿命。

关键词: 钙钛矿, 混合溶剂热退火, 平板异质结太阳能电池, 一步法, 混合有机阴阳离子

#### A04-33

##### 聚合物体系中原位生长金属硫化物纳米颗粒以提高太阳能电池效率

杨春燕<sup>1</sup>, 李昕杰<sup>2</sup>, 李成<sup>1</sup>, 李建丰<sup>1</sup>, 同军锋<sup>1</sup>, 张鹏<sup>1</sup>, 夏养君<sup>1</sup>

1. 兰州交通大学光电技术与智能控制教育部重点实验室

2. 兰州交通大学化学与生物工程学院



有机/无机复合太阳能电池 (HSCs), 由于既具备有机太阳能电池质轻、成本低、易于大面积生产等优点, 又具有无机纳米半导体载流子迁移率高、稳定性好等特点, 成为近年来新型太阳能电池技术研究中极具发展潜力的方向之一。

目前制备 HSCs 通用的方法是: 将事先分别制备好的有机给体和无机受体混合作为活性层来组装器件。这种方法有以下缺点: 1) 制备无机纳米材料时, 需加入一些长链表面活性剂来调变其形貌。但是, 这些绝缘的表面活性剂会阻碍有机给体与无机受体间电荷的有效传输; 2) 需使用共溶剂将有机给体和无机受体进行混合。而共溶剂的使用, 会影响有机聚合物链的趋向性和无机纳米半导体的溶解性, 进而影响器件效率。而在聚合物体系中原位法制备无机纳米材料, 很好地实现了聚合物和无机半导体的有效结合, 排除了常规 HSCs 制备中表面活性剂和共溶剂的影响。

我们首先用溶液法分别制备了黄原酸镉、铈配合物, 用 TG 表征了两种配合物的分解温度。接着用热分解黄原酸镉、铈配合物的方法分别成功制备了 CdS 和 Sb<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 薄膜, 通过 XRD、Raman、SEM 等手段表征了薄膜的结构和表面形貌。之后, 我们在 P3HT: PC<sub>61</sub>BM 体系中分别掺入了不同质量比 (x%) 的黄原酸镉、铈配合物, 原位法制备了 P3HT:PC<sub>61</sub>BM: x% CdS 与 P3HT:PC<sub>61</sub>BM: x% Sb<sub>2</sub>S<sub>3</sub> 活性层薄膜, 组装了太阳能电池: ITO/CdS/P3HT:PC<sub>61</sub>BM: x% CdS(或 Sb<sub>2</sub>S<sub>3</sub>)/MoO<sub>3</sub>/Ag, 表征了其 J-V 特性。

实验发现: 掺入少量的 (3%) CdS(或 Sb<sub>2</sub>S<sub>3</sub>)后, 器件的开路电压几乎保持不变 (0.58 或 0.59 V), 但短路电流明显提高 (从 7.77 提高到 8.72 或 9.15 mA cm<sup>-2</sup>), 使得电池的光电转化效率有了明显提高 (从 2.34% 提高到 2.91% 或 2.92%)。最后, 我们用 Uv-vis 与 AFM 研究了电池效率提高的可能原因。

关键词: 无机/有机复合太阳能电池, 原位法, 热分解, 黄原酸镉、铈配合物

#### A04-34

##### DMSO 溶液法制备 Cu<sub>2</sub>ZnSn(S<sub>1-x</sub>Se<sub>x</sub>)<sub>4</sub> 薄膜太阳能电池

赵雲, 韩修训, 李佳佳, 董琛

中国科学院兰州化学物理研究所 730000

Cu<sub>2</sub>ZnSn(S<sub>1-x</sub>,Se<sub>x</sub>)<sub>4</sub> 作为一种理想的太阳能电池吸收层材料, 由于具备价格低廉, 环保, 组成元素在地壳中含量丰富, 禁带宽度在 1.0~1.5 eV 之间可调, 且其吸收系数大于 10<sup>4</sup> cm<sup>-1</sup> 等极具商业价值的优点受到了极大关注。截至目前, 最高效率 CZTSe 太阳能电池中短路电流密度最高为 40.6 mA/cm<sup>2</sup>, 已达 Shockley-Queisser 理论值的 80% 以上, 接近高效 CIGS 器件的电流密度水平; 而具最高转化效率的 CZTS 及 CZTSSe 太阳能电池的 Voc-deficit 分别为 789 mV 和 617 mV, FF 最高值分别为 65.8% 和 69.8%。显然, 开路电压及填充因子损失不仅与理论值相差较大, 即便与高效 CIGS 太阳能电池相比仍然有很大的提升空间。因此, 提高 Voc 及 FF 是进一步提升 CZTSSe 太阳能电池性能的关键。

本工作以 DMSO 为溶剂, 采用常见金属盐及硫脲制备了 CZTS 前驱体溶液, 旋涂成膜后经硒化热处理成功得到了 Cu<sub>2</sub>ZnSn(S<sub>1-x</sub>,Se<sub>x</sub>)<sub>4</sub> 吸收层薄膜, 在此基础上组装了效率为 7.45% 的 Cu<sub>2</sub>ZnSn(S<sub>1-x</sub>,Se<sub>x</sub>)<sub>4</sub> 薄膜太阳能电池。为进一步提高器件的转换效率, 通过在前驱体溶液中引入适量去离子水的方法改善了 CZTSSe 太阳能电池器件的开路电压及填充因子等性能参数, 获得了超过 9% 的转换效率。分析认为前驱体溶液中适量去离子水的引入可有效改善薄膜的成膜质量, 而氧的并入则起到了抑制载流子复合的作用。

关键词: Cu<sub>2</sub>ZnSn(S<sub>1-x</sub>,Se<sub>x</sub>)<sub>4</sub>, 薄膜太阳能电池, 光伏特性

#### A04-35

##### Progress in Solution Processible Tandem Solar Cells

Gang Li

Department of Electronic and Information Engineering

The Hong Kong Polytechnic University

Hung Hom, Kowloon, Hong Kong SAR, China

Solar energy provides limitless resource for human being to address the terawatt energy challenge. The ideal photovoltaic (PV) technology needs to be earth abundant, non-toxic, and very low cost etc. Solution processed solar cell based on organic polymer (Macromolecule) and organometal halide hybrid perovskites are both promising candidates for printable PV technologies. The advantages include low material cost, low temperature fabrication and their compatibility with printing/coating processes (roll-to-roll), high material utilization etc. They also provide attractive properties like flexibility, light weight, and transparency.

For polymer solar cells, the progress in single junction architecture is encouraging, but still need major boosts to make it competitive in the solar photovoltaic technology landscape. With the single junction cell now reaching 12% level, it is an exciting time to push it further forward. Multijunction or tandem structure solar cell, with complementary bandgaps, can overcome the Shockley-Queisser efficiency limit of single junction solar cell. Adopting the beautiful concept to enhance polymer solar cell efficiency while at the same time preserve the low cost promise, is the reasoning behind the solution process tandem polymer solar cells.

In this presentation, I will talk about the journey in the efforts towards tandem polymer solar cells<sup>1</sup>, different device architectures<sup>2</sup>, and the promise and practice to integrate solution process solar cell with other solar technologies<sup>3</sup>.

#### **A04-36**

##### **低维取向生长锡基卤素钙钛矿太阳能电池**

宁志军

上海科技大学 201210

作为一种新兴的半导体材料，有机无机杂化卤素钙钛矿（钙钛矿）由于其优异的电学和光学性质包括较低的缺陷态浓度，极高的载流子迁移率，较强的吸光能力与优良的发光特性吸引了广泛的关注。随着薄膜制备工艺以及电池器件结构的不断优化，近年来铅钙钛矿太阳能电池的能量转换效率从 3.8% 迅速提升至 22.1%。尽管如此，铅钙钛矿对环境污染极大且严重危害人体健康，无铅钙钛矿材料的研发是解决这一问题的出路所在。锡钙钛矿由于其低毒害的特点以及和铅钙钛矿类似的物理特性，是一类取代铅钙钛矿的理想材料。另外锡钙钛矿和锡铅钙钛矿的禁带宽度较小，可以用于叠层太阳能电池的制作。

在本论文中，我们首先开发了—种低维锡钙钛矿材料，这种二维结构的钙钛矿在空气中的热稳定性较高，同时有机大分子层可以保护其内部的锡钙钛矿，避免其与氧气接触，从而大幅提高了这类材料的稳定性。同时，这类低维锡钙钛矿材料具有垂直于基底的取向性，使得载流子从钙钛矿层传输到两端材料的效率大大提高。基于这种取向生长的低维锡钙钛矿电池薄膜，我们取得了 5.94% 的效率。对未封装的器件追踪 100h，效率无明显下降。

关键词：太阳能电池；钙钛矿；低维材料；取向生长

#### **A04-37**

##### **有机无机杂化钙钛矿太阳能电池稳定性研究**

袁宁一，孙越

常州大学 0640000

近期钙钛矿电池的效率突破了 22 %，同时其稳定性能相比之前也有了大幅度的提升。本篇内容主要通过改性的方法提高钙钛矿太阳能电池的湿度以及光照稳定性。

在湿度稳定性方面，通过替换空穴传输层材料、界面修饰、改变钙钛矿材料的结构和成分、不同的封装方法和电极制备工艺来提升材料的湿度稳定性，其中最为简单易行的方法是采用在前驱液中引入水溶性高分子材料来提升抗湿性能；在紫外光稳定性方面，通过界面修饰、改变钙钛矿材料结构和器件制备工艺可以

有效的增强材料的抗紫外线性能，Grtzell 课题组将 Rb 离子嵌入钙钛矿中在保证较高的输出效率的同时也使器件获得了非常卓越的光照稳定性。

为了探究低湿度条件下的钙钛矿电池为稳定性，本课题组研究了标准光照下采用不同氨基酸处理致密二氧化钛层后的有机/无机杂化钙钛矿材料和电池性能的变化。实验结果表明，通过在 TiO<sub>2</sub> 致密层和钙钛矿层中间引入单分子 HOOC-R-NH<sub>3</sub><sup>+</sup>Cl<sup>-</sup> 层可以提高钙钛矿太阳能电池的光照稳定性，通过控制直链 HOOC-R-NH<sub>3</sub><sup>+</sup>Cl<sup>-</sup> 中的烷基数量，可以在提高电池光照稳定性的同时避免对电池的转换效率造成明显的影响。同时为了探究湿度条件下的钙钛矿电池为稳定性，本课题组通过 ALD 的方法在 HTM 层上沉积了一层致密的氧化铝薄膜，最终的实验结果表明 24 天后器件的效率并没有下降很多，其湿度稳定性得到了提升；另一方面，本课题组采用了一种简单的方法，即在前驱液中添加适当的水溶性高分子材料 PVA 来提升钙钛矿太阳能电池在高湿度条件下的稳定性，实验结果表明，在相对湿度为 85-95% 的使用条件下防止一个月后，其器件的还能够保持原来 95% 的效率，其湿度稳定性得到了大幅度的提升。

通过以上的实验证明了水溶性高分子以及界面修饰对于提高钙钛矿太阳能电池的稳定性具有显著的提升作用。

关键词：钙钛矿太阳能电池；稳定性

#### A04-38

##### 柔性有机太阳能电池的器件稳定性研究

郑世昭<sup>1,2</sup>, 李文朗<sup>1</sup>, 苏彤彤<sup>1</sup>, 谢宗良<sup>1</sup>, 周竹欣<sup>1</sup>, 杨志涌<sup>1</sup>, 于涛<sup>1</sup>, 赵娟<sup>1</sup>, 刘四委<sup>1</sup>, 张艺<sup>1</sup>, 黄景扬<sup>2</sup>, 池振国<sup>1</sup>, 许家瑞<sup>1</sup>

1. 中山大学化学学院，聚合物复合材料及功能材料教育部重点实验室，广东省有机聚合物光电功能薄膜工程技术研究中心
2. 香港中文大学物理系

有机太阳能电池太阳能转换效率已经达到 12%，目前迫切需要进一步提高器件效率和器件长期稳定性。可以从材料分子设计工程、器件界面工程和新型柔性衬底设计三个方面努力提高。

我们通过氯化 ITO 阳极界面，显著提高界面的功函数，可以将 PCDTBT:PCBM 体系的开路电压从 PEDOT:PSS 界面上的 0.80V，提高到 0.90V，从而将器件整体效率提高 29%，进而我们发现不同给体材料的正极化态对于器件效率的提升起到重要的作用。我们不使用传统的热退火工艺，仅通过溶液静置效应可以明显提高 P3HT:PCBM 体系的能量转化效率达到 19%，而且这种溶液静置效应针对不同的界面具有一定的选择性。我们探讨了有机太阳能电池 P3HT:PCBM 体系界面退化的机理，金属氧化物界面层可以有效提高器件的空气稳定性。

我们设计合成了高透明、耐高温、耐辐照、功能化聚酰亚胺作为新型柔性器件衬底，这种功能化聚酰亚胺薄膜可以将太阳光中的紫外光部分转换为可见光，被太阳能电池器件吸收利用。这种新型的柔性衬底对于克服紫外光对于有机太阳能电池的不利影响具有重要的实际意义。

关键词：柔性；有机太阳能电池；稳定性

#### A04-39

##### pH 中性、具有自掺杂特性的聚合物太阳能电池阳极界面层材料

崔勇, 许博为, 侯剑辉

中国科学院化学研究所 100190

由于目前通用的阳极界面修饰材料导电性差，使界面层的修饰性能必须强烈地依赖于自身的薄膜厚度，于是当界面层薄膜厚度增加时，器件的光伏性能会出现急剧的下降。这种现象严重地限制了界面层材料在大规模制备中所用的“卷对卷”加工技术，从而限制了其实际应用。为了解决这一科学问题，我们设计、合成了一系列用于 PSC 阳极界面层的水溶/醇溶共轭聚合物。其中，PCP-Na 含有自掺杂特性，并具有较低的

HOMO 能级和很高的电导率。采用 PCP-Na 作阳极界面层，器件的能量转换效率(PCE)达到 9.9%，高于传统的 PEDOT:PSS 修饰的器件(PCE=9.5%)。同时，由于良好的导电性和载流子传输特性，PCP-Na 的修饰性能受膜厚影响较小。当薄膜厚度增加到 50nm 时，器件的 PCE 仍然保持在 7% 以上，使 PCP-Na 界面材料展现出在大规模生产制备中的应用潜力。在此基础上，我们将 PCP-Na 与电子传输材料 ZnO 搭配使用，制备了叠层器件的中间层，并在叠层器件中获得 10.5% 的能量转换效率。

关键词：聚合物太阳能电池；阳极界面层；共轭聚合物；自掺杂

#### A04-40

##### 基于苯并二噻吩的 A- $\pi$ -D- $\pi$ -A 型有机小分子光伏材料的合成及其性能研究

李文琴<sup>1</sup>，吴子华<sup>1</sup>，吴敏<sup>2</sup>，蔡雄敏<sup>1</sup>，王金敏<sup>1</sup>

1. 上海第二工业大学，工学部

2. Department of Chemistry and Molecular Biology, University of Gothenburg

本文设计并合成了以苯并二噻吩为给电子中心，环戊联噻吩为共轭链，绕丹宁酸为末端吸电子基的 A- $\pi$ -D- $\pi$ -A 型对称有机小分子光伏材料 WS-53。光吸收性能测试表明，WS-53 在 500-700 nm 的波长范围内具有明显的光谱吸收，摩尔消光系数达  $13.2 \times 10^4 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ 。电化学性能测试表明 WS-53 的 LUMO 能级与富勒烯衍生物 PC<sub>71</sub>BM 匹配，适用于有机太阳能电池，并具有 1.17V 的理论开路电压。该项工作表明苯并二噻吩结构中 2-乙基己氧基及环戊二噻吩结构中辛基的引入均可有效地改善小分子半导体的溶解性及成膜性能。苯并二噻吩可有效的改善拓宽其光谱响应并增强其吸光能力。以该小分子为给体材料、掺杂 PC<sub>71</sub>BM 受体材料通过溶液加工制备本体异质结光伏器件并经 80°C 退火处理后，可实现 1.04% 的光电转换效率 (Jsc= 4.25 mA cm<sup>-2</sup>, Voc=0.94 V, FF=25.7%)。

关键词：A- $\pi$ -D- $\pi$ -A，苯并二噻吩，小分子，有机太阳能电池，光伏性能

#### A04-41

##### Surface Passivation Effects of PbX<sub>2</sub> (X=Cl, Br, I) on the Performance of Perovskite Solar Cells

Yang Zhang

河南大学

In this work, the surfaces of mp-TiO<sub>2</sub> in perovskite solar cells are passivated with PbX<sub>2</sub> (X= Cl, Br, I) in 0.05 M solution of DMF and DMSO (1:1, v/v). J-V curves of devices with passivated mp-TiO<sub>2</sub> are obtained. The results show that the device without passivation shows the PCE of 16.88% with FF of 0.71, Jsc of 23.7 mA/cm<sup>2</sup>, Voc of 1.00 V. The device passivated with PbBr<sub>2</sub> shows the best PCE of 16.92% with Jsc of 24.4 mA/cm<sup>2</sup>, Voc of 1.00 V, FF of 0.69. However, the device passivated with PbCl<sub>2</sub> shows the best PCE of 13.43% with Jsc of 21.7 mA/cm<sup>2</sup>, Voc of 0.96 V, FF of 0.65. The device passivated with PbI<sub>2</sub> shows the best PCE of 14.94% with Jsc of 21.7 mA/cm<sup>2</sup>, Voc of 1.03 V, FF of 0.67. It can be found that PbBr<sub>2</sub> on the surface of TiO<sub>2</sub> can passivate the interface between TiO<sub>2</sub> and perovskite, while, PbCl<sub>2</sub> and PbI<sub>2</sub> don't passivate the interfaces.

