



钙钛矿太阳能电池缺陷的饱和钝化

王思思, 王睿*

西湖大学工学院材料科学与工程系, 杭州 310024

* 联系人, E-mail: wangrui@westlake.edu.cn

Saturated passivation for perovskite solar cells

Sisi Wang & Rui Wang*

Department of Materials Science and Engineering, School of Engineering, Westlake University, Hangzhou 310024, China

* Corresponding author, E-mail: wangrui@westlake.edu.cn

doi: 10.1360/CSB-2025-5365

近年来, 钙钛矿太阳能电池(perovskite solar cells, PSCs)成为太阳能领域的“明星选手”^[1]. 它们不仅结构简单, 制备条件温和, 而且制造成本低廉^[2]. 最令人惊讶的是, 短短十几年间, 钙钛矿太阳能电池的效率从不足10%^[3]飞跃到超过27% (<https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency>), 几乎赶上了目前市场上主流的单晶硅太阳能电池. 这种飞速进步, 引发了全世界科学家和企业的密切关注.

钙钛矿究竟是什么? 简单来说, 钙钛矿晶体是一种特别的材料结构, 由有机分子和无机金属卤素离子交织组成. 可以把它想象成一个“骨架”, 无机部分像结实的钢筋, 有机部分则像柔软的橡胶带, 两者结合得恰到好处, 既稳固又灵活. 这种特殊结构让钙钛矿具备了优异的吸光性能和电荷运输能力, 是制造高效太阳能电池的绝佳材料. 但即便如此“天赋异禀”的钙钛矿, 也难免有自己的“缺点”——那就是缺陷. 缺陷就是材料里的一些“毛病”, 比如某个原子缺失了(空位)、多了一个不应该出现的原子(间隙), 或者晶格排列不完美, 甚至表面凹凸不平^[4]. 这些缺陷对电子和空穴(光生载流子)来说, 就像路上的坑洼, 容易让它们“绊倒”, 提前复合掉, 不能顺利流向电极, 造成能量浪费, 降低太阳能电池的效率^[5]. 更麻烦的是, 缺陷尤其集中在材料表面和界面位置, 这些地方直接接触空气中的水分和氧气, 很容易被腐蚀^[6], 导致材料性能下降甚至失效^[7]. 科学家一直在努力寻找方法, 减少或修复这些缺陷, 让钙钛矿材料更加稳定高效^[8].

传统上, 研究者会使用一种叫“钝化”的方法来修补缺陷^[9]. 所谓钝化, 就是用某种特殊分子或离子, 像修补工人一

样, 把这些坑洞填平或封住. 比如, 有的钝化剂带有可以和钙钛矿中铅离子结合的胺基、羧基等官能团, 通过化学键把缺陷“堵住”^[10]; 有的则在材料表面覆盖一层低维度的钙钛矿薄膜, 像给材料穿上一层保护衣^[11]; 还有一些会用稳定的离子替换容易产生缺陷的位置^[12].

不过, 这些传统钝化方法有一个棘手的问题——钝化剂的用量必须非常精准. 钝化剂少了, 缺陷修补不彻底, 效果不明显; 用多了, 剩下的钝化剂分子会堵在界面上, 反而妨碍电子流动, 降低器件效率, 甚至让低维钙钛矿过度生成, 阻塞电荷传输的道路. 如何找到那一“寸长一寸强”的合适浓度, 简直就像“走钢丝”, 难度极大.

面对这一困境, 我们提出了全新的“饱和钝化”(saturated passivation, 简称SP)策略, 流程示意图见图1^[13]. 这种方法的原理简单又聪明: 先不拘泥于钝化剂用量的精准控制, 而是先用一个远高于传统浓度的剂量, 让所有缺陷都有充足的钝化剂“喂饱”; 然后用特殊溶剂把多余、没用上的钝化剂冲洗干净, 确保界面不会被堵塞. 这样的两步走策略, 大大降低了对制备条件的依赖, 让钝化过程既全面又干净. 无论你的钙钛矿样品缺陷多少, 最后都能得到近乎饱和的修补效果, 同时保持界面畅通, 利于电子和空穴快速传输. 这对实现高效、稳定的太阳能电池至关重要.

