



常州大學  
CHANGZHOU UNIVERSITY

# 神奇的钙钛矿光伏材料

张 帅

常州大学材料科学与工程学院



# 目录。

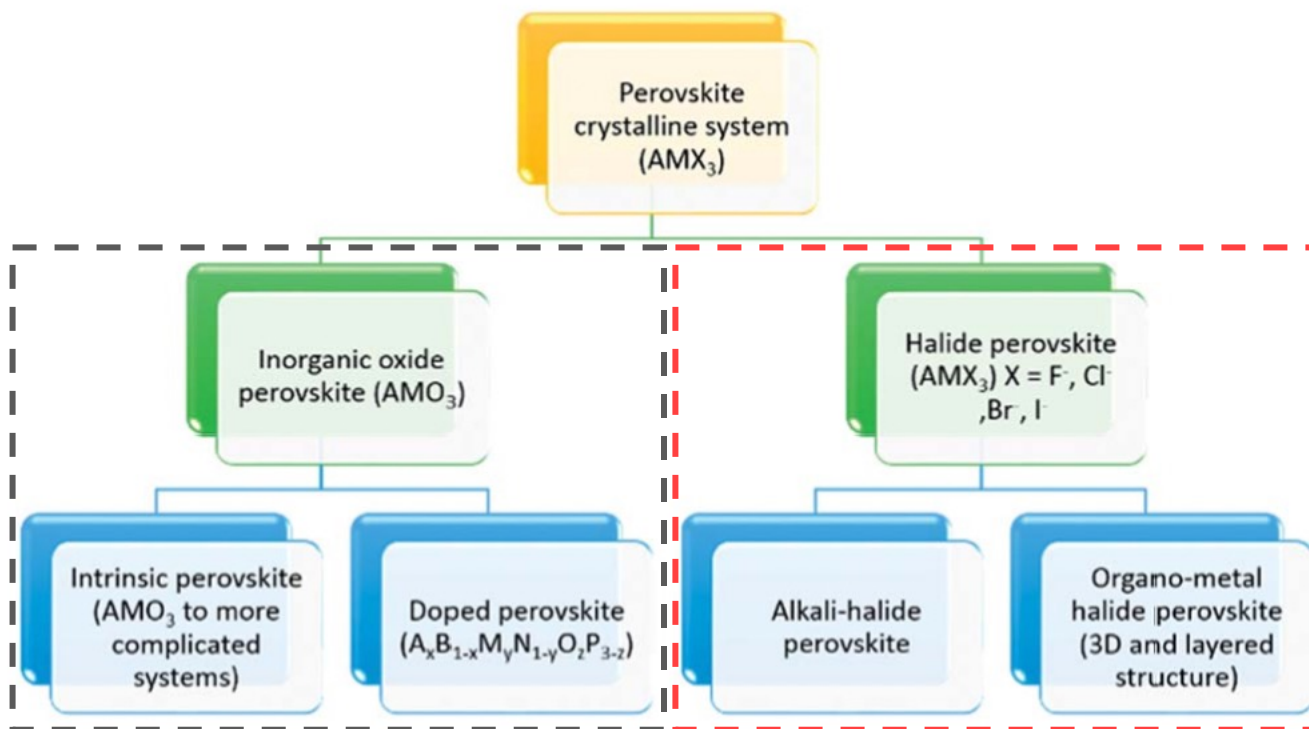
## CONTENT

**一、钙钛矿的历史**

**二、钙钛矿光伏材料的成分、结构和性质**

**三、钙钛矿薄膜的常见制备方法**





Energy Environ. Sci., 2014, 7, 2448

在2005年前，“钙钛矿”：钙钛矿结构的金属氧化物

1839年，古斯塔夫·罗斯发现并命名

化学式：AMX<sub>3</sub>，X：O

典型代表：BaTiO<sub>3</sub>、PbTiO<sub>3</sub>、SrTiO<sub>3</sub>、BiFeO<sub>3</sub>等

另一类钙钛矿：卤族阴离子，X：Cl、Br、I

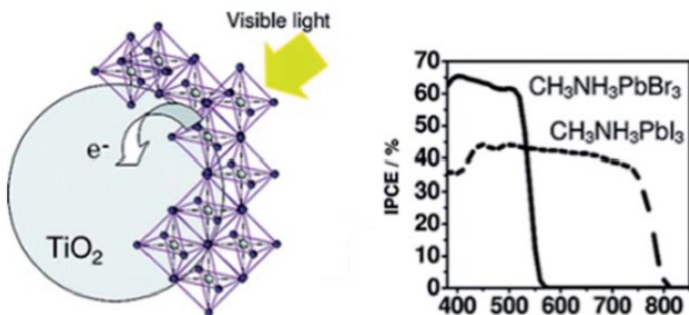
CsPbX<sub>3</sub> (X = Cl, Br, I)