Keywords: Perovskite solar cells; TiO<sub>2</sub>; Surface passivation

#### A04-42

##### 理论设计与研究 Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> 固溶体的结构与性质

杨竞秀，魏苏淮\*

北京科学计算研究中心，材料与能源研究部

钙钛矿结构的 MAPbI<sub>3</sub> 已经成为一种具有巨大潜能的太阳能电池吸光材料。然而，其稳定性以及毒性等因素限制了它的应用潜力。Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> 是一种稳定且无毒的无机双钙钛矿材料，具备一定的发展潜力。该材料带隙为 1.95 eV，且是间接带隙半导体，导致其可见光区的吸收强度低，大大限制了该材料在太阳

能转化领域中的应用<sup>[1]</sup>。

深入研究 Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> 的能带结构，导致其价带顶和导带底不重合的原因在于 Ag<sup>+</sup> 不同于 Bi<sup>3+</sup>，不具有 6s<sup>2</sup> 孤对电子<sup>[2]</sup>。然而，Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> 固溶体的结构中，Ag<sup>+</sup> 以及 Bi<sup>3+</sup> 的位置随机，则有可能极大地改变其能带结构和光学性质。通过 SQS (Special Quasirandom Structures) 可以概率性模拟无序固溶体的模型，从而研究固溶体的结构和性质<sup>[3]</sup>。结合 SQS 以及第一性原理计算，我们发现 Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> 固溶体较 Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> 晶体的带隙窄。完全无序的固溶体的带隙可以降低到 0.5 eV 左右，且材料的带隙随着固溶体的无序程度增大而减小。通过 Monte Carlo 计算，我们估计 Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> 晶体在 1200K 发生有序-无序相变。光学性质的计算结果显示 Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> 固溶体在 1.0-3.0 eV 的区间内的吸收强于 Cs<sub>2</sub>AgBiBr<sub>6</sub> 晶体。

#### A04-43

### Impacts of Nano and Microstructure and Interface on Perovskite Solar Cell Performance

G.Z. Cao

University of Washington, Department of Materials Science and Engineering, Seattle, WA

Organometallic halide perovskite materials have a variety of remarkable optoelectronic properties, such as suitable band gap (1.5eV), high absorption coefficient, long carrier diffusion lengths and lifetimes. All these unique characters pave the way for perovskite-based devices, especially the photovoltaic cells. Its conversion efficiency have surged to 22% in several years and perovskite solar cells have been viewed as the new generation high efficiency thin-film cells at low cost. This presentation will include (1) study of charge transfer and surface potential as a function of surface morphology of TiO<sub>2</sub> compact layer, (2) control the morphology of TiO<sub>2</sub> compact layer, and (3) control of the perovskite film morphology with the specifics detailed below.

The variation of the surface potential, photo-generated voltage, and photocurrent networks of perovskite solar cells (PSCs) with different film topography has been studied by coupling scanning Kelvin probe force microscopy (SKPM) and photoconductive atomic force microscopy (pcAFM). These results suggest that the performance of PSCs can be improved through better control of morphology.

A series of TiO<sub>2</sub> compact films was prepared by sol-gel method with different sol aging time resulting in change of, thickness, surface roughness and compactness. High roughness of the films benefits the light absorption of perovskite layer and the injection efficiency at interface. The films with better compactness perform better hole blocking effect. The Ag@TiO<sub>2</sub> nanoparticles made by polyol solution method are embedded in perovskite films, resulting in an enhanced short-circuit current density due better light absorption and reduced charge recombination.

Both excess CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>Cl and thiourea were introduced into the pristine CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> precursor for antisolvent precipitation at low temperature and fabricated high quality perovskite films with desired morphology, crystallinity and optical properties. CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>Cl exerted significant impacts on the perovskite crystallization process by controlling the delivery speed of PbI<sub>2</sub> from the intermediate phase CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>I<sub>2</sub>Cl. Further tuning the chemical composition with controlled film growth condition resulted in an average power conversion efficiency above 21% under the standard light illumination condition.

#### A04-44

### 高效率反式平面型钙钛矿太阳能电池的研究

朱瑞

北京大学物理学院 100871

钙钛矿太阳能电池近年来展示出巨大的潜力。历经近八年的发展，光电转换效率已经超过 22%。在该领域的研究中，高效率器件的构筑一直是行业关注的热点。围绕高性能电池器件的构筑，我们研究小组从

2014 年开始逐步展开平面型钙钛矿太阳能电池器件性能的优化研究，尤其是在反式结构钙钛矿太阳能电池方面，我们在界面调控、薄膜微纳结构优化等方面陆续展开一系列协同研究工作。经过 3 年多的努力，我们研究小组制备的反式平面型钙钛矿太阳能电池的器件性能也从 15% 逐步提高到 20% 以上。同时，我们也结合同步辐射 X 射线技术，对钙钛矿活性层的结构形成展开原位探测研究，来更好的认知钙钛矿薄膜微结构的形成过程。我将代表我们研究小组，跟各位老师和同学汇报我们近年来在相关方向上所做的一系列努力。

关键词：反式钙钛矿太阳能电池；界面优化；组分调控；结构控制

#### **A04-45**

##### **基于非富勒烯的三元及串联型高效率有机太阳能电池**

张光烨

香港科技大学 000000

将富勒烯衍生物用共轭小分子受体取代是近几年有机聚合物太阳能电池领域发展的一个重要方向。大量的研究成果表明基于高分子聚合物-小分子受体的异质结光伏器件不仅光电转化率高，而且具有稳定性和高吸光性等优势，因此小分子受体有望全面取代富勒烯衍生物在有机太阳能电池中的位置。

然而，为了提高小分子受体在有机溶剂中的溶解性，研究者通常采用官能团修饰的方法。虽然由此得到的小分子溶解性提高了，但是与此同时，在混合薄膜中的小分子的电子迁移率可能无法达到和富勒烯一样的高度。由此导致的结果是受限制的活性层厚度。很多此类器件的活性层只有几十纳米。产生的后果是器件整体的吸光偏弱，由此导致大量光子的浪费以及偏低的短路电流。由于这是分子性质本身引起的问题，所以很难通过传统的形貌控制方法来解决。

一种有效的解决这类问题的方法是将上下两个相同的活性层通过一个中间连接层堆叠在一起，形成一个“自串联”电池。然而一直困扰传统串联电池领域的一个问题是中间连接层的加工方法和热处理温度。对此，我们课题组开发了一种只需低温处理的中间连接层，在此基础上成功制备了聚合物：小分子的非富勒烯太阳能电池。<sup>1</sup> 这种自串联电池可以将电池效率从原来的 9.5% (单层)<sup>2</sup> 提高到接近 11%，同时提供 >2.1V 的开路电压。我们成功证明了此高开路电压可以用来进行光解水。

此外，我还会在报告中报道我们对于单聚合物供体-双小分子受体的三元非富勒烯有机太阳能电池活性层形貌学控制方法的研究结果。我们提出并成功应用了一种形貌学控制的方法，制备了高效三元非富勒烯电池，并将此方法成功运用在多个材料体系中，均得到了类似的结论，证实了方法的有效性，为今后三元非富勒烯太阳能电池的发展提供了新的思路。

关键词：有机太阳能电池；聚合物；小分子；三元；串联；高效

#### **A04-46**

##### **高效钙钛矿型太阳能电池材料和界面调控研究**

孟庆波，石将建，罗艳红，李冬梅

中国科学院物理研究所中国科学院清洁能源前沿研究重点实验室；北京市新能源材料与器件重点实验室；中国科学院物理研究所 100190

钙钛矿型有机卤化铅薄膜太阳能电池以其结构简单、制备成本低廉等优点吸引了众多科研工作者的关注。其光电转化效率在过去几年从 3.8% 迅速提高到 20% 以上，高于非晶硅太阳能电池效率，被 Science 评选为 2013 年十大科学突破之一，展示了广泛的应用前景。如何进一步提升电池的光电转换效率及其稳定性使其走上大规模应用是钙钛矿太阳能电池目前研究的重点。这就需要我们从钙钛矿型薄膜电池的工作机理出发，通过材料制备、结构和界面调控对其进行深入的研究。基于此，我们从电池的电子和离子电荷动力学的角度对该器件的基本物理性质进行了系统研究，并通过器件界面工程和电荷动力学调控等手段获得了高的器件性能，钙钛矿电池效率超过了 21%。另外，我们通过发展钙钛矿薄膜制备新方法，调控钙钛矿薄膜

的结晶形态，有效提高了高效率钙钛矿电池的稳定性。本报告将详细介绍我们研究组在材料、界面调控和电荷传输等研究方面的一些研究成果[1-8]。

关键词：Perovskite Solar Cell; Interface Engineering

#### A04-47

##### **Sb<sub>2</sub>(S,Se)<sub>3</sub> 太阳能电池**

陈涛

中国科学技术大学 230026

硫硒化锑 ( $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$ ) 是一种新型太阳能电池材料，S/Se 比例的变化可以将其带隙在 1.1-1.8 eV 范围调节，且具有很高的光吸收系数（在可见光范围最高可达  $10^5 \text{ cm}^{-1}$  量级）。另外，该化合物对水、氧较为稳定，所含元素较为丰富且环境友好。综合以上特点，硫硒化锑非常适合做太阳能电池的光吸收材料。基于硫硒化锑的太阳能电池目前主要采取敏化型以及平面型的器件结构。本报告将首先介绍硫硒化锑太阳能电池的研究概况及进展，其次将介绍我们课题组近期在硫硒化锑太阳能电池方面的研究工作，主要包括（1）溶液法合成  $\text{Sb}_2\text{S}_3$ ，并构建平面型结构的光电转换器件；（2）通过引入  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  于  $\text{Sb}_2\text{S}_3$  薄膜中，我们建立了具有梯度带隙的  $\text{Sb}_2\text{S}_3/\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  的光活性层，在这种光吸收材料可以同时获得比较高的开路电压和短路电流，最终我们在平面型器件中得到了 5.71% 的光电转换效率。另外，我们初步的研究发现该类型的电池具有良好的稳定性。

关键词：太阳能电池；硫化锑；硒化锑；梯度带隙；光电转换

#### A04-48

##### **钙钛矿微纳单晶的大面积组装及其光电器件应用**

揭建胜

苏州大学 215123

钙钛矿材料具有优异的光电性能，在近年引起极大关注。与多晶钙钛矿薄膜相比，钙钛矿微纳单晶具有更高的晶体质量，长的载流子扩散长度以及更好的环境稳定性，因此成为构筑基于钙钛矿的微纳光电器件的理想材料体系。但钙钛矿微纳单晶通常由溶液和蒸发方法合成，在溶液中和基底上呈无序排布状态，为其光电器件的构筑与集成带来挑战。

我们在近期工作中，发展了多种钙钛矿微纳单晶的图案阵列化排布技术，并在此基础上构筑了基于钙钛矿微纳单晶的集成光电器件。我们采用了简单的刮涂技术对钙钛矿溶液进行刮涂，实现了钙钛矿单晶微米线的大面积高度取向生长。进一步制备了基于钙钛矿微米线阵列的光电探测器，器件响应度达到  $13.57 \text{ A W}^{-1}$ ，探测率达到  $5.25 \times 10^{12} \text{ cm Hz}^{1/2} \text{ W}^{-1}$ 。由于晶界与缺陷减少，器件显示出良好的空气稳定性，在空气中保持 50 天以上性能不发生明显变化。通过在柔性基底上进行刮涂，我们率先构筑了基于钙钛矿微米线阵列的柔性图像传感器，器件显示极好的抗弯曲能力。此外，我们还发展了一种光刻胶模板辅助的钙钛矿纳米线阵列生长技术，通过利用光刻 SU-8 胶作为生长模板，实现了钙钛矿纳米线的高精度定点定位生长，获得的钙钛矿纳米线具有单晶的晶体质量，以及超长的载流子扩散长度。进一步通过调制钙钛矿纳米线的组分，实现了对纳米线阵列光谱响应范围的控制。在此基础上，我们将具有不同光谱响应范围的纳米线阵列进行片上集成，首次验证了集成光电探测器对光强以及光波长的同时检测。

我们的工作证明钙钛矿微纳单晶在高性能光电器件方面具有非常大的应用潜力，通过对微纳单晶的图案阵列化排布，有望突破其在器件集成中的困难，为其在新一代光电器件中的应用奠定基础。

关键词：钙钛矿；微纳单晶；光电器件

#### A04-49

##### **层状铅卤钙钛矿中阴离子掺杂作用的第一性原理研究**

唐刚, 洪家旺  
北京理工大学 100081

近年来, 以有机/无机杂化铅卤钙钛矿材料( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ )作为核心吸光层的钙钛矿太阳能电池引起了大家的广泛关注, 由于它们具有低成本、高光电转换效率和简单的溶液加工等优点。目前基于铅卤钙钛矿材料的光伏器件效率已经超过 22%, 然而其商业化仍然面临着稳定性和有毒性的挑战。因此, 开发无毒或低毒性、稳定的新型铅卤钙钛矿吸光材料具有重要的科学意义。最近多个研究组报道了基于硫氰根离子( $\text{SCN}^-$ )掺杂的新型层状铅卤钙钛矿材料( $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{Pb}(\text{SCN})_2\text{I}_2$ )具有较好的稳定性和有潜力的光电性能, 但是其中硫氰根离子( $\text{SCN}^-$ )掺杂的机理还不十分清晰。采用第一性原理计算, 通过对比不含  $\text{SCN}^-$  离子的虚拟材料体系( $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{PbI}_4$ ), 我们详细研究了硫氰根离子( $\text{SCN}^-$ )掺杂对层状铅卤钙钛矿结构、电学性质、光学性质和力学性质的影响。计算结果显示, 层状铅卤钙钛矿材料( $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{Pb}(\text{SCN})_2\text{I}_2$ )具有较好稳定性部分归功于硫氰根离子( $\text{SCN}^-$ )掺杂引入的更多氢键作用以及更短的  $\text{Pb-S}$  键。 $\text{SCN}^-$  离子的引入极大地加强了 *Rasbha* 劈裂效应, 并且增加了其力学性能, 从而更有利于作为吸光层的应用。同时, 计算结果显示  $\text{SCN}^-$  离子的引入使得  $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_2\text{Pb}(\text{SCN})_2\text{I}_2$  具有较好的压电性能, 扩展了该材料的应用范围。

关键词: 层状铅卤钙钛矿; 硫氰根离子掺杂

#### A04-50

##### 面向中间带太阳电池的宽禁带 II-VI 族多带隙材料的离子注入制备

刘才, 唐楠, 任翱博, 李卫, 武莉莉, 张静全, 冯良桓

四川大学材料科学与工程学院 610065

#### 1. 目的

具有中间能带的多带隙太阳电池是一种第三代新型高效太阳电池。由于处于禁带中的中间带的存在, 这种新型太阳电池能够在单结中实现三种不同能量的跃迁, 像现有的三结太阳电池一样, 极大地拓展光吸收波长范围的同时, 维持高的开路电压, 单倍太阳光和聚光条件下理论能量转换效率分别可达 46% 和 63.2%。宽带隙 II-VI 族半导体是实现中间带太阳电池的理想材料。本研究的目的是为了探寻制备基于 II-VI 族半导体的多带隙材料的有效方法。

#### 2. 方法

本研究采用的主要材料为宽带隙的  $\text{ZnTe}$  和  $\text{ZnSe}$ , 用于形成中间能带的掺杂元素包括氧、氮、铬、钛等。所依据的形成多带隙材料的理论为高失配合金理论和杂质带理论。

本研究采用分子束外延生长作为基质材料的  $\text{ZnTe}$ 、 $\text{ZnSe}$  薄膜。采用离子注入与激光熔融退火相结合的方式, 形成中间能带, 这也是本研究的特色与创新点。用 X 射线衍射、透射电镜、光致发光谱等手段对多带隙材料进行初步表征。

#### 3. 结果

用分子束外延生长获得的  $\text{ZnTe}$  和  $\text{ZnSe}$  具有较好的晶体质量, 在离子注入后的  $\text{ZnTe:X}(X=\text{O}, \text{X}, \text{Cr})$  观察到显著的中间带相关的光发射现象, 而  $\text{ZnSe:X}(X=\text{O}, \text{X}, \text{Cr})$  则没有观察到中间带相关的光发射现象。

#### 4. 结论

用离子注入和激光熔融退火工艺, 初步成功制得了  $\text{ZnTe:X}(X=\text{O}, \text{X}, \text{Cr})$  多带隙材料, 证明了离子注入是一种制备多带隙材料的有效手段。

关键词: 多带隙材料, 中间带太阳电池, 分子束外延, 离子注入

#### A04-51

##### 基于氧化锌纤维和钙钛矿复合结构的高性能的紫外-可见光探测器

曹风人, 李亮

苏州大学 215006



本次工作的主要目的是制备探测性能优异以及制备过程简便的宽光谱响应的光探测器，并为后来的工作提供一点小思路。

本项工作的制备方法简单，通过静电纺丝的在中间被刻蚀掉的 ITO 导电玻璃上电纺氧化锌纳米线，再通过简单的旋涂方式在氧化锌层上覆盖一层钙钛矿薄膜从而作为复合光探测器来进行性能测试，测试过程中 ITO 两边作为导电电极。

从结果上看，对比于纯的氧化锌和钙钛矿，复合光探测器展现出更大的光暗比、更快的响应速度、更高的响应率和探测率。并且在将氧化锌纳米纤维由无序转为有序阵列的过程中，复合光探测器能够更有效的转移载流子和降低载流子的损失，从而展现出更佳的性能。

因此，综上所述，我们成功的提供了一种新的有效的方法来整合无机功能材料和钙钛矿从而制备出高性能低成本的光电探测器。

关键词：氧化锌，钙钛矿，静电纺丝，光探测器，复合材料

#### **A04-52**

##### **高效率高稳定钙钛矿太阳能电池的制备**

徐保民

南方科技大学 518055

目的：新型有机-无机杂化钙钛矿太阳能电池具有原料丰富、成本低廉、光电性质优越、可溶液加工、可低温制备等优点，从而受到全球学术界和产业界的广泛关注，并取得显著进展。但是，要实现钙钛矿太阳能电池的产业化，仍然有许多问题需要解决，包括实现在空气环境中的制备、采用绿色无毒工艺制备高效率电池、提高电池的长期稳定性、使用低成本的空穴传输层材料等，本报告将回顾我们团队在这些方面研究工作的最新进展。