那么, 冲洗用的溶剂怎么选呢? 这也是个学问. 我们发现, 含氟溶剂六氟异丙醇(FIPA)在其中发挥了关键作用. FIPA里的氟原子非常“挑剔”, 它们会和钝化剂分子中的胺基($-\text{NH}_3^+$)形成强氢键, 就像“门卫”一样, 暂时抓住钝化剂, 让它不要急

引用格式: 王思思, 王睿. 钙钛矿太阳能电池缺陷的饱和钝化. 科学通报, 2025, 70: 4595–4598

Wang S, Wang R. Saturated passivation for perovskite solar cells (in Chinese). Chin Sci Bull, 2025, 70: 4595–4598, doi: 10.1360/CSB-2025-5365

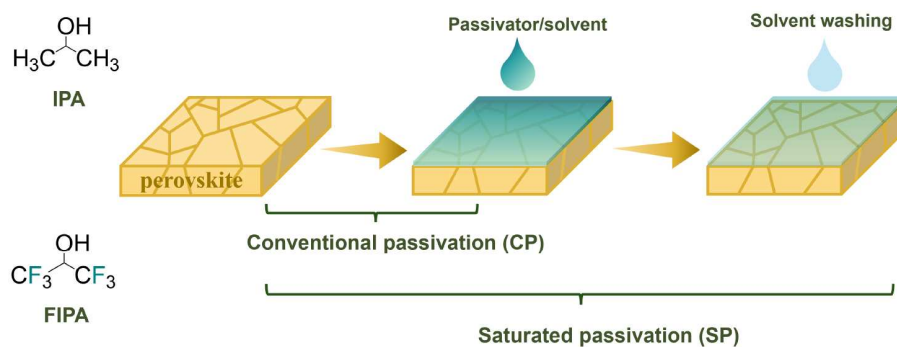


图1 (网络版彩色)FIPA和IPA分子结构示意图, 以及传统钝化(CP)和饱和钝化(SP)操作过程示意图^[13]

Figure 1 (Color online) Schematic representation of the molecular structure of FIPA and IPA and the processes involved in conventional passivation (CP) and saturated passivation (SP)^[13]

着跟钙钛矿中的铅离子反应。这个“拖延”效应带来了两个好处：一是避免钝化剂过快与钙钛矿中的 PbI_2 反应生成低维钙钛矿，保持材料三维结构完整；二是让钝化过程更加温和、可控，不会出现过量反应导致的性能波动。

我们用多种先进表征手段验证了这一机制。傅里叶变换红外光谱(FTIR)显示，钝化剂分子中的N-H振动峰在FIPA中明显变化，表明两者存在强烈相互作用。核磁共振(NMR)进一步揭示了氟原子和胺基之间的氢键结合方式。计算模拟(DFT)也证明了这种氢键减缓了钝化剂与钙钛矿的反应速度。在实验测试中，我们把传统的异丙醇(IPA)冲洗和FIPA冲洗效果做了对比。IPA冲洗虽然钝化效果不错，但高浓度时会生成妨碍电子传输的低维相，导致电池开路电压和填充因子下降。相比之下，FIPA冲洗能有效去除多余钝化剂，降低界面电阻，避免低维相堆积，界面更“干净”。不过，FIPA冲洗太“强力”，单独用时抑制非辐射复合的能力稍弱。于是，我们在FIPA中加入少量IPA(体积分数5%~40%)，既保留了FIPA调控反应的优势，又兼顾了IPA温和修复的特性。这样优化后的混合溶剂，让器件的光致发光强度和效率都有显著提升。在最佳条件下，钙钛矿太阳能电池效率超过了25%，且对钝化剂浓度的容忍度大幅增加，浓度在20~100 mmol L⁻¹范围内变化，效率几乎不受影响。这一成果意味着制备过程的难度和成本被大大降低，工业化生产变得更加可行和稳定。

此外，我们还将这一饱和钝化策略应用到了其他类型的钝化剂，比如辛胺对甲苯磺酸盐(OATsO)，依然取得了超过25%的高效率表现。以OATsO钝化的器件为例，其开路电压达到了1.185 V，填充因子为81.5%，短路电流密度为

26.49 mA cm⁻²，性能非常出色。相比之下，传统的固定浓度钝化剂在不同钙钛矿配方和制备工艺中往往适应性较差。例如，10 mmol L⁻¹ PEAI/IPA钝化在不同批次的 $\text{Cs}_{0.05}\text{FA}_{0.95}\text{PbI}_3$ 钙钛矿中表现不一。相较之下，采用SP钝化策略(比如使用20 mmol L⁻¹钝化剂溶于FIPA，并辅以15% IPA混合溶剂进行清洗)不仅在多种钙钛矿体系、不同制备方法及器件结构中均能有效提升功率转换效率，还展现出极佳的通用性(图2)。值得一提的是，这一策略同样适用于大面积器件(1 cm²)，能够显著减小面积增大带来的效率损失，体现出良好的规模化潜力。与此同时，采用浸渍法替代旋涂法进行钝化，也同样取得了优异的效果，不仅效率超过对照组，还显著降低了器件的迟滞现象。更令人关注的是，饱和钝化策略显著提升了器件的稳定性。未经封装的器件在65℃、连续光照1000 h后，依然保持了超过80%的初始效率，而传统钝化方法制备的对照组则出现了明显的性能衰减。这一稳定性的提升，对于钙钛矿太阳能电池的商业化推广尤为关键，因为器件的使用寿命和可靠性一直是限制其产业化的主要障碍。