其他阳离子（如CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub><sup>+</sup>）替代Cs<sup>+</sup>

应用于非线性光学、LED等领域



# 钙钛矿的历史

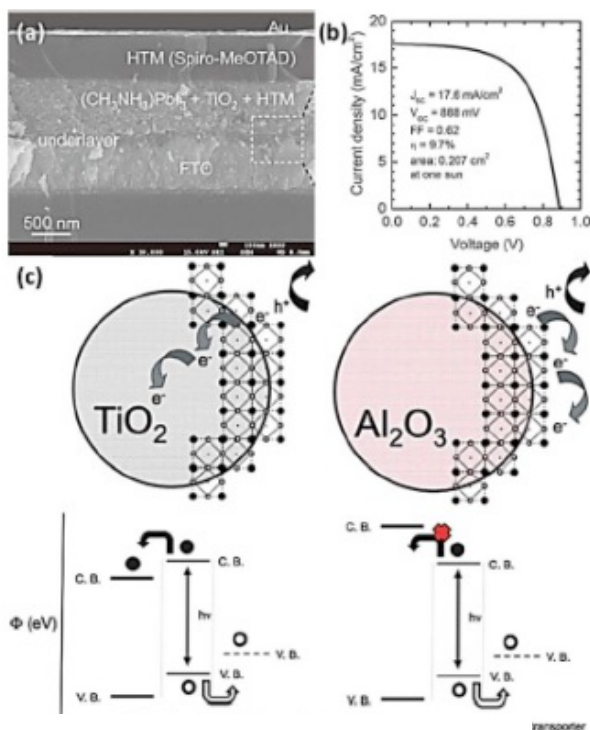


J. Am. Chem. Soc., 2009, 131, 6050

钙钛矿作为敏化剂-染料敏化太阳能电池

2009 Miyasaka *et al.*, 3-4%

2011 Park *et al.*, 钙钛矿纳米颗粒 (量子点敏化), 6.54%



2012 Grätzel *et al.*, 钙钛矿(TiO<sub>2</sub>)+固态空穴传输材料 (spiro-MeOTAD), 9.7%

2012 Snaith & Miyasaka *et al.*, 钙钛矿(Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)+固态空穴传输材料 (spiro-MeOTAD), 10.9%