方法：在本报告中，我将介绍利用双极性添加剂实现在空气中制备稳定的钙钛矿电池，利用热辅助旋涂法和界面修饰法制备高效率和高稳定的电池，以及合成新型空穴传输材料以降低钙钛矿电池的成本等。

结果：首先，我们在  $\text{PbI}_2$  溶液中加入 tBP，利用 tBP 具有亲水和憎水的双极性特性以增强钙钛矿层对水的抵抗力，实现在空气中旋涂法制备高稳定的钙钛矿太阳能电池。其次，我们采用热辅助旋涂的方法，即通过调控钙钛矿前驱物溶液中结晶水的比例以及基板和溶液的温度，可以在不使用氯苯和甲苯等有毒溶剂的情况下得到高质量的钙钛矿薄膜，所得器件的效率在 19% 以上，且在 60% 的相对湿度下放置 60 天仍然可以保持 80% 的效率。再次，利用全无机钙钛矿量子点具有不易分解和更好水氧稳定性的特点，我们合成了尺寸可调，具有均匀方块形态的  $\text{CsPbI}_3$  全无机钙钛矿量子点，并将其作为界面修饰材料引入到钙钛矿层与空穴传输层之间，可以同时大幅提高钙钛矿太阳能电池器件的效率和稳定性。最后，我们通过合成价格低廉，性能稳定且导电率高，无需添加剂的新型空穴传输层材料，替代现有的 Spiro-OMeTAD，达到成本控制和性能提高的目标。

结论：实现在空气环境中低成本绿色制备高效率高稳定性的钙钛矿太阳能电池是其走向大规模产业化的必经之路，我们团队在朝向这一目标从几个不同方向开展了研究工作，取得了一定的进展。

致谢：本工作受到南科大科研启动基金、深圳市孔雀团队项目和国家重点研发计划的支持。

关键词：钙钛矿太阳能电池，稳定性，高效率，绿色制备，量子点

#### **A04-53**

##### **从光伏到发光：钙钛矿的尺寸和纬度效应**

钟海政

100081

有机-无机杂化钙钛矿材料是一种可溶液加工的半导体材料，具有成本低、带隙可调等特点，在太阳能电池中有非常优异的表现。同时钙钛矿材料具有天然的有机无机杂化量子阱结构，表现出可调制的窄光谱

发光特性，在显示、激光等领域中也有应用潜力。由于存在大量的本征缺陷，杂化钙钛矿薄膜材料在低密度光激发下的荧光量子效率很低，限制了其在等显示器件中的应用。**如何减少本征缺陷，提高材料的光致发光和电致发光性能是本领域的重要挑战。**我们建立了室温再沉淀和微乳液制备钙钛矿量子点技术，通过对钙钛矿的尺寸和纬度调控发现，获得了颜色可调、发光效率高的钙钛矿量子点；阐明了尺寸减小和有效包覆提高量子点荧光量子产率的物理机制；发展了钙钛矿量子点光转换膜的“原位制备策略”，获得了高性能的光转换膜。在以上基础上，实现了宽色域荧光转换型 LED 器件和显示样机。

关键词：钙钛矿、量子点、发光、显示

#### A04-54

##### 面向柔性高清显示的全无机钙钛矿发光材料与发光器件

曾海波

南京理工大学

目前，照明与显示领域正在迎来品质升级与柔性转型的关键时机。一方面，对于液晶显示，目前用的白光源为蓝光芯片与黄光荧光粉结合的方案，如能添加量子点为光频转换介质，将能极大地改善显色指数、色温、色域，并抑制蓝光伤害。另一方面，针对柔性显示需求，相对于传统的硬质氮化镓蓝光芯片，需要发展新的电致发光三基色材料与柔性 LED 器件，比如至薄至轻至柔的二维半导体、可打印量子点等。

2015 初，新型显示材料与器件工信部重点实验室曾海波团队在国际上首创了全无机钙钛矿全彩发光二极管 LED 器件，被《自然-纳米技术》等专题评论为“首次”、“打破了镉系量子点显示壁垒”，现已发展成为新型显示材料与器件领域的国际前沿热点方向。本报告将介绍我们的最近进展，包括全无机钙钛矿量子点室温合成方法、光致发光多色、高效、色纯等优越性及起源、广色域三基色 QLED 及高显色类太阳健康白光 LED 等新型显示原型器件，以及 2016 年通过表面调控实现的该体系 LED 外量子效率 6.27% 最高记录。

#### A04-55

##### 石墨烯的红外增强吸收及光电响应特性

刘志军<sup>1</sup>，应翔宵<sup>1</sup>，李凯<sup>1</sup>，蒲洋<sup>1</sup>，Jimmy Xu<sup>1,2</sup>，王军<sup>1</sup>，蒋亚东<sup>1</sup>

1. 电子科技大学光电信息学院, 成都 610054 中国

2. 布朗大学工程学院, 普罗维登斯 02912, 美国

作为一种新兴二维材料，石墨烯成为近年来光电子技术领域的研究热点。石墨烯的零能带隙、高载流子迁移率和超快载流子输运等特性让其在高性能红外探测领域具有重要发展前景。然而，受限于单原子层物理厚度，石墨烯的光吸收率仅为 2.3%。石墨烯微弱的光吸收率成为其在红外探测领域的发展瓶颈，限制了探测灵敏度的提升。

为解决石墨烯弱吸收问题，我们设计并制备了石墨烯 Salisbury 屏，其结构由金属-介质层-石墨烯多层结构组成。基于谐振腔的电磁共振作用机理，在近红外波段获得了石墨烯高达 40% 的光吸收，是本征石墨烯吸收的 17 倍。所测得的石墨烯增强光吸收是由电子带间跃迁导致，该实验结果与基于传输矩阵方法的理论计算结果吻合。此外，我们还制备了石墨烯-硅异质结探测器件，光电流谱实验测试表明石墨烯在 1.55 $\mu\text{m}$  波长附近有光电流响应，其产生机理是由石墨烯-硅异质结导致的光伏效应。我们实验揭示的石墨烯光增强吸收和光电流响应特性有助于大幅提高石墨烯探测器的响应度，对于发展新型室温、宽光谱红外探测技术有重要应用价值。

关键词：石墨烯；吸收率；光电响应；红外探测

#### A04-56

##### Mn 掺杂的 ZnO 纳米粒子在改善有机太阳能电池光电性能的作用

冯祖勇，王晓玲，罗洁

太阳能是取之不尽、清洁无污染的能源，所以对太阳能的开发利用受到了广泛的关注。与硅薄膜、染料敏化和无机太阳能电池相比，有机薄膜太阳能电池具有溶液可加工型、成本低、柔性、环保等优点，所以它是将太阳能转换成电能最有优势的器件之一。纳米粒子层的引入，能显著改善太阳能电池的光电性能。纳米 ZnO 具有高的透光率、稳定性好、成本低廉、高的载流子迁移率等优点广泛应用于有机太阳能电池中，但是由于纳米 ZnO 带隙宽、导电能力差，造成器件的短路电流小，限制了器件的光伏性能。

本文针对纯纳米 ZnO 的不足，利用导电性良好的纳米 Mn-ZnO 作为有机太阳能电池缓冲层来提高器件的光伏性能。我们通过简单的低温溶剂热法制备了掺 Mn 的纳米 ZnO 粒子（粒径小于 10nm），采用旋涂法制备了纳米 ZnO/Mn-ZnO 薄膜作为电子传输层的正置结构（ITO/ PEDOT:PSS/P3HT:PCBM/ ZnO(or Mn-ZnO) /Al）太阳能电池器件。实验结果表明，有 Mn 掺杂的正置电池结构中，可获得比纯 ZnO 修饰的器件高出 30% 以上的输出电流，和高出 40% 以上的光电转换效率，这表明 Mn 掺杂的 ZnO 纳米粒子在改善有机太阳能电池光电性能方面比纯 ZnO 纳米粒子更有效。

关键词：有机太阳能电池；纳米氧化锌；锰掺杂；光电转换效率

#### A04-57

##### A Surface Science Approach to Perovskite Material and Solar Cell Research

Yabing Qi

Okinawa Institute of Science and Technology Graduate University (OIST)

In recent years, perovskite solar cells have been attracting enormous attention from academia as well as industry. To fabricate high performance perovskite solar cells, surfaces and interfaces are of paramount importance. My group at OIST is making concerted efforts to investigate relevant surfaces and interfaces in these materials and devices and to develop innovative strategies to improve their performance. In this talk, I will introduce our research progress on real-space atomic-scale imaging of organic-inorganic hybrid perovskite, the vapor-based methods that can be used to fabricate large-area perovskite solar cells and modules, and degradation of perovskite.

Keywords: perovskite solar cells, device physics

#### A04-58

##### Lower-Dimensional Perovskites for Solar Cells and Optoelectronics

Kui Zhao

陕西师范大学

Lower-dimensional organic-inorganic hybrid halide perovskites have recently attracted great attention due to high photo- and electroluminescence and photovoltaic potential. However there is still a lack of understanding of some fundamental material/physical/chemical properties of these lower-dimensional materials, which are critical to optoelectronics and high efficiency solar cells. Here I will discuss our recent studies toward a better understanding and control of chemical structure, crystallization, charge dissociation and transport and device performance for a variety of lower-dimensional  $(A)_2(A')_{n-1}Pb_nX_{3n+1}$  perovskites. Our findings suggest an important role of the chemical structure and precursors crystallization in charge dissociation and transport in quantum-well structure. In addition, we will briefly discuss the relationship of properties-device performance for  $(A)_2(A')_{n-1}Pb_nX_{3n+1}$  film in terms of solar cells and optoelectronics.

Keywords: low dimensional perovskite, solar cell, optoelectronics

#### A04-59

## 光生载流子激发的超氧根离子对甲胺钙钛矿晶体光致荧光增强的作用机制

何祝兵, 冯溪渊, 赵丹丹

南方科技大学 518055

目的: 揭示光对空气中有机无机杂化钙钛矿的作用机制始终是设计和优化钙钛矿光电器件的一项重要工作。尽管大家已经形成共识, 即具有光照射下氧气分子是对钙钛矿光致发光 (PL) 增强效应的主要因素。然而迄今为止, 关于光、氧气分子和钙钛矿材料相互作用的具体机制仍在争论之中。

方法: 在本工作中, 我们基于激光共聚焦显微镜平台, 系统性研究了甲胺钙钛矿单晶在不同辐照光强 (从  $8.7 \mu\text{J}/\text{cm}^2$  到  $217 \mu\text{J}/\text{cm}^2$ )、不同激光波长 (532nm、778nm、808nm 和 980nm)、不同气氛环境 (真空、空气、纯氧、纯氮和纯氩) 以及环境变化、不同深度梯度下的荧光 (PL) 增强效应。值得注意的是, 我们采用处于缺陷辅助复合机制光强 ( $15\text{-}40\mu\text{W}$ ) 的 532nm 激光作为 PL 激发光源。

结果: 首先随着辐照光强的增强, 钙钛矿晶体载流子复合呈现单分子、双分子和俄歇复合三个阶段。室温下 PL 峰中心位置为 776nm。光照波长和环境种类依赖的 PL 增强结果显示了光子生成载流子和氧气分子起到不可或缺的作用。令人吃惊的是, 氧气分子在晶体内 100 微米深度仍然可以导致荧光增强, 而且在短暂无光照条件下载流子没有快速覆灭。这种现象说明仅仅氧原子扩散作用无法解释这种现象。

结论: 基于本工作系统而又直接的数据, 我们提出由光生自由电子与氧气分子发生黏附反应生成的  $\text{O}^{\cdot -}$  离子是钙钛矿材料荧光增强效应的根本原因。它在扩散和晶体场作用下快速渗透, 钝化钙钛矿体内的缺陷 (如甲胺和碘空位、游离离子等), 降低非发光性复合几率, 实现荧光增强。该工作将进一步加深人们对这一重要机制的理解。

关键词: 钙钛矿、荧光增强、缺陷、深度梯度、超氧根离子

## A04-60

### 氟掺杂改善铟镓锌氧化物薄膜晶体管光照稳定性

王大鹏, 刘生忠

陕西师范大学 710119

基于非晶金属氧化物半导体薄膜晶体管 (MOTFT), 如非晶铟镓氧化锌 (a-IGZO), 已广泛应用于新一代有源矩阵液晶显示器和有源矩阵有机发光二极管。虽然 a-IGZO 呈现优良的光学和电学性质, 如高载流子迁移率, 低亚阈值摆幅值, 高可见光透光性, 但是在偏置电压, 温度, 和/或照明应力作用下, MOTFT 长期稳定性和可靠性仍是公认的遗留问题之一。我们发现即使氧化物半导体的带隙大于可见光光子能量, 在可见光照射下 MOTFT 仍然有光生漏电流产生, 这是因为大量的施主氧空位位于宽禁带氧化物半导体。目前, 为提高 MOTFT 光照稳定性, 往往通过引入一种钝化缺陷使其失活的方法实现, 如氢、氮和氟等元素。很多工作通过引入氟提高 MOTFT 的电学性能, 然而氟对 MOTFT 光照不稳定和深缺陷态密度的影响机理还不清楚。本研究在制备 TFT 钝化层掺氟氮化硅的同时引入氟源, 通过热处理实现氟对有源层与有源层和栅绝缘层界面的扩散, 最终实现高性能和高稳定性氟掺杂 IGZO TFT, 如  $14.7 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  的场效应迁移率, 0.19 的亚阈值摆幅, 0.02V 的迟滞。与氧化硅钝化 TFT 相比, 掺氟氮化硅钝化的 TFT 即使在  $100^\circ\text{C}$  温度下其正偏压温度应力下 (PBTS) 也具有明显改善。此外, 在负栅偏压光照应力 (NBIS) 下, 光照引起的正扫描曲线负迁移和开电流衰退和引起反扫描曲线正迁移都得到明显改善, 本研究表明氟钝化 MOTFT 有望应用于新一代显示领域。

关键词: 金属氧化物; 薄膜晶体管; 氟掺杂; 光照稳定性

## A04-61

### Origin of the distinct diffusion behaviors of Cu and Ag in covalent and ionic semiconductors

Hui-Xiong Deng<sup>1</sup>, Jun-Wei Luo<sup>1</sup>, Shu-Shen Li<sup>1</sup>, Su-Huai Wei<sup>1</sup>

1. State Key Laboratory of Superlattices and Microstructures, Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences
2. Beijing Computational Science Research Center

It is well known that Cu diffuses faster than Ag in covalent semiconductors such as Si, which has prevented the replacement of Ag by Cu as contact materials in Si solar cells from reducing the cost. Surprisingly, in more ionic materials such as CdTe, Ag diffuses faster than Cu despite it has a larger size than Cu, which has prevented the replacement of Cu by Ag in CdTe solar cells to improve the performance. But, so far, the mechanisms behind these distinct diffusion behaviors of Cu and Ag in covalent and ionic semiconductors have not been addressed. Here we reveal the underlying mechanisms by combining the first-principles calculations and group theory analysis. We find that the symmetry controlled s-d coupling plays a critical role in determining the diffusion behaviors. The s-d coupling is absent in pure covalent semiconductors but increases with the ionicity of the zinc-blende semiconductors, and the coupling strength of Cu, owing to its higher d orbital energy, is much larger than Ag. In conjunction with Coulomb interaction and strain energy, the s-d coupling is able to explain all the diffusion behaviors from Cu to Ag and from covalent to ionic hosts. This in-depth understanding enables us to engineer the diffusion of impurities in various semiconductors.

Keywords: Cu diffusion, Ag diffusion, first-principles calculations, semiconductors, s-d coupling

#### A04-62

##### Au@MoS<sub>2</sub> 杂化材料制备及其光电分解水研究

李炫华, 魏秉庆, 郭邵晖

西北工业大学 710072

目的: 硫化钼由于其独特的光学和电学性质在光催化领域获得普遍报道。然而, 硫化钼窄的光谱吸收范围和差的光催化稳定性严重制约了其广泛的应用。

方法: 本文基于硫化钼作为催化剂所存在的问题, 对其进行改性研究。首先引入金纳米颗粒, 设计出 Au@MoS<sub>2</sub> 的核壳结构的复合材料; 其次, 加入氧化锌纳米棒, 制备出 Au@MoS<sub>2</sub>-ZnO, 提高催化剂的稳定性。此外, 本文还研究金纳米颗粒的多聚体耦合效应, 制备了 Au multimer@MoS<sub>2</sub>, 进一步对硫化钼进行改性, 使其在可见光下催化效率得到提高。

结果: 测试表明, 其催化产氢量达到了 3737.4  $\mu\text{mol}$ /, 产氢量是当前报道的硫化钼基催化剂中效果最好的; 最令人兴奋的是, 经过了 32h 测试后, 产氢量仍有 3434.7  $\mu\text{mol/g}$ , 仅有 8.1% 的产氢量损失。进一步研究表明, 该三元体系设计有效地解决了硫化物在光催化过程中硫离子和光生空穴结合而产生的光腐蚀失活的问题, 提高了催化剂产氢的稳定性。

结论: 内在的增强机理是通过利用金纳米颗粒的金属表面等离子共振, 拓宽了材料的光吸收范围; 而氧化锌的加入, 有效避免了硫化钼的脱落, 同时有利于激子分离, 显著提高了催化剂的稳定性。此项研究将会为设计金属表面等离子体共振光催化剂和提高硫化物催化剂的稳定性提供了新的思路。

关键词: 金纳米颗粒, 硫化钼, 等离激元, 光电催化

#### A04-63

##### 基于开尔文探针力显微镜的钙钛矿太阳能电池电荷传输机理研究

杨超, 陈倩栋, 杨旭东

上海交通大学 200240

有机无机杂化钙钛矿太阳能电池因其光电转化效率高, 溶液法制备简单等优点, 近年来已经成为研究者们关注的焦点, 具有广阔的发展前景。为了更好地理解钙钛矿电池各层薄膜之间的载流子传输情况, 解释测量过程中的迟滞效应, 进一步提高钙钛矿电池的能量转化效率, 我们使用开尔文探针力显微镜 (KPFM),

分别在光照和黑暗的环境下对两种结构（正型结构 FTO-TiO<sub>2</sub>-CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> 和反型结构 FTO-NiO-CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub>）的钙钛矿电池装置吸收层表面电势进行了研究，并计算出钙钛矿层表面的功函数。实验发现探针位置低的区域电势高，电势图中明亮，功函数高。经过参比电极高定向热解石墨（HOPG）校正后，可以计算出正型结构的功函数在黑暗环境下为 5.207eV，光照下变为 5.128eV；而反型结构的功函数暗态为 4.226eV，光照下变为 4.2eV。这种现象可以解释为光照后产生了大量的光生载流子，致使钙钛矿层表面功函数更接近真空能级。对于正型结构，由于具有电子传输层，电子传输出去而钙钛矿层中空穴得到积累，形成了 p 型掺杂，因此功函数较高。对于反型结构则结论相反。在连续光照黑暗变换条件下的实验中，正型结构在光照下电势下降约 100 mV，无光后电势则立即返回至原始值；反型结构在首次出现电势变化后，无论光照条件如何变化，电势变化不明显。这是因为反型结构中空穴传输速度快，光照开始后空穴由钙钛矿吸收层传至 NiO 层，光照结束后空穴立即传回，因而电势变化不明显。而在正型结构中在光照结束时钙钛矿层有电子被缺陷捕获，产生的额外的附加电场，导致了钙钛矿层中发生了离子迁移，致使电势变化表现出上述区别。

在光照和黑暗的不同环境下，由于载流子在两种结构的界面之间传输特性不同，致使钙钛矿吸收层表面电势发生了规律性变化。通过研究电势变化，可为 TiO<sub>2</sub> 电子传输层的正型结构中出现的迟滞现象提供有力依据，进而为提高电池性能提供理论基础。

关键词：电荷传输；迟滞；表面电势；钙钛矿太阳能电池；开尔文探针力显微镜

#### A04-64

### 钙钛矿——神奇的光伏光电材料

刘生忠

陕西师范大学

钙钛矿材料具有高载流子寿命、高电荷迁移率以及极低的缺陷态密度，有望成为光伏、激光、发光等领域的革命性材料。在高效柔性钙钛矿太阳能电池方面，我们通过控制钙钛矿薄膜制备过程中的反应温度调控了产物品粒大小和薄膜晶界数量，实现了对钙钛矿薄膜光电性质的调控，并采用可低温溶液加工的电子传输材料制备高效率柔性钙钛矿太阳能电池。利用固态离子液作为电子传输材料，结合光电性能较好的 (HC(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>PbI<sub>3</sub>)<sub>0.85</sub>(CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbBr<sub>3</sub>)<sub>0.15</sub> 复合钙钛矿材料制备的柔性钙钛矿太阳能电池的效率达到 16.09%，高于之前柔性器件的最高效率。在单晶钙钛矿及其器件方面，采用流动液相反应体系通过空间限域的方法生长出了厚度和形状可控的高质量超薄单晶钙钛矿薄片，最薄可达到 150μm，并对其光学性能、电学性能和稳定性等进行了表征分析，并在该单晶薄片上制备了集成式单晶光探测器阵列，其性能远远高于基于多晶钙钛矿薄膜的光探测器。此外，还采用反温度结晶的方法成功的生长了大尺寸的高质量 HC(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>PbI<sub>3</sub> 钙钛矿单晶，并将单晶切割成薄片用于高效光探测器阵列的制备。

#### A04-65

### 薄膜太阳能电池中分级结构纳米 TiO<sub>2</sub> 的表面态研究

郑郑家伟，丁有才，胡林华

中国科学院合肥物质科学研究院 230088

半导体纳米材料的表面态影响着多孔薄膜电极内电荷的传输和复合行为。TiO<sub>2</sub> 纳米多孔薄膜因为其良好的物理性质而常作为太阳能电池的电子传输层。由于 TiO<sub>2</sub> 多级结构微米球的应用，钙钛矿和染料敏化太阳能电池的效率大幅提升。TiO<sub>2</sub> 多级结构微米球大的比表面积产生的表面态对电子的传输复合动力学过程会产生较大的影响，其内部的表面态数量及分布严重影响着太阳能电池的性能。

论文工作主要是利用两步法合成一种分级结构 TiO<sub>2</sub> 微米球，基于基于开路光电压衰减法和电荷抽取等方法，结合薄膜电池的多孔特性，探究了 TiO<sub>2</sub> 多孔薄膜的表面态数量及其在禁带中的分布情况。

结果表明,通过 TiO<sub>2</sub> 微米球和传统小颗粒的研究发现, TiO<sub>2</sub> 微米球薄膜的表面态能级分布较浅,最终导致电子在 TiO<sub>2</sub> 微米球薄膜中拥有一个较高的收集效率。孔隙率的增加和球径的降低均会使薄膜的表面态的态密度上升,通过对各种微结构 TiO<sub>2</sub> 微米球的表面态和电子传输复合动力学结果研究,得到了一个较优微结构的 TiO<sub>2</sub> 微米球。深入研究了不同条件下 TiO<sub>2</sub> 微米球薄膜的表面态数量、态密度、带边情况、电子传输复合动力学行为。微米球结晶性的改善在一定程度上有利于薄膜内部表面态数量的降低,但由于晶粒的长大,微米球的比表面积降低,在改善电子转移的同时也会降低光生电子浓度。通过理论和实验的结合,系统地研究了表面态对电子传输复合行为的影响机制。

关键词: TiO<sub>2</sub>; 分级结构; 表面态; 太阳电池

#### A04-66

##### 二维材料在钙钛矿太阳电池中的应用

刘治科

陕西师范大学 710119

(1) 最早将 CVD-石墨烯作为电极材料用于钙钛矿电池,制备了超薄的柔性钙钛矿电池。器件在曲率半径为 1.75 mm 的圆柱上弯曲 500 次,效率仍保持在 85% 以上。(2) 利用石墨烯代替有机绝缘材料作为阻挡层用于钙钛矿电池,发现石墨烯可以有效地阻挡水氧和金属电极的扩散,实现钙钛矿电池水氧稳定性和热稳定性的提高。(3) 利用新型二维材料作为电子传输层代替二氧化钛,低温制备了钙钛矿电池,并实现了低温柔性钙钛矿器件的制备。

关键词: 钙钛矿; 石墨烯; 柔性; 稳定性

#### A04-67

##### 气相辅助溶液法制备钙钛矿太阳电池研究

姚建曦, 许佳, 陈晶, 肖黎, 戴松元

华北电力大学 102206

近年来,有机无机卤化物钙钛矿太阳电池吸引了广泛的关注,在过去的六年中其光电转化效率由 3.8% 提高到 22.1%。目前有多种方法被用来制备钙钛矿薄膜。除了溶液法之外,气相沉积方法也是一种行之有效的方法。同传统的溶液法比较,气相沉积可以降低溶液过程中 PbI<sub>2</sub> 和 CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>I 的快速反应速率,避免发生一些附生的结构转变,进而对钙钛矿薄膜表面形态进行优化。我们通过采用低压气相辅助溶液法系统地研究了 A 位阳离子和 X 位卤素对钙钛矿结构和光伏性能的影响。与溶液法制备的钙钛矿相比,采用低压气相辅助溶液法制备的薄膜在晶体结构演变和载流子传输机制呈现了不同的特点。我们在混合卤素的平板钙钛矿太阳电池中实现了大于 18% 的光电转化效率。

关键词: 钙钛矿太阳电池; 光电转换效率; 气相辅助溶液法

#### A04-68

##### 低压蒸汽退火法制备高效稳定的平面异质结型钙钛矿太阳能电池

李严波

电子科技大学 610054

平面异质结型钙钛矿太阳能电池具有结构简单的优点,被认为更有可能实现商业化应用。<sup>[1]</sup>但是,实现在连续工作条件下保持高效和稳定的平面异质结型钙钛矿太阳能电池仍然是很大的挑战。我们采用低压蒸汽退火 (low-pressure vapor annealing) 的方法在空气中制备出大面积均匀、成分可控、光电性能优异的钙钛矿薄膜。<sup>[2-4]</sup>同时,通过调控 TiO<sub>2</sub> 电子传输层中的空穴陷阱缺陷来提高其光电导率和降低其光催化活性,进而实现高效率和高稳定性的平面异质结型钙钛矿太阳能电池。<sup>[5]</sup>由于 TiO<sub>2</sub> 电子传输层电子采集效率的提升,使得制备的平面型电池的 IV 曲线迟滞效应也得到了缓解。通过上述方法制备的器件的效率最大值在

反向扫描、正向扫描和稳态条件下分别为 19.1%、17.1%和 17.6%。同时，由于在 TiO<sub>2</sub> 电子传输层中引入了空穴缺陷，这使得 TiO<sub>2</sub> 在紫外光激发下产生的空穴被限制在空穴陷阱当中，从而降低了 TiO<sub>2</sub> 的光催化活性并提升了器件的稳定性。经过 100 个小时的光照和测试，该平面型钙钛矿太阳能电池的效率仍然维持在 15%以上。以上的结果证明使用低压蒸汽退火方法和通过调控 TiO<sub>2</sub> 的缺陷在实现低成本、高效率的平面型钙钛矿太阳能电池方面有着巨大的潜力。

关键词：平面异质结型钙钛矿太阳能；低压蒸汽退火法；TiO<sub>2</sub> 电子传输层；空穴陷阱

#### A04-69

##### 聚合物太阳能电池界面调控

张坚，徐聪，胡勇，张哲冷，熊健，蔡平，黄有欢

桂林电子科技大学 541004

电极界面对光电器件的性能起着至关重要的作用，优异的界面特性是实现高性能器件的必要前提条件。聚合物太阳能电池中，普遍通过在电极与有机半导体的界面引入界面材料，进而提高载流子的注入/导出效率提高器件的性能。

在阳极，利用氧等离子体对氧化石墨烯进行处理，将氧化石墨烯的功函数提高到 5.2 eV，采用光化学反应制备出氯化-氧化石墨烯，实现其功函数从 4.9eV 到 5.2eV 的连续可调。采用高功函数的氧化石墨烯或氯化-氧化石墨烯薄膜作为阳极界面材料，将聚合物太阳能电池的效率提高了 15%到 30%。在阴极，离子液体(IL)被作为界面材料应用到聚合物太阳能电池中。采用离子液体氯化 1-苄基-3-甲基咪唑(BenMeIm-Cl)和 1-丁基-3-甲基咪唑四氟硼酸盐 ([BMIM]BF<sub>4</sub>) 作为阴极界面层用于反式有机太阳能电池中。利用 IL 与活性层材料表面能的差异，采用一定比例的氯化 1-苄基-3-甲基咪唑离子液体与 PTB7:PC<sub>71</sub>BM 等形成共混溶液，一次旋涂制备出反式聚合物太阳能电池的界面层和活性层，已制备出效率>8%的 PTB7:PC<sub>71</sub>BM 太阳能电池。进一步用离子液体修饰 ZnO，制备了 ZnO/IL 复合界面层。将 ZnO/IL 复合阴极界面层应用到 PTB7-Th:PC<sub>71</sub>BM 的反式构型器件中，器件的最高效率达到 10.15%。

关键词：聚合物太阳能电池；界面调控；石墨烯；离子液体

#### A04-70

##### 基于溶液法的新型量子点太阳能电池

马万里

苏州大学功能纳米与软物质研究院 215123

因为可以大幅度降低生产成本和实现快速大面积生产，基于溶液法的新型太阳能电池在近期得到了迅速的发展。目前的此类电池材料包含有机，钙钛矿和量子点材料。其中有机和钙钛矿材料都得到了广泛的关注和大量的研究。相比之下，由于技术门槛比较高，量子点太阳能电池的关注目前还不够多。

基于 PbX 系列的无机胶体量子点具有吸收率高，电荷传导性和稳定性好的特点。另外由于具有很强的量子限域效应，PbX 量子点的吸收可以很容易的从可见调到红外，量子点薄膜不用高温加热就可以实现电荷高效传输，同时也展示出明显的多激子产生效应。因此，基于上述优点，量子点太阳能电池的理论效率可以更高，目前的最高效率已经超过 12%，和有机太阳能电池相当。

现在量子点太阳能电池的关键技术只被国外几家研究小组掌握，国内在此方向上的研究基本上处于空白。我们近期在量子点太阳能电池方面做了大量系统的工作，包含材料合成，器件结构和形貌优化。

我们在有机-量子点杂化，量子点叠层和量子点正置器件方面都做到了世界领先。

关键词：太阳能电池；量子点；溶液法

#### A04-71

##### 单晶钙钛矿 CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbX<sub>3</sub> (X=Cl, Br, I)材料：生长、性质和应用



杨周<sup>1</sup>, 刘渝城<sup>1</sup>, 刘生忠<sup>1,2</sup>

1. 陕西师范大学 材料科学与工程学院
2. 中国科学院大连化学物理研究所

有机无机杂化钙钛矿材料是一类优异的半导体材料, 被认为是制作太阳能电池、LED、光电探测器的理想载体。为进一步优化、提高器件的性能, 需要深入研究材料自身的光电特性, 从理论上给出器件的极限性能及优化途径。

单晶材料由于其较低的缺陷态密度和完美的周期性原子排列, 被认为是研究材料性能的最佳载体。在本报告中, 将主要阐述单晶生长的机理、材料的光电性质和器件应用。

研究表明: 1. 对于不同的卤化物钙钛矿材料, 需要采用不同的有机溶剂进行生长, Cl、Br、I 基钙钛矿材料分别需要使用 DMSO、DMF、GBL 作为溶剂, 否则将无法获得钙钛矿晶体; 2. 钙钛矿材料在有机溶剂中的溶解度随着温度的升高而降低, 因此可以采用升温析晶的方法获得钙钛矿晶体; 3. 高分辨 X 射线衍射结果表明, 升温析晶法获得的单晶具有优异的结晶特性; 4. 暗态 I-V 测试结果表明, 钙钛矿晶体的缺陷态密度在  $10^{10}/\text{cm}^3$  量级, 可与半导体级 Si 材料媲美; 5. 单晶光电探测器具有快速响应特性。

关键词: 钙钛矿; 缺陷态密度; 光电探测器

## 墙展

### A04-P01

#### 基于钙钛矿 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ 的高效光电探测器的制备

丁洁, 方华靖, 廉志鹏, 严清峰

清华大学 100084

光电探测器以其在图像传感, 光学通讯, 环境模拟等领域的广泛应用而为人们所熟知。目前, 具有更高效、宽波段、快响应、多功能的探测器仍然处于研究中。钙钛矿材料作为一种高光学系数, 长载流子扩散长度, 长载流子寿命成为一种极具吸引力的新型光电半导体材料。基于此, 我们展开了一系列基于钙钛矿材料的光电探测器研究。

利用溶液缓冷法制备厘米尺寸的钙钛矿单晶, 并通过电极蒸镀的方法, 制备光电探测器。在不同光强及 375~808nm 波段下, 测量器件的光电响应并由此计算其响应度和外量子效率。将探测器与纳米发电机结合, 得到一个不需外加偏压的探测器。设计合适的肖特基结, 利用电极与单晶的不对称电势差, 制备一个完全自驱动式的 Au/Perovskite/Al 探测器。在纸基底上制备钙钛矿薄膜光电探测器, 将纸张进行折叠, 由此得到一个三维的探测器。

通过溶液缓冷法得到了尺寸为  $12 \times 12 \times 7 \text{mm}$  的钙钛矿单晶。所制备的光电探测器展示了  $953 \text{A W}^{-1}$  的响应度和  $2.22 \times 10^5\%$  的外量子效率。比之前基于薄膜的探测器高了  $10^2$  个量级。与纳米发电机结合, 响应度为  $196 \text{V}(\text{mW cm}^{-2})^{-1}$  的探测器在没有外加偏压的情况下正常工作, 探测范围为  $10 \mu\text{W cm}^2$  到  $100 \text{mW cm}^2$ 。

Au/Perovskite/Al 探测器利用基于肖特基结的内建电场能够在零偏压的情况下工作。该器件在  $1 \times 10^8 \text{W cm}^2$  的光强下响应度为  $0.24 \text{A W}^{-1}$ 。同时展现了一个极快的  $71 \mu\text{s}$  响应速度。在纸基底上的钙钛矿薄膜探测器拥有  $4.4 \text{mA W}^{-1}$  的响应度和 32 的开关比, 响应速度  $< 10 \text{ms}$ 。同时具备一个好的机械柔韧性。另外, 该三维探测器首次展现了空间上的识别能力。

在钙钛矿单晶表面制备了高灵敏度、宽波段、快响应的光电探测器。通过与纳米发电机结合、不对称电极制备, 得到自驱动式的光电探测器。此外, 通过折叠纸基光电探测器, 制备了拥有空间探测能力的三维光电探测器。

关键词: 钙钛矿; 光电探测器; 自驱动; 三维

#### A04-P02

##### 通过阴极界面工程提升平面异质结 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ 钙钛矿太阳能电池的性能

马靖

西安电子科技大学 710071

目的：通过界面工程有效的提高平面结构  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$  有机-无机杂化钙钛矿太阳能电池的性能。

方法：本文通过一步溶液法成功制备平面结构  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$  有机-无机杂化钙钛矿太阳能电池薄膜，其中  $\text{TiO}_2$  和 spiro-OMeTAD 分别作为电子传输层和空穴传输层，并通过对  $\text{TiO}_2$  界面进行  $\text{TiCl}_4$  和 PCBM 处理提高平面结构钙钛矿太阳能电池的性能。

结果：通过结合  $\text{TiCl}_4$  和 PCBM 处理，最终实现了 15.21% 的能量转换效率 (PCE)，1.09V 的开路电压 ( $V_{oc}$ )，22.50 mA/cm<sup>2</sup> 的短路电流密度 ( $J_{sc}$ ) 以及 65.71% 的填充因子 (FF)。