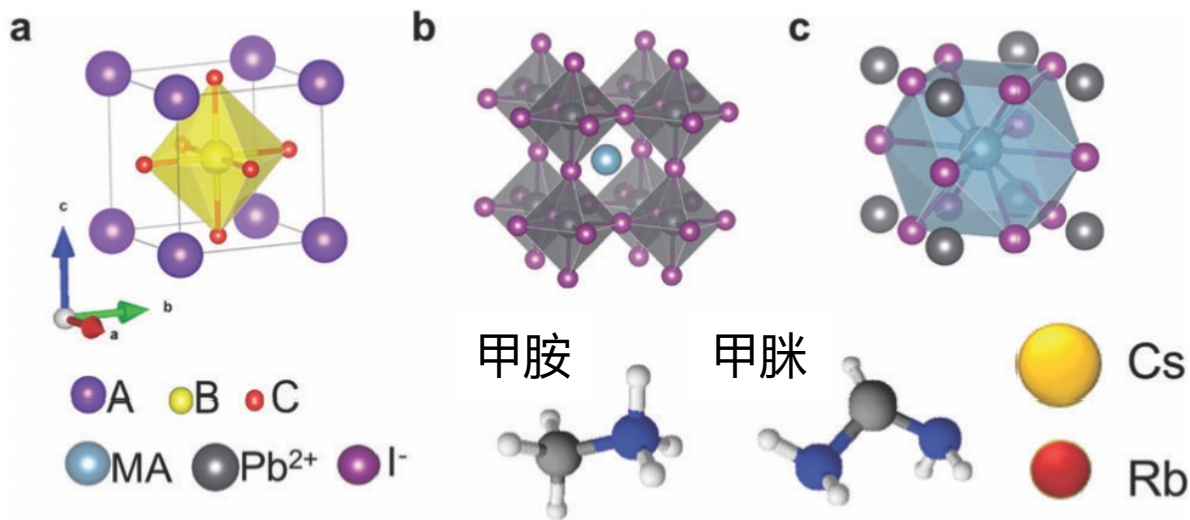
钙钛矿太阳能电池横空出世

Sci. Rep., 2012, 2, 591

Science, 2012, 338, 643



# 钙钛矿光伏材料的成分、结构和性质

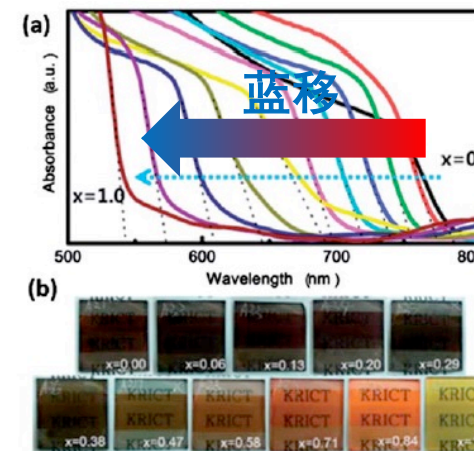


Energy Environ. Sci., 2017, 10, 710

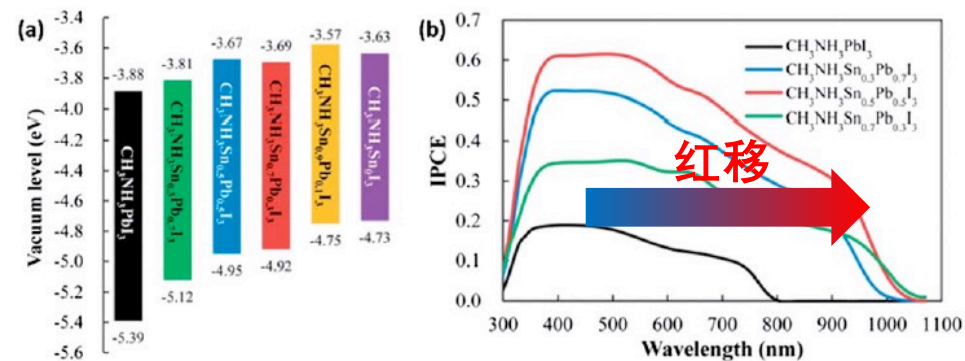
容忍因子  $t = \frac{(r_A + r_X)}{\sqrt{2}(r_M + r_X)}$   $0.813 < t < 1.107$