结论：实验结果证实  $\text{TiCl}_4$  处理可以有效地降低  $\text{TiO}_2$  表面粗糙度，减少表面缺陷，提升钙钛矿薄膜的结晶度，从而有效的提升器件的电流，电荷提取及收集效率。此外 PCBM 的处理可以改善  $\text{TiO}_2$  与钙钛矿薄膜的能级接触，减少界面势垒引起的电压损失。结合  $\text{TiCl}_4$  和  $\text{TiO}_2$  共同处理，能够有效的提高平面结构  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$  有机-无机杂化钙钛矿太阳能电池的性能。

关键词：有机-无机杂化钙钛矿；太阳能电池；平面正向结构；界面工程

#### A04-P03

##### PbCl<sub>2</sub> 致稳定立方相 $\text{CsPbBr}_3(\text{Cl})$ 钙钛矿太阳能电池的光电性能研究

李博，张亚男，张芦元，尹龙卫

山东大学 材料科学与工程学院 材料液固结构演变与加工教育部重点实验室 250001

众所周知，有机无机杂化钙钛矿电池虽然具有优异的光电性能，但是其稳定性差，一定程度上制约其商业化大规模生产。无机钙钛矿电池——因其突出的光电性能和良好的稳定性，使其成为继有机无机杂化钙钛矿电池之后又一新的研究热点。晶体结构是影响钙钛矿电池性能关键性因素之一，然而，目前对于无机钙钛矿  $\text{CsPbBr}_3$  材料的晶体结构的研究，以及其与光电性能的关系还没有被报道。

在本文中，我们以  $\text{PbCl}_2$  为 Cl 源，通过连续沉积技术，首次将 Cl 引入  $\text{CsPbBr}_3$  材料中并组装太阳能电池。通过对  $\text{PbCl}_2$  在薄膜形貌、晶体结构、光学及光电性能作用的系统研究，我们发现， $\text{PbCl}_2$  既可以调控晶体结构（驱动斜方相向立方相转变）也可以修饰界面（加速电子提取速率）。相比于斜方相的  $\text{CsPbBr}_3$ ，Cl 掺杂的立方相的  $\text{CsPbBr}_3(\text{Cl})$  具有更高的电子寿命、载流子扩散长度和电子提取效率。

制备的 Cl 掺杂的立方相的  $\text{CsPbBr}_3(\text{Cl})$  太阳能电池表现 8.47 mA cm<sup>-2</sup> 的电流密度和 6.21% 的光电转换效率，相比于斜方相的  $\text{CsPbBr}_3$  太阳能电池提高近一倍。此外，其湿度稳定性和热稳定性相比于有机无机杂化钙钛矿  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  太阳能电池均提高明显。

关键词： $\text{CsPbBr}_3$ ； $\text{PbCl}_2$ ；钙钛矿太阳能电池；载流子寿命；光电转换效率

#### A04-P04

##### 反蛋白石的电子传输层用于制备稳定的钙钛矿太阳能电池

刘洲，孟轲，许乔飞，胡有地，吴龙龙，王啸，陈刚

上海科技大学 200120

目的：本文旨在通过纳米尺度的结构改性，提高钙钛矿太阳能电池的稳定性。

方法：实验方法是采用简单的气液界面自组装的方法制备了大面积规则有序的聚苯乙烯球纳米阵列，之后用此规则有序的模板通过旋涂法和喷雾热解的方法依次制备了氧化锡和二氧化钛层，并形成了在纳米尺度上高度有序的电子传输层。

结果：将此电子传输层用于制备钙钛矿太阳能电池后得到了光电转化效率在 13.65% 的电池。同时经研究发现，该结构对钙钛矿本身在空气环境中的稳定性有很好的提升。

结论：本文首次制备了二维有序的反蛋白石氧化锡结构，并将其运用到了钙钛矿太阳能电池中，取得了不错的效率，且此结构对钙钛矿在空气中的稳定性有不错的提高。

关键词：纳米；氧化锡；钙钛矿；稳定性

#### A04-P05

##### 低温 Nb 掺杂 TiO<sub>2</sub> 提高钙钛矿太阳电池的效率和稳定性

殷冠南

陕西师范大学 710119

电子传输层的导带能量、电导率、迁移率和电子缺陷态等参数对平面钙钛矿太阳电池的效率和稳定性都至关重要。然而，使用最为广泛的电子传输层-TiO<sub>2</sub> 往往需要在高温下制备，并且具有低的电导率和高缺陷态密度等不良电学性能。前期的研究发现，通过元素掺杂可有效提高 TiO<sub>2</sub> 的电学性能以及基于 TiO<sub>2</sub> 的钙钛矿太阳电池的光伏性能。然而已经报道掺杂方法往往需要在高温下进行，不但使器件的制备成本增加也不利于柔性器件的制备。

本研究通过一步化学水热法实现了低温(70 °C)Nb 掺杂 TiO<sub>2</sub> 薄膜的制备，并将其成功用于平面钙钛矿太阳电池的电子传输层。

与纯 TiO<sub>2</sub> 相比，Nb 掺杂 TiO<sub>2</sub> 具有较高的导电性、迁移率以及较低的缺陷态密度，能更有效的实现光生电子的提取和传导。

基于 1% Nb 掺杂 TiO<sub>2</sub> 的钙钛矿太阳电池取得了超过 19% 的光电转换效率，在空气中放置 1200 h 或在手套箱中 80°C 退火 20 h 后，器件效率仍保持在其初始效率的 90%。

关键词：钙钛矿太阳电池；Nb 掺杂 TiO<sub>2</sub>；电子传输层；空气稳定性和热稳定性

#### A04-P06

##### 基于石墨烯电极的柔性超薄钙钛矿电池制

刘治科<sup>1,2</sup>，尤朋<sup>1</sup>，李娟<sup>2</sup>

1. 香港理工大学应用物理系
2. 陕西师范大学材料科学与工程学院

轻质柔性钙钛矿太阳电池在许多领域（如：可穿戴电子产品）具有潜在的应用价值，因此引起了科研工作者的广泛关注。传统的导电氧化物透明电极刚性易碎，不能实现高度柔性钙钛矿电池的制备。

本研究中我们通过低温溶液法制备了基于石墨烯电极的柔性超薄钙钛矿太阳电池。

即在 20μm 厚的 PET 衬底上制备了结构为 PET/石墨烯/P3HT/CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub>/PC<sub>71</sub>BM/Ag 的柔性器件，该器件获得了 11.5% 的光电转化效率，在半径为 1.75 毫米的圆柱上弯曲测试 500 次，效率仍可保持在 85% 以上。

此外，器件的功率和质量比达到 5W/g，远远高于传统的无机太阳电池。该工作为制备柔性钙钛矿太阳电池以及其他柔性光电器件提供了一种新方法。

关键词：石墨烯，柔性电极，钙钛矿太阳能电池，透明电极

#### A04-P07

##### 溶液法制备 Nb:SnO<sub>2</sub> 作为高效平面钙钛矿电池的电子传输层

任小东<sup>1</sup>，杨栋<sup>1</sup>，杨周<sup>1</sup>，刘生忠<sup>1,2</sup>

1. 陕西师范大学
2. 中国科学院大连化学物理研究所

电子传输层是平面型钙钛矿电池的重要组成部分，它能够促进载流子的分离和电子的传输，因此开发新型高效的电子传输层对提高钙钛矿电池器件的性能是非常必要的。

我们用低温溶液旋涂法制备了一种高效的 Nb 掺杂  $\text{SnO}_2$  ( $\text{Nb}:\text{SnO}_2$ ) 薄膜作为钙钛矿电池的电子传输层。

相比于纯的  $\text{SnO}_2$ ，基于  $\text{Nb}:\text{SnO}_2$  电子传输层钙钛矿电池的光电转换效率从 15.13% 增长至 17.57%。

优异的电池性能归功于  $\text{Nb}:\text{SnO}_2$  薄膜接触的 光学和电学性能，SEM 和 AFM 分析表明我们制备的  $\text{Nb}:\text{SnO}_2$  薄膜平整、致密、粗糙度小，为制备高质量的钙钛矿吸收层提供了一个有利的平台。I-V 测试表明 Nb 掺杂能够有效的提高  $\text{SnO}_2$  薄膜的电子迁移率 ( $1.02 \times 10^{-4} \sim 2.16 \times 10^{-4} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ) 和导电性，降低缺陷态密度 ( $2.39 \times 10^{15} \sim 1.74 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ )，提高器件的光电流。J-V 测试表明  $\text{Nb}:\text{SnO}_2$  电子传输层能够有效的提高载流子的传输和有效收集，减小器件的串并联电阻，提高器件的填充因子 (0.659 ~ 0.727)，提高电池的性能。进一步用光致发光和瞬态荧光光谱对器件进行表征说明  $\text{Nb}:\text{SnO}_2$  电子传输层能够极大的增强电子的提取和有效的抑制载流子的复合，最终提高钙钛矿电池的性能。

关键词：钙钛矿；太阳电池；电子传输层； $\text{Nb}:\text{SnO}_2$

#### A04-P08

##### SCN-掺杂的中性色，半透明钙钛矿太阳能电池

陈思，陈补鑫，邹德春

北京大学 化学与分子工程学院 100871

本工作报道了一种简单的溶液旋涂退火的方式制备中性色，半透明钙钛矿太阳能电池。

将 SCN<sup>-</sup> 引入前体溶液，旋涂 SCN<sup>-</sup> 掺杂的前体溶液形成钙钛矿前体“岛”的微结构阵列，进一步退火制备具有离散岛状和较低覆盖度的钙钛矿膜。对电极选用半透明的 Ag 电极保证器件整体的透光性及中性色。器件结构为 FTO/t-TiO<sub>2</sub>/perovskite/Spiro/Ag。

高度离散的岛状钙钛矿结构确保了电池的良好透光率，使得光可以有效的从岛状钙钛矿间隙间穿过，实现了对不同波长的光线的均匀吸收。在保证高透光率的同时，实现了透过光的中性色。在器件（不含对电极）平均透光率为 50% 的同时实现了电池最高 2.4% 的器件效率，为现有报道最优值。结合半透明的 Ag 对电极，制备得到了具有高透光率的中性色半透明钙钛矿太阳能电池完整器件。

将 SCN<sup>-</sup> 引入了前体溶液，通过旋涂法退火可以制备得到离散岛和较低覆盖度的钙钛矿膜。结合半透明的 Ag 对电极。制备得到了具有高透光率的中性色半透明钙钛矿太阳能电池，在建筑一体化光伏中具有广泛的应用前景。

关键词：SCN<sup>-</sup>掺杂；中性色；半透明；钙钛矿太阳能电池

#### A04-P09

##### 醇溶性小分子空穴传输材料及在钙钛矿太阳电池中的应用

姜月，彭火军，麦润昇，高进伟

华南师范大学 510006

钙钛矿太阳电池(PSCs)以其简单的制备工艺和高的光电转换效率(PCE)成为最受瞩目的前沿科技之一。尽管目前最高的光电转换效率已经超过 22%，但是其仍面临着诸多挑战，例如对水、氧、光辐射的稳定性。虽然无空穴传输材料(HTMs) PSCs 的光电转换效率达到 10%，但是这层界面材料在提升 PCE 以及保护材料方面起着重要作用。本文旨在研发一系列醇溶性小分子无掺杂型空穴传输材料，将其应用于钙钛矿太阳电池中，提高光电转换效率及稳定性。

本人前期的工作已经证实二苯胺结构单元上的烷基侧链可以有效的调节材料中分子的自组装性能，而对聚集态下材料的电学性能具有重要影响。因此，我们设计、合成了一系列基于二苯胺结构单元的小分子空穴传输材料。通过引入脂肪连来提高化合物的醇溶性。

单晶 X 射线衍射、紫外可见吸收光谱、循环伏安曲线以及空间电荷限制电流法表征了材料的分子结构以及光学、电学性能。建立了清晰的结构-性能关系。最终应用于 n-i-p 型钙钛矿太阳能电池，表征电池的光伏特性与稳定性。

由此可见，本文成功设计、合成了一系列醇溶性的小分子空穴传输材料，通过侧链调控的方法调节分子聚集状态，提高空穴传输效率，最终提高了钙钛矿太阳能电池光电转换效率及稳定性。

关键词：空穴传输材料；钙钛矿太阳能电池；二苯胺

#### A04-P10

##### 单层蜂巢状纳米支架用于大面积可穿戴太阳能电源

胡笑添<sup>1,2</sup>, 李风煜<sup>1</sup>, 宋延林<sup>1</sup>

1. 中国科学院化学研究所
2. 中国科学院大学

金属有机钙钛矿太阳能电池与可穿戴电子器件的研究进展，使得柔性可穿戴太阳能电源成为当前研究的热点领域。然而，钙钛矿层的弯折裂纹与柔性器件的光吸收率低，是制约着其发展大面积高效率柔性器件的关键要素。

本工作针对以上问题，以单层聚苯乙烯光子晶体薄膜为模板，调控薄膜表面浸润性为手段。制备单层蜂巢状纳米支架应用于柔性器件，从而构建空穴传输层作为力学缓冲层和光学谐振腔。

研究表明，巢状纳米结构可以有效释放器件弯折时的应力，并作为支架诱导上层钙钛矿薄膜结晶。同时，该结构作为光学谐振腔可对整个器件进行光富集调控，从而提高器件的光吸收率。引入蜂巢状纳米支架后，所制备一平方厘米的柔性钙钛矿太阳能电池光电转换效率高达 12.32%。进一步研究发现，该电池具备较高的可弯折性，并将其组装成模组制备可穿戴太阳能电源。

本研究工作，针对柔性可穿戴太阳能电源，提出了通过引入纳米支架提高其性能。为今后研究、设计新型太阳能电池和可穿戴电子提供了新的思路和方法

关键词：可穿戴电子；钙钛矿太阳能电池；纳米支架

#### A04-P11

##### Understanding the evolution of photovoltaic performance in perovskite/spiro-OMeTAD solar cells

宋镇, 刘江, 梅军

中物院成都科学技术发展中心 610200

近年来，钙钛矿太阳能电池以其高效的能量转换效率（PCE）成为世人关注的焦点。但钙钛矿器件本身仍存在许多问题不甚明了，有待进一步研究。在这里，我们对钙钛矿太阳能电池中空穴传输层（HTL）的相关性能演变进行了详细的研究。

实验中我们基于未经掺杂的 spiro-OMeTAD、Li<sup>+</sup> 掺杂的 spiro-OMeTAD 以及 FK209 掺杂的 spiro-OMeTAD 作为 HTL 制备了三种不同的钙钛矿太阳能电池，并对电池的电流-电压（J-V）曲线在空气中随时间的变化情况进行了详细的研究。此外针对三种不同的 spiro-OMeTAD 薄膜，对其薄膜电阻、表面电势、微观形貌等进行了测量。

我们发现对于使用未经掺杂的 spiro-OMeTAD 和 Li<sup>+</sup> 掺杂的 spiro-OMeTAD 制备的钙钛矿电池而言，新鲜的器件均表现出了 S 型的 J-V 曲线，对应着低的填充因子（FF）。当器件暴露在空气中后，其 FF 和 PCE 均有了显著地增长。接下来，我们在 spiro-OMeTAD 中掺杂了一种 Co<sup>3+</sup> 盐（FK209），在未经暴露空气的情况下，相应器件便表现出了较好的光电性能。

相关研究表明，空气中的水、氧等会对 spiro-OMeTAD 起到氧化的作用，使其电导率显著提高，从而使器件性能得到明显改善。后续的实验研究进一步证明，spiro-OMeTAD 中的掺杂物也会起到类似的作用。掺

杂物的引入不仅能够增加 spiro-OMeTAD 层的电导率，而且能改善薄膜的表面电势，从而减小符合损失，有助于光生载流子的传输。

关键词：光伏性能；演变；spiro-OMeTAD；电导率；表面电势

#### A04-P12

##### 无机-有机钙钛矿薄膜表面粗糙度对于太阳能电池性能的影响

张昊，王雅斓，徐庆宇，董帅

东南大学 210000

以无机-有机钙钛矿薄膜作为光子吸收层的太阳能电池在近几年来光电转换效率飞速提高而引起了极大的研究热情。在这一太阳能电池结构中，无机-有机钙钛矿薄膜的质量（如晶体结构、晶粒尺寸、形貌等）对电池整体性能至关重要。我们采用了一步法制备无机-有机钙钛矿（ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ ）薄膜，采用 DMF 与 DMSO 作为溶剂，利用匀胶机涂覆，采用不同的干燥温度（ $40^\circ\text{C}$ - $80^\circ\text{C}$ ）挥发溶剂，再在  $100^\circ\text{C}$  下退火结晶得到无机-有机钙钛矿薄膜，最后制得的太阳能电池的性能与薄膜制备时溶剂挥发的温度密切相关。随着溶剂蒸发温度的提升，结晶完全后的薄膜整体粗糙度呈明显上升趋势。随着无机-有机钙钛矿薄膜表面粗糙度增加，在一定的表面粗糙度下，无机-有机钙钛矿薄膜与其上制备的 HTM 层接触面积增大，从而有利于光生空穴的收集，促进电池效率的提高。但是随着表面粗糙度的进一步增加，HTM 前驱体溶液在无机-有机钙钛矿薄膜表面的浸润性迅速下降，制备的 HTM 薄膜与无机-有机钙钛矿薄膜表面的接触不紧密，有效接触面积将减少，界面缺陷态会随之增多，导致光生空穴在 HTM 与无机-有机钙钛矿薄膜界面被消耗，电池性能下降。最终我们发现，无机-有机钙钛矿薄膜制备时前驱体溶液利用匀胶机甩膜，溶剂蒸发温度选用  $60^\circ\text{C}$  时，薄膜的粗糙度可以使得电池的性能达到最优，效率达到了 14.4%。