八面体因子  $\mu = \frac{r_M}{r_X}$   $0.442 < \mu < 0.895$

J. Phys. Chem. C 2014, 118, 5615



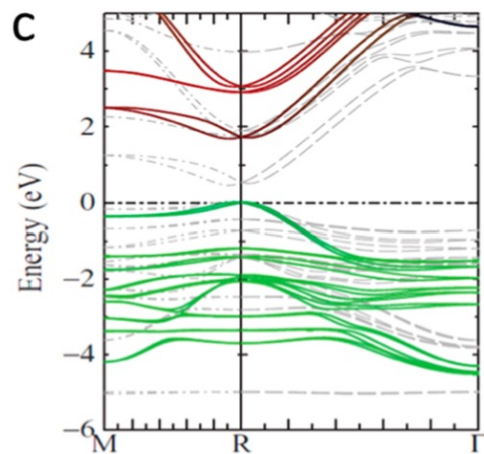
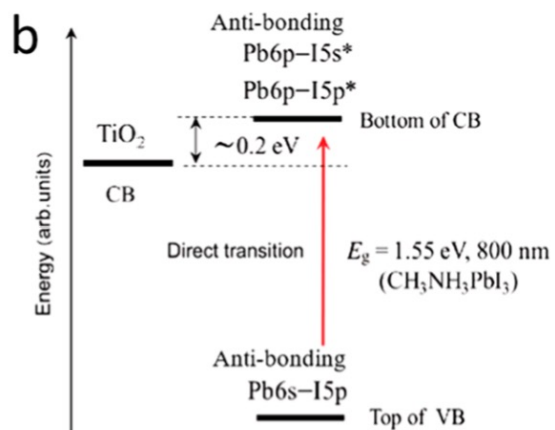
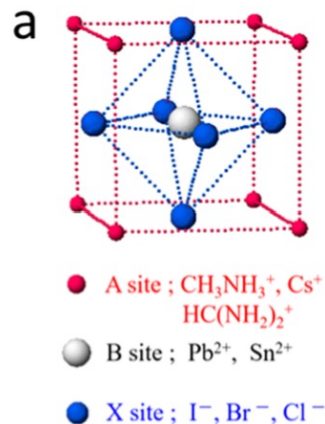
Nano Lett., 2013, 13, 1764



J. Phys. Chem. Lett., 2014, 5, 1004



# 钙钛矿光伏材料的成分、结构和性质



以 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ 为例:

VB: I 5p轨道 + Pb 6s<sup>2</sup>轨道

CB: Pb 6p轨道 + 其他轨道

VBM: Pb S-I p强反键耦合, 接近I p轨道

CBM: Pb P-I p弱反键耦合, 接近Pb p轨道

晶体的高度对称性, p-p直接带隙

钙钛矿作为光伏材料的优异特性:

高的光吸收系数 (优于GaAs)

缺陷能级浅, 载流子扩散距离长 (1-100  $\mu\text{m}$ )