关键词：粗糙度；无机-有机钙钛矿；太阳能电池；浸润性

#### A04-P13

##### 湿度稳定高性能混合阳离子钙钛矿太阳能电池

李鑫

华中科技大学

有机-无机杂化钙钛矿太阳能电池作为一种新兴的薄膜太阳能电池，以有机-无机杂化钙钛矿材料  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  ( $\text{MAPbI}_3$ ) 作为光吸收层具有高的吸收系数、高的载流子迁移率、长的载流子传输距离、可溶液加工以及成本低廉等优点，自 2009 年首次问世以来，引起了广泛关注，发展到今天，钙钛矿太阳能电池的效率已经达到 22.1%。但是  $\text{MAPbI}_3$  作为吸收层，不够稳定，在小于  $100^\circ\text{C}$  的温度下易降解；然而  $\text{HC}(\text{NH}_2)_2\text{PbI}_3$  ( $\text{FAPbI}_3$ ) 钙钛矿有更合适的禁带宽度 1.47eV，而且可以在高温下稳定存在，却被研究得较少，它所存在的问题是难以得到高质量的纯相的钙钛矿。因此，为了提高钙钛矿太阳能电池的效率和稳定性，并且综合上述两者钙钛矿的优缺点，本文采用传统两步法制备混合阳离子钙钛矿  $\text{FA}_{1-x}\text{MA}_x\text{PbI}_3$  ( $x=0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ ) 太阳能电池，讨论了不同摩尔比阳离子对钙钛矿形核生长的机制，详细研究了不同摩尔比阳离子对电池的光电性能和稳定性的影响。通过实验结果表明，由于混合阳离子的协同作用，我们优化了阳离子的摩尔比，得出  $\text{FA}_{0.7}\text{MA}_{0.3}\text{PbI}_3$  钙钛矿太阳能电池的最大效率达到了 16.0%，并且有很好的稳定性，在常温，50-60% 的湿度下保持 20 多天，效率没有明显的变化。

#### A04-P14

##### 有机染料敏化光伏纤维电池

董斌，肖新宇，汤胜，邹德春

北京大学化学与分子工程学院 100871

目的

在染料敏化太阳能电池中，通常使用的含 Ru 等贵金属的配合物染料成本昂贵、易造成环境污染，因此合成简单、成本低廉的纯有机染料是一种理想的替代方案。然而纯有机染料吸收光谱较窄，能量转化效率不高，之前也没有应用在纤维太阳能电池上的先例，需要通过材料微纳结构与器件结构的综合优化，来提高其性能，增强实用性。

方法

首先通过调节 TiO<sub>2</sub> 多孔层的厚度来调控染料的吸附量，平衡染料吸附与界面的电荷复合，以达到最高的能量转换效率。并且，替换了不同的有机染料，对比了其性能。最后，使用具有波长转换功能的波导模块，将太阳光中的能量聚集到有机染料适合的波长范围，以实现器件输出功率的成倍提升。

结果

有机光伏光纤通过平衡染料吸附和界面电荷复合实现了大于 3% 的能量转换效率，与合适的波导模块结合后，更是将器件的输出功率提升到了之前的 2.7 倍，极大的提高了纯有机染料应用在纤维光伏电池中的性能，并获得了高功率的输出。

结论

有机染料和波导模块的搭配使用突破了传统的扩大有机染料吸收光谱区域的思路，大幅度的提高了纤维电池的光伏性能，并将有助于窄吸收敏化剂实现高功率的输出。据我们所知，这是有机染料首次参与纤维太阳能电池及其组件。

关键词：有机染料；纤维电池；波导模块；吸收光谱

#### A04-P15

##### 通过抑制器件内载流子复合优化有机小分子太阳电池的性能

郝霞<sup>1,2,3</sup>

1. 四川大学 新能源与低碳技术研究院
2. 四川大学 材料学院
3. 筑波大学 数理物质系

本文用分子束外延法制备了反式结构酞菁-富勒烯基小分子有机太阳电池并用一薄层钙对 ITO 界面进行修饰。制备的器件结构是 ITO/BCP/C<sub>60</sub>/SubPc/MoO<sub>3</sub>/Ag 及 ITO/Ca/BCP/C<sub>60</sub>/SubPc/MoO<sub>3</sub>/Ag。器件 I-V 测试结果表明，Ca 的加入可显著提高电池的光电性能，电池的效率从 1.8 % 增加至 2.9 %。用瞬态电流、光强-开路电压及光强-短路电流测试了两种结构电池内部的复合效应，结果表明，未用钙修饰阴极界面的电池显示出更强的 SRH 复合，这也是加入薄层钙的太阳电池性能提高的主要原因。本文提出了一种提高小分子太阳电池性能的方法，这一发现对于进一步优化电池性能及稳定性有重要的指导意义。

关键词：小分子有机太阳电池；复合

#### A04-P16

##### 还原氧化石墨烯作为表面改性层构筑于 CdS/CdSe 量子点共敏化太阳能电池光电性能研究

吴强<sup>1,2</sup>，赵海峰<sup>1,2</sup>，侯娟<sup>1,2</sup>

1. 石河子大学理学院
2. 石河子大学化学化工学院/新疆维吾尔自治区材料化工重点实验室

表面/界面改性层可以有效地增强光吸收能力和减小界面电荷复合，在量子点敏化太阳能电池光电转换效率中起着非常重要的作用。

本文报道了还原氧化石墨烯 (RGO) 作为表面改性层应用于在量子点敏化太阳能电池。通过调控 CdS/CdSe 量子点共敏化光阳极的浸渍时间从而控制光阳极表面 RGO 的负载量，并且系统地研究了其光学和电化学性能以及比较了不同浸渍时间的敏化光阳极的光电性能。

实验表征揭示了 RGO 与半导体量子点材料的相互作用可以有效增强光吸收能力，同时也提高了短路电流密度 ( $J_{sc}$ )；然而，TiO<sub>2</sub>/CdS/CdSe/ZnS 光电阳极中的 RGO 存在的缺陷可能加速量子点敏化太阳能电池中的界面电荷复合，并导致开路电压 ( $V_{oc}$ ) 的轻微降低。在 RGO 表面改性的量子点敏化太阳能电池中，光吸收能力和界面电荷复合效率之间的动态平衡是实现增强光电转换效率的关键。

结果表明：被 RGO (3min) 修饰的 TiO<sub>2</sub>/CdS/CdSe/ZnS 共敏化光阳极光电转化效率达到 5.28% ( $J_{sc} = 15.78 \text{ mA/cm}^2$ ,  $V_{oc} = 572 \text{ mV}$ )，显著高于未被还原氧化石墨烯修饰的光阳极的 4.69% ( $J_{sc} = 13.73 \text{ mA/cm}^2$ ,  $V_{oc} = 602 \text{ mV}$ )。

关键词：还原氧化石墨烯 (RGO)；量子点敏化太阳能电池；光电转化效率

#### A04-P17

##### 固态染料敏化太阳能电池中氧化石墨烯/聚苯胺复合对电极的研究

高菁，郭学益，张政，潘德群，杨英

中南大学 冶金与环境学院 410083

本文将氧化石墨烯(graphene oxide, GO)/导电聚苯胺(polyaniline, PANI)复合物薄膜作为对电极代替传统昂贵的贵金属对电极应用至固态可双面进光染料敏化太阳能电池中，降低了器件成本的同时提高了其光电性能。

实验采用原位聚合掺杂法制备了 GO/PANI 导电对电极，探索了 GO 掺杂量 (5、10、15 及 20 mg/mL) 对 PANI 薄膜表面形貌、光学性质及太阳能电池电子传输和复合过程的影响。

研究发现，GO 通过物理、化学作用吸附至 PANI 链中拓展了其共轭结构，当 GO 掺杂量为 15 mg/mL 时，GO/PANI 对电极的吸光度最高且对 I<sup>-</sup>/I<sub>3</sub><sup>-</sup>氧化还原反应的催化性能最强，同时采用其作为对电极组装的固态染料敏化太阳能电池光电转换效率为 3.2%，比未掺杂 GO 的器件提高了 13%。

关键词：固态染料敏化太阳能电池；聚苯胺；氧化石墨烯；导电薄膜

#### A04-P18

##### 茈萘亚胺类电子受体材料的合成及光伏应用

陈令成

大连理工大学 116024

茈萘亚胺类衍生物是一类性能优异的 N-型有机半导体材料<sup>[1,2]</sup>，但是由于茈核之间很容易形成  $\pi$ - $\pi$  堆积，而且当增大其共轭结构时，溶解性会变得更差，影响了其在有机电子学器件中的应用。我们设计合成了一种由四个茈萘亚胺单体通过港湾位的并环形成梯形结构形式星型树枝状共轭齐聚物分子。其中采用茈为树枝状分子的核，茈萘亚胺为枝。该梯形共轭齐聚物在常规溶剂中具有良好的溶解性，远远优于茈萘亚胺单体。通过热分析研究，发现该大分子具有很高的热稳定性；通过循环伏安法的测量，该分子具有很好的电化学稳定性：即便重复扫描 15 次，氧化还原电位曲线没有发生变化。而且在激光照射条件下测量荧光，发现该大分子表现出很好的光稳定性。通过 SCLC 测量，其表现出了很高的电子迁移率，并且将其作为一种非富勒烯类电子受体用于制作体相异质结太阳能电池器件中，采用 PTB7-Th 为给体，电池效率超过 8.0%。

关键词：茈萘亚胺；有机太阳能电池

#### A04-P19

##### 硒化铟薄膜光学性能调控研究

伍胜兰<sup>1</sup>，张鲸<sup>1</sup>，符春林<sup>1</sup>，伍昆仑<sup>2</sup>

1. 重庆科技学院冶金与工程学院

2. 重庆赛宝工业技术研究院



硒化锑 ( $\text{Sb}_2\text{Se}_3$ ) 是一种直接跃迁的二元单相半导体材料, 具有光学带隙适宜 ( $\sim 1.2 \text{ eV}$ )、吸光系数大 ( $> 10^5 \text{ cm}^{-1}$ )、原料储量丰富、成本低和低毒等优点, 适于制备太阳能电池的吸收层 (理论光电转换率达到 30%)。本文采用真空蒸镀法制备硒化锑薄膜, 采用 XRD 和 AFM 对薄膜的晶体结构和表面形貌进行表征, 利用紫外分光光度计和台阶仪测定透光率和厚度, 并计算薄膜的禁带宽度, 研究基片温度和退火温度对薄膜光学性能的影响。实验结果显示: 随着基片温度的升高, 薄膜的粗糙度、晶化程度、透光率和光学带隙均提高, 厚度无明显变化; 退火后薄膜表面更光滑、更平整, 膜厚更均匀, 并且随着退火温度的升高, 薄膜的结晶度和透光率也得到提高。

关键词: 硒化锑薄膜; 真空蒸镀; 基片温度; 退火温度; 光学性能

#### A04-P20

##### 静电纺原位合成石墨烯掺杂的铜硫铟复合纳米纤维在 DSSCs 对电极中的应用

王利丹, 翁凯, 何建新

中原工学院 451191

本文以氯化铜 ( $\text{CuCl}_2$ )、氯化铟 ( $\text{InCl}_3$ )、硫脲 ( $\text{C}_2\text{H}_5\text{NS}$ ) 和氧化石墨烯纳米片 (GO) 的聚乙烯吡咯烷酮 (PVP) 混合溶液作为静电纺丝前驱体溶液, 通过静电纺原位合成与炭化工艺相结合的方法, 制备了 rGO+CuInS<sub>2</sub> 复合纳米纤维, 用作染料敏化太阳能电池 (DSSC) 的对电极材料。结果显示, rGO+CuInS<sub>2</sub> 纳米纤维的平均直径在 100nm 左右, CuInS<sub>2</sub> 纳米晶体为黄铜矿结构, 晶粒尺寸在 8-15 nm, 并且沿纤维轴向连续排列。以 rGO+CuInS<sub>2</sub> 纳米纤维作为对电极的 DSSCs 的光电转换效为 5.93%, 优于 CuInS<sub>2</sub> 对电极 (5.27%), 接近于铂电极 (6.34%)。主要原因在于 rGO+CuInS<sub>2</sub> 纳米纤维具有较高的比表面积和导电性能, 有利于电解液的渗透和电子的快速传输, 同时为电解对 ( $\text{I}^-/\text{I}_3^-$ ) 的氧化还原反应提供更多的活性催化位点。因此, rGO+CuInS<sub>2</sub> 复合纳米纤维可以作为一种有效的 DSSCs 对电极材料。

关键词: DSSCs; 对电极; 静电纺丝; 石墨烯

#### A04-P21

##### 具有等离子体增强与光散射双重作用的 Au@TiO<sub>2</sub> 空心球的制备及其在染料敏化太阳能电池方面的应用

李月英<sup>1</sup>, 王建淦<sup>1</sup>, 刘兴蕊<sup>1</sup>, 沈超<sup>1</sup>, 谢科予<sup>1</sup>, 魏秉庆<sup>1,2</sup>

1. 西北工业大学

2. 美国特拉华大学

为了提高染料敏化太阳能电池光阳极对太阳光的利用率, 促进光生电子和空穴的有效分离, 进而达到优化染料敏化太阳能电池光电性能的目的; 采用一步溶剂热和原位还原的方法制备 Au 修饰的 TiO<sub>2</sub> 中空球; 成功制备出比表面积为  $120 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$  的 Au 纳米颗粒均匀修饰的 TiO<sub>2</sub> 中空球, 将 Au@TiO<sub>2</sub> 以一定比例引入染料敏化太阳能电池光阳极的多孔吸收层时, 获得 7.3% 的光电转换效率, 与 P25-DSSC 对比样相比, 增加了 37.7%; 光电性能的显著提高可以归功于 TiO<sub>2</sub> 空心结构优异的光散射能力和 Au 纳米颗粒的等离子体增强效应, 两者的协同效应提高了光捕获效率以及载流子产生和分离效率, 实现了对染料敏化太阳能电池光电性能的优化。

关键词: 二氧化钛; 中空结构; 染料敏化太阳能电池; 金纳米颗粒; 等离子体增强

#### A04-P22

##### 电化学原子层沉积法合成 CoSe 薄膜对电极制备高性能染料敏化电池

褚为静

华中科技大学

电化学原子层沉积是一种基于欠电位沉积的薄膜生长方法, 通过元素的交替沉积形成化合物, 沉积过程易于控制设备简单。本文通过电化学原子层沉积法首次成功在 FTO 玻璃上沉积出 CoSe 薄膜, 通过循环

伏安法对 Se 和 Co 在 FTO 衬底上的欠电位进行分析, 将 Se 的沉积电位在其欠电位沉积峰的范围內调节, 保持 Co 沉积电位不变, 通过电化学原子层沉积可获得不同形貌和原子比例的沉积物。制备的 CoSe 薄膜呈现非晶态, 不同的沉积条件下, Co 和 Se 的化学计量比不同。塔菲尔极化测试和循环伏安扫描表明钴硒化合物对碘电解质的催化性能和稳定性均高于 Pt, 其中 Co 和 Se 的比例为 1.2:1 时, 薄膜的催化活性和稳定性最高。基于 CoSe 对电极的染料敏化太阳能电池在 Co 和 Se 的原子比例为 1.2:1 时, 获得了 9.28% 的最优光电转换效率, 比基于 Pt 对电极的染料敏化太阳能电池(6.28%)提高了 136%

#### **A04-P23**

##### **基于基底材料的新型光伏构件的性能研究 A04-P23**

庞玮, 张永哲, 严辉

北京工业大学, 北京 100124

随着工业现代化和经济全球化进程的加快, 与之而来的能源危机与环境污染问题日益严重, 因此开发利用以可再生能源为主体的新能源成为世界各国科学家争相追求的目标。其中, 太阳能以其储量丰富且清洁无污染而得到了科学研究者的青睐。但是作为直接利用太阳能的主要方式之一的太阳能电池由于其自身材料缺陷导致的温度效应十分明显<sup>[1-2]</sup>, 故而, 通过对太阳能电池的有效冷却来抑制其光电效率的衰减, 增加光电输出成为了研究的重点。

基于不同基底材料的导热率不同, 进而引起的热对流效应也会不同。因此, 实验室提出了通过改变传统光伏组件的基底材料, 实现光伏电池的温度效应抑制。在本研究工作中, 选择密度低、高热导率且价格相对便宜的金属铝作为新型光伏组件的基底层, 可以明显抑制光伏电池的温升, 进而增加光电输出。研究表明, 将金属铝材内设散热流道, 再辅助以流体在流道内循环流动, 光伏电池的工作温度将会大幅降低, 光电输出可提升约 15%-20%。

关键词: 温度效应; 基底材料; 光伏构件

#### **A04-P24**

##### **使用 wxAMPS 软件模拟钝化区域对 CIGS 薄膜电池特性的影响**

张林睿, 李桐, 张悦, 何永才, 庞玮, 宋雪梅, 张永哲, 严辉\*

北京工业大学, 北京 100124

碱金属元素能够提高 CIGS 电池效率的特性目前被人们广泛的关注, 这个问题常常被认为是碱金属通过消除施主缺陷所引起的钝化的效果。在本次工作中, 基于这个观点, 使用了 wxAMPS 模拟软件, 研究了钝化位置在 CIGS 吸收层中对电池器件的影响。结果表明, 在空间电荷区的近界面体施主(N1)能够导致载流子在 CdS 与 CIGS 近界面附近复合, 然而空穴浓度的增加将导致载流子拉向了界面复合。分别参考了碱金属在后沉积处理(PDT)与来自衬底方向的扩散, 模拟了体施主缺陷在 CIGS 中位置的变化, 结果表明: 在空间电荷区的钝化是能够提高电池的开路电压, 然而空穴浓度的增加将会改变空间电荷区的宽度, 影响着短路电流与填充因子。在空间电荷区附近的中性区域对于短路电流以及填充因子十分关键, 它直接影响着载流子的复合速率与扩散。因而在 CIGS 电池的钝化过程中, 碱金属的分布对于电池的特性十分的关键。

#### **A04-P25**

##### **WO<sub>3</sub> 界面层对 Cu<sub>2</sub>ZnSn(S,Se)<sub>4</sub> 基太阳能电池背电极的修饰及其影响**

石琨, 栾红梅, 姚斌\*, 李永峰, 丁占辉

吉林大学新型电池物理与技术教育部重点实验室, 吉林大学物理学院, 长春 130012;

本工作以氧气和氩气为溅射气体, 利用磁控溅射单一 W 靶材, 在镀 Mo 钠钙玻璃衬底上生长 WO<sub>3</sub> 薄膜。通过调整氧/氩气分压比、溅射功率等条件, 调控 WO<sub>3</sub> 薄膜厚度在 10nm 以内; 通过真空退火调控薄

膜的结构和光电性质。研究发现高温热处理可以提高薄膜的光电性能,使薄膜具有 2.9eV 的光学带隙、 $3 \times 10^{20}$  个/cm<sup>3</sup> 的载流子浓度、 $0.251 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$  迁移率和  $0.223 \Omega \cdot \text{cm}$  的电阻率。以生长 10nm 厚 WO<sub>3</sub> 薄膜的镀 Mo 钠钙玻璃为衬底,制备了结构为 Al/ITO/CdS/Cu<sub>2</sub>ZnSn(S,Se)<sub>4</sub>/WO<sub>3</sub>/Mo/Glass 的太阳能电池器件,其光电转换效率为 3.50%, 小于同样条件下制备的无 WO<sub>3</sub> 层 CZTSSe 太阳能电池的转换效率 (4.60%)。对两种太阳能电池的开路电压 (Voc), 短路电流 (Isc) 和填充因子 (FF) 可以推论, 转变效率的降低主要归因于 Isc 的减小。对比两种太阳电池的并联电阻 (R<sub>sh</sub>), 串联电阻 (R<sub>s</sub>), 品质因子 (A) 和反向饱和电流 (J<sub>0</sub>) 可以看出, 影响太阳能电池转换效率的主要因素来自背电极界面 (A>2)。WO<sub>3</sub> 层的介入使 R<sub>sh</sub> 和 R<sub>s</sub> 增加, A 和 J<sub>0</sub> 降低。R<sub>sh</sub> 增加以及 A 和 J<sub>0</sub> 的减小说明: WO<sub>3</sub> 层在背电极界面的介入抑制了 MoSe<sub>2</sub> 的形成, 减小了界面复合, 从而使 Voc 提高; 而 R<sub>s</sub> 的增加说明: WO<sub>3</sub> 层的介入使太阳能电池电阻增加, 导致 Isc 下降。因此, 减小 WO<sub>3</sub> 层对串联电阻的影响将成为下一步急需解决的问题。

#### A04-P26

##### 基于立方烷钴分子催化剂修饰的高效 BiVO<sub>4</sub> 光阳极的研究

王勇<sup>1</sup>, 李斐<sup>1</sup>, 杜健<sup>1</sup>, 孙立成<sup>1,2</sup>

1. 大连理工大学精细化工国家重点实验室
2. 瑞典皇家工学院

光催化分解水产生氢气和氧气是发展可再生能源的重要途径。然而, 高效催化水氧化半反应被认为是整个分解水过程的巨大挑战和瓶颈。除了多相水氧化催化剂, 基于过渡金属的分子配合物凭借其高活性, 结构易于调控和便于监测反应机理等优势越来越受到人们的关注。尽管分子水氧化催化剂在化学和光化学水氧化反应中被广泛研究, 但是在构建全分解水的体系中却很少被人提及。因此, 基于分子催化剂修饰的高效全分解水体系依然是目前研究的任务和挑战。

BiVO<sub>4</sub> 光阳极是在文献报道的基础上制备而成。制备过程大体分为两步: 一、在导电玻璃基底上通过电沉积方法制备 BiOI 薄膜; 二、将制得的 BiOI 薄膜与乙酰丙酮氧钒在 450°C 下高温煅烧 2 小时, 得到纳米多孔的 BiVO<sub>4</sub> 电极。

我们研究发现, 将立方烷钴分子催化剂与 BiVO<sub>4</sub> 光阳极相结合构建的光电化学电池能够高效催化水分解, 且其光解水性能可以通过分子催化剂上的取代基团进行调控。当催化剂被丁氧基乙酸氧桥取代时, 在模拟太阳光照射下, 其在 1.23 V (相对于可逆氢电极) 处的光电流密度达到 5 mA/cm<sup>2</sup>。该复合电极的最高太阳能转换效率达到 1.84%, 是未修饰立方烷钴催化剂的 BiVO<sub>4</sub> 电极的 6 倍。

上述结果展示了将分子催化剂与半导体电极相结合在构建高效人工光合作用体系中优势。分子催化剂结构易于修饰的特点, 使其能够通过改变配位环境对复合电极的催化性能进行调控, 这为实现太阳能的高效转换提供了巨大的潜力。

关键词: 钒酸铋; 复合光阳极; 分子催化剂; 水氧化

#### A04-P27

##### FeOOH 与 ZIF-8 衍生的多孔碳复合催化剂电催化水氧化

杜健<sup>1</sup>, 李斐<sup>1</sup>, 王勇<sup>1</sup>, 孙立成<sup>1,2</sup>

1. 大连理工大学精细化工国家重点实验室, 辽宁 大连, 116023
2. 瑞典皇家工学院 化学系, 瑞典 斯德哥尔摩, 10044

利用电催化分解水制备氢气作为太阳能燃料来代替传统的化石能源是解决当前环境污染和能源消耗的理想方法。然而, 水氧化反应作为水分解的一个半反应, 涉及多质子多电子转移步骤, 动力学上相对水还原更难发生, 是整个水分解过程的瓶颈部分。因此, 寻找和开发高效的电催化水氧化催化剂是解决这个问题关键所在。FeOOH, 由于廉价、无毒、水氧化活性高等性质, 越来越多的被应用于催化水氧化。但 FeOOH 本身较差的导电性严重阻碍了其催化性能。作为金属有机骨架材料 (MOF) 的一种, ZIF 材料由于

其制备简单、碳含量和石墨化程度优越、导电性好、化学稳定性和热稳定性高等性质，是制备多孔碳材料的理想模板。我们研究发现以 ZIF 衍生的多孔碳材料来作为导电层与 FeOOH 结合，很大程度上提高了 FeOOH 的电催化水氧化性能。

我们以盐酸处理过的泡沫镍 (NF) 作为基底，将其浸泡在含有硝酸锌和 2-甲基咪唑的甲醇溶液中，再将得到的 NF/ZIF-8，置于高温条件下碳化，获得 NF/NPC(氮掺杂多孔碳)，最后采用电沉积的方式将 FeOOH 负载到 NF/NPC 表面，便成功的制备了 NF/NPC/FeOOH 复合催化剂。

在 1M KOH 溶液中，活化后的催化剂在  $100 \text{ mA cm}^{-2}$  处的产氧过电位为 230 mV，塔菲尔斜率为  $33.8 \text{ mV dec}^{-1}$ ，仅次于目前报道的最好的  $\text{Ni}_x\text{Fe}_{1-x}\text{Se}_2$  衍生的氧化物。

NF/NPC/FeOOH 复合催化剂的优越电催化性能主要归因于以下几个方面:1)三维泡沫镍骨架结构提供了较大的比表面积，使催化剂暴露了更多的活性位点;2)多孔碳层与 FeOOH 的结合提高了催化剂的导电性，更有利于电子的传递;3)催化过程中，从泡沫镍基底原位产生的 NiO 穿透多孔碳层与 FeOOH 接触，二者的协同效应进一步提高了该催化剂的催化性能。

关键词：电催化；太阳能燃料；水氧化；FeOOH；多孔碳

#### A04-P28

##### Mo 掺杂钨青铜晶体的水热制备及微观结构与光学性能研究

王清娟，康利涛

太原理工大学 030024

Mo 和 W 同属 VIB 族元素，并具有相似的离子半径、电负性和氧化物晶格结构，因此 Mo 可以作为替代掺杂原子占据钨氧化物中 W 的晶格点位。为研究 Mo 掺杂对钨青铜微观结构与性能的影响，本研究采用低温水热法制备出了 Mo/(Mo+W)原子比为 0-80%的钨青铜样品，研究证实：少量 Mo 掺杂可以促进钨青铜相的生成，抑制杂相生成，同时 Mo 掺杂增大了钨青铜的禁带宽度；当 Mo/(Mo+W)原子比为 1.5%时，产物为纯相纳米钨青铜，其近红外光遮蔽性能良好（可见光透过率约为 70%，而红外光透过率只有 10%），可以用做节能玻璃涂层；但当 Mo 含量进一步增加时，其近红外光遮蔽性能急剧下降。作者分析样品吸光机制后发现，Mo 掺杂促进了~ 1.4eV 的小极化子吸收，但同时抑制了~ 0.8 eV 处的局域表面等离子体共振吸收，因而造成光学性能变化。关于吸光机制变化的内在原因仍需进一步分析，其中 Mo 掺杂很可能造成了部分自由电子的局域。

关键词：Mo 掺杂；钨青铜；水热法；近红外遮蔽；节能窗

#### A04-P29

##### 贵金属微阵列的制备及其等离子体增强特性

Wang zhezhe

福建师范大学 350117

贵金属纳米材料具有独特的局域表面等离子共振特性 (Local Surface Plasmon Resonance: LSPR)，将其通过现代微细加工技术制成亚波长单元的均匀阵列，可构建出具有奇特功能和特性的等离子体超表面 (Plasmonic Metasurface)。与传统光学元件相比，等离子体超表面可利用亚波长阵列单元之间的间隔及其几何参数（形状、尺寸、取向分布等）的变化对入射光波的电场和磁场分量进行调控，从而实现透射的异常增强，且该增强特性具有宽带、宽角度特征，因此将其引入到太阳能电池中有望提高电池对太阳光的吸收，从而提高电池的短路电流和转换效率。要实现紫外-可见-近红外全波段的吸收增强，等离子体超表面的阵列单元尺寸必须达到亚波长甚至是纳米尺度。同时，贵金属等离子体激元需严格空间排列，最好能够尺寸形貌人为可控。目前超表面面临的最大挑战是制备困难。

本文提出一种新的制备贵金属阵列的方法，即采用感光溶胶-凝胶结合光刻技术制备介质材料的亚波长阵列，随后利用化学还原自组装法获得贵金属阵列超表面。所提方法的优势主要体现在：操作方法快速，

可灵活制备不同周期的一维和二维贵金属阵列图形，且易实现等离子体超表面周期和贵金属形貌同时人为调控。

目前利用该方法已成功制备了 Ag、Au 以及 Au/Ag 合金等贵金属微阵列，并通过调整实验因素（电压、时间、添加剂等）有效控制了贵金属的形核和长大过程，实现了贵金属形貌和尺寸的人为调控。最后，结合 FDTD 理论模拟和拉曼光谱测量等探讨了贵金属阵列的形貌特征参数对其等离子体增强性能的影响。综上所述，本文提出了一种成本较低、能够对阵列周期和贵金属纳米材料微观形貌同时进行调控的表面等离子体微阵列制备方法。研究贵金属材料形貌尺寸调控规律；进而希望初步探索贵金属阵列的宽带吸收增强性能，为进一步提高薄膜太阳能电池的转换效率提供实验和理论基础。

关键词：贵金属；微阵列；感光溶胶-凝胶；化学还原自组装

#### A04-P30

##### Au/GO 分散液的制备及其太阳能蒸汽性能研究

周建华，邓梓阳，苏瑋，苗蕾

桂林电子科技大学 541004

太阳能蒸汽是光热转换材料在太阳光辐照下直接加热其表面液体产生蒸汽气泡，而不需要把整个液相加热到沸点即可源源不断获得蒸汽。这个过程具有清洁环保和中间过程热损失少的特点，相比于传统的太阳能选择性吸收涂层进行光热转换的方式更具有优势，是高效利用太阳能的新方式。

本文采用种子生长法制备金纳米棒，通过改变硝酸银的量获得了长径比大于 3 的金纳米棒，其吸收波长拓展到近红外区。采用葡萄糖修饰获得 GO（氧化石墨烯）分散液，再与 Au 纳米棒分散液混合均匀，制得不同比例的 Au/GO 分散液。

从 SEM 和 TEM 照片可以看出，Au 纳米棒在 GO 片层上分散均匀，葡萄糖修饰使得 GO 表面含有丰富的羟基，有助于 Au 纳米棒的锚定，可形成稳定的分散液。采用自制的装置测试模拟光源照射下的太阳能蒸汽性能，在一个太阳强度下（ $1000 \text{ W/m}^2$ ），单纯 Au 纳米棒的蒸汽产生效率为 60%，与 GO 复合后提高到 80%。

采用简单的工艺获得了稳定的 Au/GO 分散液，由于 Au 纳米棒和 GO 片层在光热转换过程中的协同作用，获得了优异的太阳能蒸汽性能，在污水灭菌、消毒、海水淡化等领域有着较大的潜在应用前景。

关键词：太阳能蒸汽；金纳米棒；氧化石墨烯；分散液

#### A04-P31

##### Ag 纳米颗粒/石墨烯复合薄膜的制备及其太阳能蒸汽性能研究

刘朋飞，邓梓阳，苗蕾，周建华，玉德良，苏瑋

桂林电子科技大学 541004

太阳能蒸汽作为一种高效绿色的太阳能利用技术，近几年在水净化、海水淡化方面引起学者们的广泛关注。

本文采用水热法制备 Ag 纳米颗粒和还原氧化石墨烯复合材料，并利用旋涂法在纤维素气凝胶上表面包覆一层 Ag/石墨烯复合薄膜。通过扫描电子显微镜（SEM）、拉曼光谱(Raman)、紫外/可见光谱、太阳能蒸汽测试等分析方法对所制备的复合薄膜进行表征。

在该研究中，上层的复合薄膜具有广泛的光吸收能力，吸收率可达 81%；下层的纤维素气凝胶导热系数低至  $0.020 \text{ W/(mk)}$ ，可有效地阻隔热量传导到水中，并且具有优异的亲水性和多孔结构使得其能将下层水输送到上层的光吸收薄膜表面，实现水的局域性加热。

通过优化光吸收薄膜和纤维素气凝胶的厚度，本文中的太阳能光热蒸汽效率可达到 80%。Ag/石墨烯薄膜具有有效的光热转换能力，可实现高效的太阳能蒸汽生成，在海水淡化、污水净化等方面有很好的利用前景。

关键词：Ag 纳米颗粒；石墨烯；太阳能蒸汽

#### **A04-P32**

##### **纸基复合材料的制备及其光热转化性能研究**

邓梓阳，刘朋飞，周建华，苗蕾

桂林电子科技大学 541004

近年来，将光热转化材料用于太阳能蒸汽产生是太阳能热利用的新方向。尽管目前所使用光热转化材料得光热转化效率较高，但其材料昂贵以及制备工艺复杂，限制了其广泛应用。因此，廉价高效的光热转化材料将有利于推动该领域的应用与发展。

本文分别通过真空浸渍法、超声辅助沉积法、滴涂法，将不同的碳材料沉积在滤纸表面，然后将复合材料用于太阳能蒸汽产生测试，同时探究了不同孔径的滤纸对太阳能蒸汽产生的影响。通过利用 X 射线衍射（XRD）、扫描电子显微镜（SEM）、紫外-可见-近红外（UV-vis-NIR）反射光谱等材料进行表征；发现碳颗粒均匀地沉积在滤纸表面，复合材料对太阳光的吸收率以及反射率分别为 92% 与 8%。而将纸基复合材料用于太阳能蒸汽产生实验中，在一个太阳的光照强度下，其光热转化效率约为 90%。分别在 1、3、5 个太阳光照强度下，复合材料仍保持较高的实用性，光热转化效率保持在 80% 左右。

该复合材料原料价格低、制备方法简单，同时具有较高的外光热转化效率，因此具有较为广泛的潜在应用，如废水处理、海水淡化和蒸汽消毒。

关键词：太阳能蒸汽；纸基；碳材料；光热转化

#### **A04-P33**

##### **新型硅基异质结隧穿层的形成与量子输运特性的研究**

马忠权，高明，万亚州，宋晓敏，韩百超，赵磊

上海大学-索朗光伏材料与器件 R&D 联合实验室 200444

本文报告了一种硅基异质结光伏器件的电子结构、性能和量子输运特征，并从实验和理论上研究了该异质结界面区的化合态与电子结构，对于发展 TOPCon 和 QTSC 等高效、稳定、潜力巨大的太阳电池的应用，具有重要的意义。具体内容包括三个方面：

- 1、对于上世纪 70 年代以来，所发展的 MIS, SIS, HIT, QTSC, TOPCon 和当前 Quasi-SIS 结构光伏器件进行了综述；
- 2、利用 PVD 技术制备了硅基异质结光伏器件，并获得了最佳的 I-V 特征、新的光伏功能材料和新型光伏器件。
- 3、采用第一性原理、密度泛函和分子动力学方法，计算了 III-族金属元素掺杂的非晶氧化硅薄膜的化合态及形成能、相应的电子结构和分波态密度；利用深度刻蚀的 XPS 能谱、TEM 电子显微谱和高频光辅助 CV 技术，分别观察、测量了器件界面区的化学元素分布、电子结构、原子点阵形貌和界面态密度等，获得了该器件界面区的信息；进一步的数据拟合分析 I-V 特征，将实验数据和理论计算紧密结合，建立了光生载流子的输运模型，并揭示了光电转换的规律和特征。

关键词：硅基异质结；光伏器件；量子隧穿；功能薄膜材料；基础研究

#### **A04-P34**

##### **硅合金电渣重熔强化杂质高效分离制备高纯硅材料技术基础**

钱国余，王志，曹建尉，公旭中

中国科学院过程工程研究所 100190

高纯多晶硅是制备单晶硅和太阳能电池的原料，是光伏产业的基石，而提纯是高纯多晶硅材料制备的核心。硼、磷杂质难去除是冶金法提纯技术的关键问题。中科院过程所出硅合金电渣重熔提纯短流程新方