具有双极性电导特性

带隙合适, 易调控

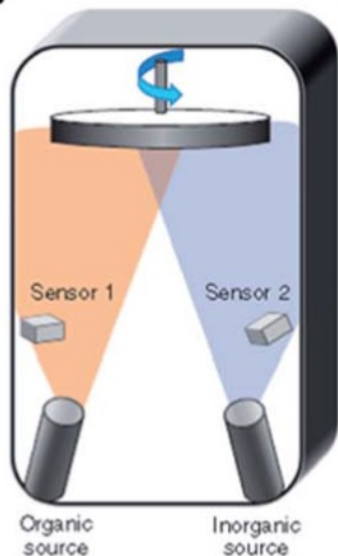
Chem. Rev. 2019, 119, 3036



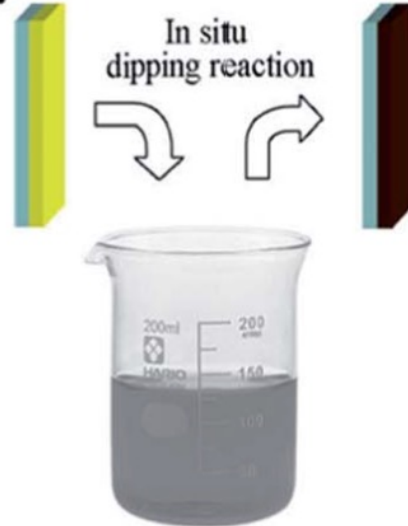
# 钙钛矿薄膜的常见制备方法



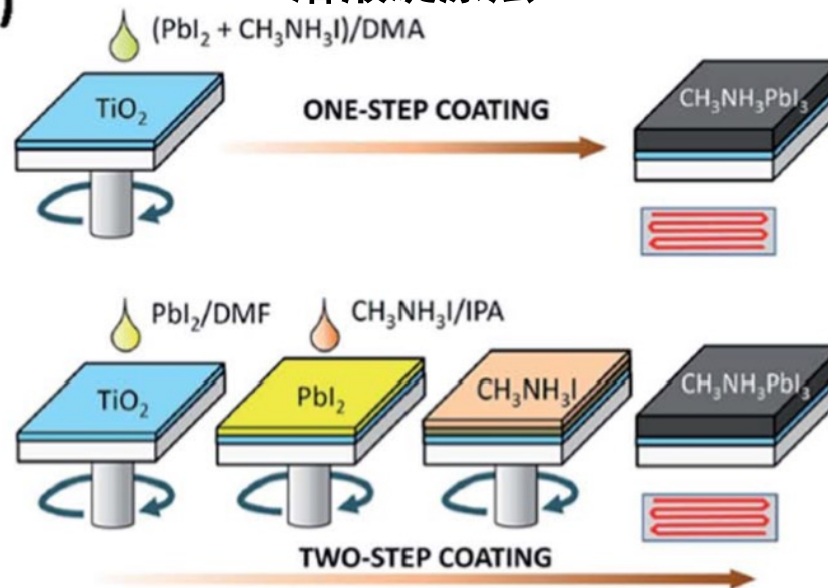
a) 双源气相沉积法



b) 两步溶液浸渍法

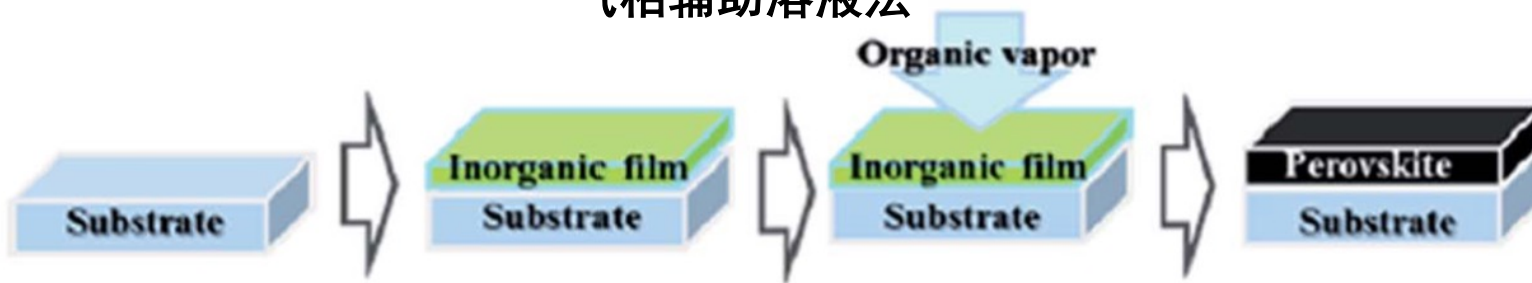


c) 溶液旋涂法



d)

气相辅助溶液法



J. Mater. Chem. A, 2015, 3, 9032

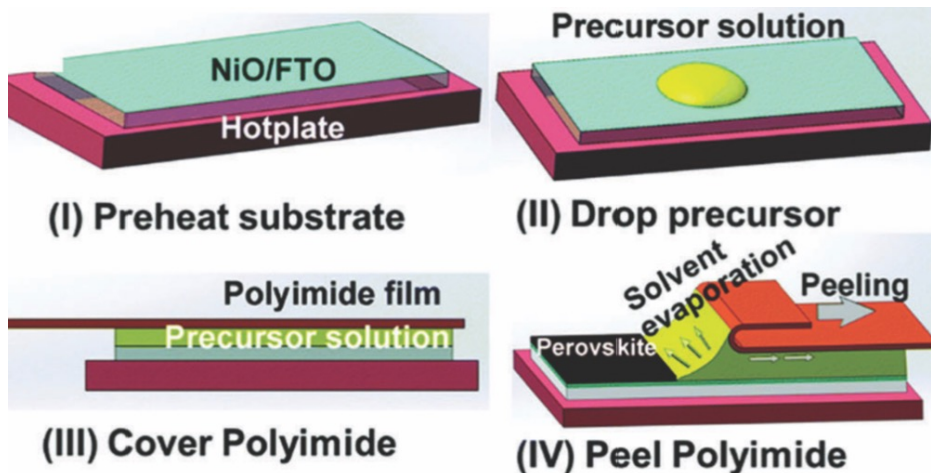


# 钙钛矿薄膜的常见制备方法

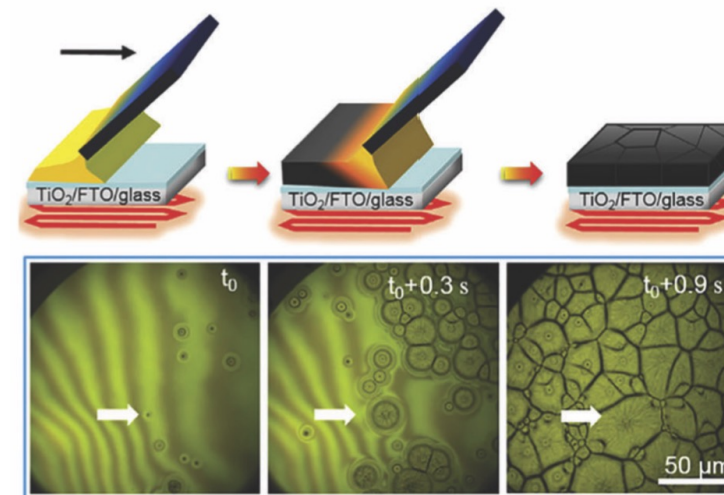


常州大学  
CHANGZHOU UNIVERSITY

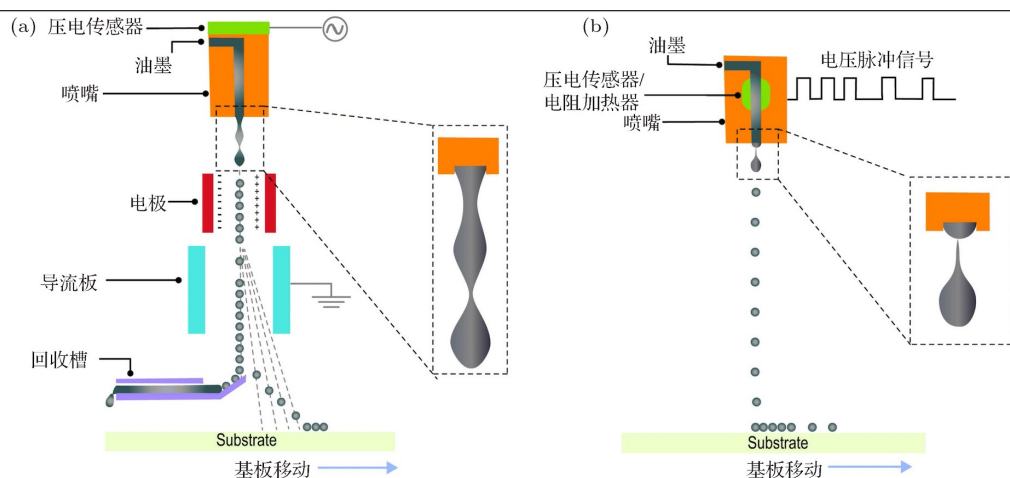
## 软覆盖沉积法



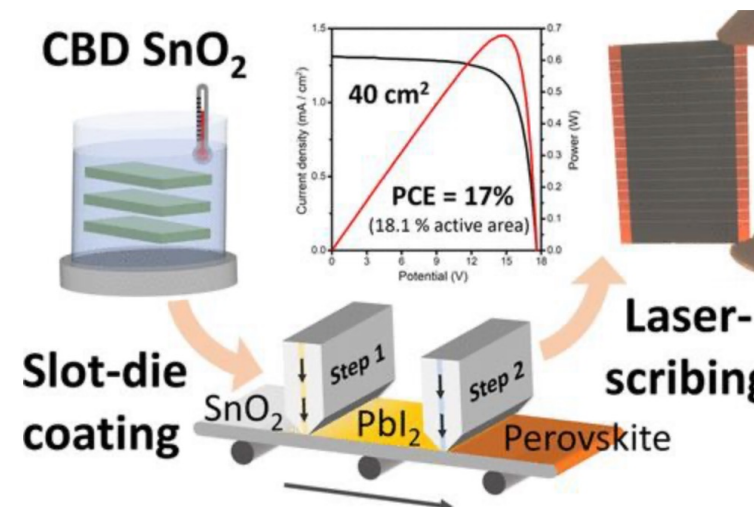
## 刮刀涂布法



## 喷墨打印法



## 狭缝涂布法



Energy Environ. Sci., 2019, 12, 518

ACS Appl. Mater. Interfaces 2022, 14, 11636





常州大學  
CHANGZHOU UNIVERSITY

谢谢观看