法, 该方法耦合了多相界面强化低浓度杂质传质和高温电渣加大杂质在相间平衡分配的两方面同步强化, 从而实现 B、P 杂质同步高效深度去除。

本文主要针对该方法做了三方面工作研究。Si-Sn 复合熔析精炼结果表明合金中增加合金中 Sn 含量可以通过降低合金中 Si 活度和合金粘度来提高  $L_B$ , 当 Sn 含量高于 30% 时,  $L_B$  呈现明显快速增加趋势。渣光学碱度的增加可以促进 B 的去除, 当光学碱度从 0.650 增加到 0.670 过程中,  $L_B$  实现了从 3 增加到 10 以上。此外, 渣金间呈现明显的分层, 可较好实现渣金分离。电场强化实验结果表明, 增加电场强度可以促进 B 的去除, 当电压增加到 3V 以上时,  $L_B$  呈现明显的快速增加。渣洗实验结果表明, 合金液滴穿过渣层的渣金接触模式可以增大渣金接触面积, 同时创造了良好的渣金动态接触条件, 实现了 B 和 P 的快速去除, B 和 P 的去除率分别达到 92.5% 和 75.9%。

关键词: 高纯硅; 电渣重熔; 硅合金; B/P

#### A04-P35

##### 通过配体修饰的有机配合物前驱体制备超薄高活性的 NiFeO<sub>x</sub> 电化学水氧化催化剂

吴秀娟<sup>1</sup>, 呼斯楞<sup>1</sup>, 孙立成<sup>1,2</sup>

1. 大连理工大学精细化工实验室
2. 瑞典皇家工学院化学系

近年来, 为了获得廉价高效无污染的水氧化催化剂, 研究者们正在致力于研究非贵金属氧化物和氢氧化物材料。其中 NiFeO<sub>x</sub> 作为新型高效的水氧化催化剂而受到研究者们越来越多的关注。

在本文中, 我们通过对不同侧链的金属镍有机配合物前驱体 Ni(C<sub>12</sub>-tpen)(ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>12</sub>-tpen=N'-十二烷基-N, N, N'-三(二甲基吡啶)-1, 2-乙二胺), Ni(C<sub>1</sub>-tpen)(ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>(C<sub>1</sub>-tpen=N'-甲基-N, N, N'-三(二甲基吡啶)-1, 2-乙二胺), Ni(Bn-tpen)(ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>(Bn-tpen=N'-苄基-N, N, N'-三(二甲基吡啶)-1, 2-乙二胺)和金属盐 Ni(ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> 的电沉积法制备了不同的镍铁氧化物薄膜。

实验结果证明由 Ni(C<sub>12</sub>-tpen)(ClO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> 电沉积得到的膜 F-C<sub>12</sub> 表现出高效的水氧化催化活性, 在 1M KOH 电解液中 10 mA/cm<sup>2</sup> 电流密度处的过电位仅 298 mV, 塔菲尔斜率只有 39 mV/dec, 并且在 300 mV 处的 TOF 值高达 0.77 s<sup>-1</sup>。在随后的恒电位电解实验中, F-C<sub>12</sub> 表现出良好的稳定性, 在 1.75V vs. RHE 的电位下经过 16h 的电解, 电流密度维持在 6.5 mA/cm<sup>2</sup> 处, 基本不变。我们还对该镍铁氧化物薄膜进行 UV-Vis 吸收光谱测试, 结果表明 F-C<sub>12</sub> 几乎透明(T>99.5%), 因此与适合的半导体结合可进一步作为水氧化光阳极。通过测试发现, 四种氧化物薄膜的 ESCA 差别不大, 由此我们推断 F-C<sub>12</sub> 的活性是因为它本身的内在活性导致的。引起这种内在活性的原因可能是十二烷基链在电极附近分解时产生大量的小分子, 这些小分子的离开会增加表面积, 这有利于电子转移。另外一个可能的原因是由于十二烷基链的疏水性较强, 因此在相同的电沉积时间条件下, 相比于其他三个前驱体, 会更容易形成氧化物薄膜以及电极表面形貌的调整。

关键词: 水氧化催化剂; 薄膜; 电沉积; 有机配合物前驱体

#### A04-P36

##### 纳米半导体 TiO<sub>2</sub> 单能级表面态的电子转移及影响机制研究

刘伟庆, 刘玉静, 刘飞, 邹子玉

南昌航空大学 330063

纳米半导体 TiO<sub>2</sub> 由于本身缺陷包含较多的局域态: 指数型体局域态、指数型表面态以及单能级表面态等等。单能级表面态是一种特殊存在的表面态, 一般呈现高斯分布。这个表面态的形成、作用以及环境对其影响存在较多争议。

本论文基于 Marcus、Buttler-Volmer 电子传递理论和“传输线型”等效电路模型, 建立电子在单能级表面态发生转移过程的模型。研究了有效态密度 N、电子转移速率 k 以及重组能 λ 等参数对单能级表面态以及对其它途径发生电子转移的影响。

结果表明电子经由单能级表面态是一个不能忽略的转移途径，在特定条件可以严重影响经由其它途径转移过程。

关键词：纳米半导体；单能级表面态；电子转移

## 仅发表论文

### A04-PO01

#### 不同沉积温度条件下掺铝氧化锌薄膜的结构和光学性能研究

王晓晶, 张云

武汉纺织大学, 电子与电气工程学院, 武汉, 430200 430200

首先使用磁控溅射法在石英玻璃衬底上沉积了掺铝氧化锌(AZO)薄膜, 然后通过 X 射线衍射(XRD), 场发射扫描电子显微镜 (FE-SEM), X 射线光电子能谱仪 (XPS), 紫外-可见光分光光度计 (Uv-vis) 等仪器研究了薄膜的结构和光学性能。研究表明制得的薄膜呈现多晶且致密的结构; 随着沉积温度的升高, 薄膜厚度增加且呈现明显的晶粒纵向生长趋势; 通过 XPS 测试, 检测到薄膜表面存在明显的 Zn、O 元素, O1s 和 Zn2p 光电子峰的结合能及峰值强度随着沉积温度的升高而升高, 这表明高温有利于氧化反应的发生, 且对 AZO 薄膜的化学计量比有明显影响; 制得的薄膜在可见光区域透过率为 80~84%; 光学能带隙介于 3.23~3.37eV 之间且随着沉积温度升高而升高。

关键词：掺铝氧化锌；溅射；结构；光学性能

### A04-PO02

#### 真空单源热蒸发法制备 $\text{HC}(\text{NH}_2)_2\text{PbI}_3$ 钙钛矿薄膜及其性能表征

蓝华斌, 兰春锋, 梁广兴, 罗景庭, 马秀芳, 范平

深圳大学物理与能源学院, 薄膜物理与应用研究所 518000

采用全真空单源热蒸发的方法直接沉积制备了  $\text{HC}(\text{NH}_2)_2\text{PbI}_3$  钙钛矿薄膜, 探究  $\text{FAI}/\text{PbI}_2$  粉末比例对所制备的  $\text{HC}(\text{NH}_2)_2\text{PbI}_3$  薄膜性能的影响。

利用 X 射线衍射仪 (XRD)、能量色散谱仪 (EDS)、扫描电子显微镜 (SEM) 和分光光度计对  $\text{HC}(\text{NH}_2)_2\text{PbI}_3$  薄膜的微结构、表面形貌、元素组成和光学性能进行表征分析。

结果表明: 当  $\text{FAI}/\text{PbI}_2$  比例为 1:3 时, 采用真空单源热蒸发法制备的薄膜具有典型的  $\text{HC}(\text{NH}_2)_2\text{PbI}_3$  钙钛矿衍射峰, 呈现出比较单一的晶体结构; 薄膜表面致密平整、均匀, 薄膜表面结晶颗粒大、结晶度高; 薄膜的 Pb/I 元素比符合  $\text{HC}(\text{NH}_2)_2\text{PbI}_3$  的理想化学计量比;

所制备  $\text{HC}(\text{NH}_2)_2\text{PbI}_3$  薄膜的禁带宽度为 1.5eV, 满足钙钛矿太阳能电池对薄膜吸收层光学性能的要求, 可望用于制备大面积高效钙钛矿太阳能电池。

关键词：真空单源热蒸发法； $\text{HC}(\text{NH}_2)_2\text{PbI}_3$  薄膜；微结构；光学性能；钙钛矿太阳能电池

### A04-PO03

#### 利用喷雾装置为高原富光地区光伏组件降温的研究

卢辉东, 铁生年

青海大学 810016

硅光伏组件的输出功率主要受安装地辐照度和组件温度的影响, 青海地区春夏季辐照度大于  $1000\text{W}/\text{m}^2$  的时间出现在上午 11 点 30 到下午 2 点 30 之间, 型号为 TW245P660 的光伏组件作为我们的研究组件, 该时间段内组件的平均温度为  $46^\circ\text{C}$ , 平均输出功率 160W, 仅为最大输出功率的 65.3%。为了让组件在高辐照度时段有最大输出功率,



我们开发出一套利用喷雾水冷却装置为高原富光地区硅光伏组件降温。该装置由 0.29kW 的水泵提供冷却水的循环动力, 利用单片机编程来控制水泵的开关, 当辐照度高于  $1000\text{W}/\text{m}^2$  的时候启动喷雾装置, 并根据光伏电池单二极管等效电路模型建立了光伏系统计算方法来计算任意辐照度和组件温度下伏安特性曲线。

实验结果表明, 采用喷雾水冷装置后, 组件背面温度可以维持在  $20^\circ\text{C}$  左右, 输出功率平均为 235W, 相对于无水冷却组件输出功率提高 46%, 耗水量仅为 0.8L。

关键词: 光伏组件; 水冷却系统; 伏安特性; 输出功率

#### A04-PO04

##### PbS 薄膜的低温化学浴制备及其异质结太阳能电池光伏性能研究

张正国<sup>1</sup>, 高心<sup>1,2</sup>, 韩非<sup>1,2</sup>

1. School of Chemistry and Chemical Engineering, North Minzu University

2. School of Chemistry and Chemical Engineering, Hefei University of Technology

PbS 薄膜可与  $\text{TiO}_2$  薄膜组成 p-n 结太阳能电池, 且组装过程简单, 是最有潜力的新型太阳能电池之一。为制备宽禁带的 PbS 薄膜并用于组装 PbS/ $\text{TiO}_2$  异质结太阳能电池。

通过化学浴法, 使用包含  $0.05\text{mol/L Pb}(\text{NO}_3)_2$ 、 $0.20\text{mol/L NaOH}$ 、 $0.20\text{mol/L}$  和  $0.06\text{mol/L}$  三乙醇胺的透明混合溶液, 以包覆有  $60\text{nm TiO}_2$  致密层的 FTO 为衬底, 在  $40^\circ\text{C}$ 、 $50^\circ\text{C}$  和  $60^\circ\text{C}$  条件下成功获得了光滑、致密的 PbS 薄膜, 并对该 PbS 薄膜进行了 XRD、SEM、UV-Vis-NIR、UPS 表征和对 PbS/ $\text{TiO}_2$  异质结太阳能电池的光伏性能进行了研究。

结果表明, 在  $40^\circ\text{C}$ 、 $50^\circ\text{C}$  和  $60^\circ\text{C}$  条件下制备的 PbS 薄膜, 其禁带宽度分别为  $1.58\text{ eV}$ 、 $1.38\text{ eV}$  和  $1.20\text{ eV}$ , 功函分别为  $4.90\text{ eV}$ 、 $4.60\text{ eV}$  和  $4.50\text{ eV}$ , 结合 UPS 结果确定了 PbS 薄膜的价带最大值和导带最小值, 且在  $40^\circ\text{C}$  下得到的 PbS 薄膜组装的太阳电池在 1 个太阳光照下 ( $\text{AM1.5G}$ ,  $100\text{ mW}\times\text{cm}^2$ ) 获得了最高为 0.24% 的光电转换效率。

总之, 本文开发了一种透明的混合前驱体溶液, 在  $40^\circ\text{C}$ 、 $50^\circ\text{C}$  和  $60^\circ\text{C}$  下通过化学浴沉积得到了光滑、致密的 PbS 薄膜, 发现沉积温度对 PbS 晶粒大小和 PbS 薄膜禁带宽度的可调性有着重要影响, 通过化学浴法, 在  $40^\circ\text{C}$  的较低温度下可得到平均粒径为  $62\text{ nm}$  的 PbS 和具有  $1.58\text{ eV}$  禁带宽度的 PbS 薄膜, 这对开发和拓展化学浴法组装 PbS/ $\text{TiO}_2$  异质结太阳能电池有着重要参考意义。

关键词: PbS 薄膜; 化学浴; 异质结; 太阳能电池; 光伏性能

#### A04-PO05

##### 碘化亚铜薄膜的制备与光电特性研究

马锡英

苏州科技大学 215009

碘化亚铜 ( $\gamma\text{-CuI}$ ) 具有闪锌矿结构, 属于 p 型宽带隙高电导率的材料, 在钙钛矿太阳能电池、聚合物太阳能电池、异质结太阳能电池等太阳能电池领域中具有巨大的潜在应用价值。本文首先利用连续提拉法和化学气相沉积法在硅 (Si) 和石英玻璃衬底上制备 CuI 薄膜。通过原子力显微镜、X-射线衍射仪、分光光度计、霍尔效应仪等仪器探究了提拉次数和反应时间 ( $20\text{min}$ 、 $40\text{min}$ 、 $60\text{min}$ ) 对 CuI 薄膜光电特性和表面形貌结构的影响。发现随提拉次数和反应时间的增加, 薄膜的表面相貌越平整, 越容易获得大面积的薄膜样品, 光电特性也随时间的增加有所增强。同时还讨论了化学气相沉积法和连续提拉法, 这两种不同的对制备的 CuI 薄膜的光电特性的影响。通过实验数据的表征, 发现化学气象沉积法制备的 CuI 薄膜具有更好的光电特性。

关键词: 碘化亚铜; 提拉法; 化学气相沉积法; 光电特性

#### A04-PO06

##### 一种与高硼硅玻璃匹配封接的合金研究

蔡凯洪<sup>1</sup>, 杨兴<sup>2</sup>, 于敏<sup>1</sup>, 张磊<sup>2</sup>, 张静<sup>1</sup>, 张旭涛<sup>1</sup>

1. 北京北冶功能材料有限公司
2. 北京天瑞星光热技术有限公司

集热管是太阳能光热发电的核心装置, 管件采用的材料为高硼硅玻璃, 它的热膨胀系数比传统的硬玻璃更小, 这就要求相应的封接合金膨胀系数应该与之匹配, 以保证集热管的真空度。本文研究了一种与高硼硅玻璃匹配的膨胀合金 S4J29A, 此种合金有效的解决了高硼硅玻璃的封接问题。

本文利用热差分析仪, 测试了合金及高硼硅玻璃在不同温度条件下的热膨胀系数, 分析两种材料膨胀系数的匹配性; 利用扫描电镜、X 射线衍射仪等, 研究封接过程中氧化膜的形成与结构, 分析氧化温度、氧化时间对氧化膜的影响规律, 最终确定了高硼硅集热管封接的工艺参数。

关键词: 膨胀合金; 高硼硅玻璃; 封接

#### A04-PO07

##### 反蛋白石结构有机无机杂化钙钛矿薄膜的制备及其光学电学性能的研究

孟轲, 刘洲, 许乔飞, 胡有地, 陈刚

ShanghaiTech University 201210

一种新型有机无机杂化钙钛矿材料, 因其优异的光伏特性受到诸多关注。基于此种材料的太阳能电池光电转换效率已达到 20% 以上, 对传统晶硅电池提出了有力挑战。在不断追求高器件性能的同时, 此领域近期的研究热点集中在对钙钛矿薄膜材料进行微观尺度的结构设计与改造这一方面。本文将钙钛矿与反蛋白石结构两个研究热点相结合, 旨在制备具有优异光电性能的反蛋白石结构钙钛矿薄膜, 并对其结构和性能的关系进行系统性的研究。

本文研究方法包括薄膜制备和性能表征两方面。具体来讲, 首先, 应用自组装形成的聚苯乙烯微球模板, 使用模板辅助旋涂方法, 制作反蛋白石结构的钙钛矿薄膜。在此过程中, 通过改变聚苯乙烯微球的层数, 实现了反蛋白石结构钙钛矿薄膜的层数及厚度的精确控制。随后, 通过利用变角度反射光谱结合光学模拟仿真、应用各项电化学技术, 研究薄膜光学电学特性。

本项研究结果包括: 成功制备了高品质反蛋白石结构钙钛矿薄膜; 通过调节模板中聚苯乙烯微球的层数, 实现了钙钛矿反蛋白石结构从二维到三维的变化; 得到不同层数反蛋白石结构的精确形貌特征; 测得不同层数反蛋白石结构的吸收谱及变角反射光谱; 测得不同反蛋白石结构钙钛矿薄膜的导电性能。

本文的主要结论是: 通过模板辅助旋涂方法可以有效制得大面积有序的反蛋白石结构钙钛矿薄膜; 反蛋白石结构钙钛矿薄膜具有光子晶体性质, 通过改变薄膜层数, 可以调控薄膜的颜色; 相比本征钙钛矿薄膜, 反蛋白石结构钙钛矿薄膜具有更为优异的导电性能。这些反蛋白石结构钙钛矿薄膜的光电学特性, 展示了其在各类光电器件包括太阳能电池和光探测器等中的应用前景。

关键词: 钙钛矿; 反蛋白石结构

#### A04-PO08

##### 应力作用下 BaSi<sub>2</sub> 电子结构及光学性质研究

赵凤娟<sup>2</sup>, 张柏兰<sup>1</sup>

1. 贵阳学院
2. 贵州大学

采用基于第一性原理的密度泛函理论(Density Functional Theory)赝势法, 对各向同性形变下 BaSi<sub>2</sub> 的电子结构、态密度和光学性质进行了理论计算。计算结果表明, 当晶格常数从 93% 至 107% 依次进行形变时, BaSi<sub>2</sub> 的带隙会不规则变化。当晶格参数被压缩到标准值的 93% 时, BaSi<sub>2</sub> 的间接带隙值为 0.8286eV, 当晶

格参数被拉伸到标准值的 107% 时,  $\text{BaSi}_2$  的间接带隙值 0.8961eV。当晶格常数从 107% 至 93% 依次减小时, 介电函数曲线, 折射率曲线向高能方向漂移。静态介电函数随着晶格常数的减小而增加, 晶格压缩可以使吸收系数增大, 进而提高光电转换效率。

关键词:  $\text{BaSi}_2$ ; 第一性原理; 应力; 电子结构; 光学特性