我们提出的饱和钝化方法以“过量钝化剂投放+精准冲洗”为核心，结合FIPA溶剂的特殊氢键作用，成功解决了传统钝化剂用量精确控制的难题，实现了高效、稳定且普适的界面工程。这种方法不仅适用于多种钙钛矿配方和结构，也为规模化制备提供了坚实的技术保障^[13]。未来，结合原位X射线光电谱、时间分辨光谱等先进表征手段，深入揭示钝化剂、溶剂和钙钛矿晶体之间的实时相互作用，将有助于设计更加智能和自适应的钝化体系。

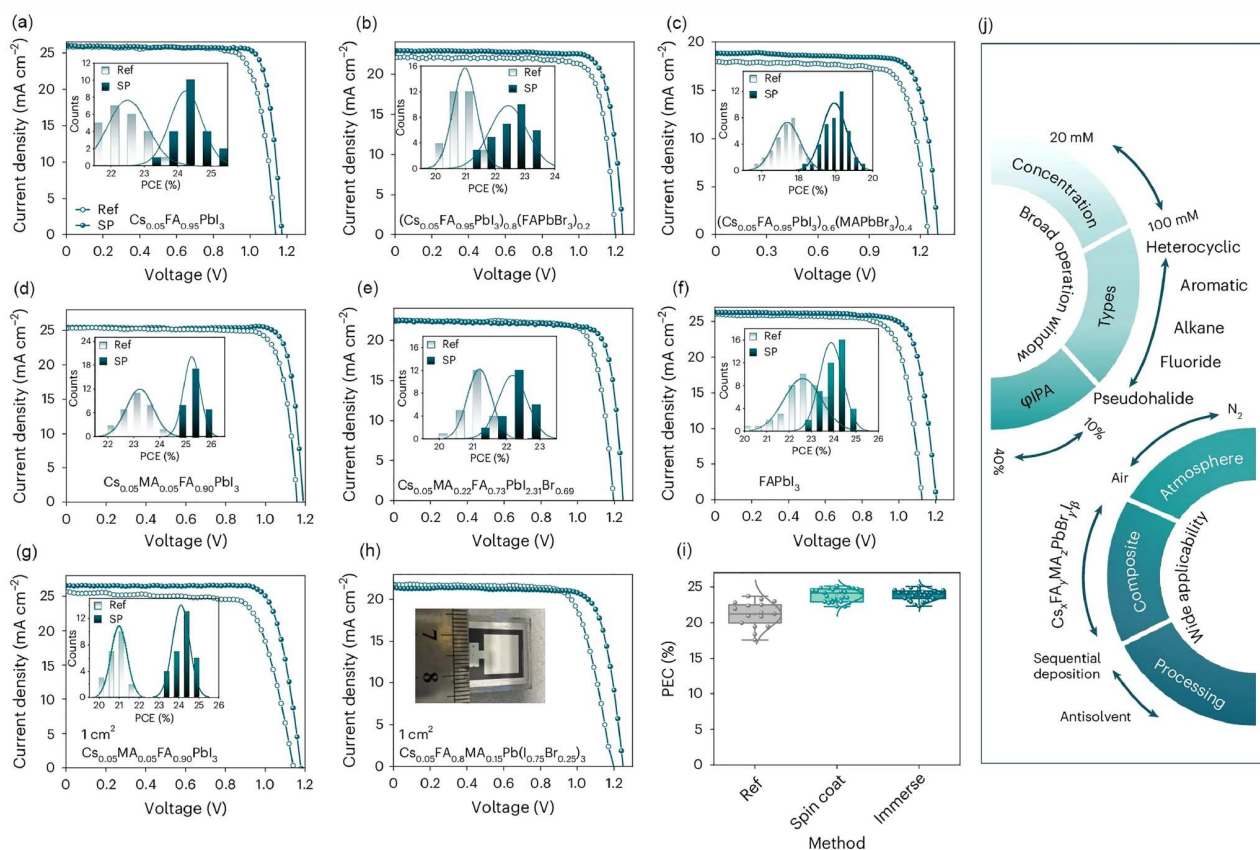


图 2 (网络版彩色)饱和钝化(SP)策略的普适性. (a)~(h) 采用不同钙钛矿组分及制备工艺制备的参比器件(Ref)和SP处理器件的 J - V 曲线. (a) ITO(氧化铟锡)/SAM(自组装分子层)/Cs_{0.05}FA_{0.95}PbI₃(PEAI)/LiF/C₆₀/BCP(浴铜灵)/Ag, 采用氮气中顺序沉积法制备. (b) ITO/SAM/(Cs_{0.05}FA_{0.95}PbI₃)_{0.8}(FAPbBr₃)_{0.2}(CF₃-PEAI)/LiF/C₆₀/BCP/Ag, 氮气中顺序沉积. (c) ITO/SAM/(Cs_{0.05}FA_{0.95}PbI₃)_{0.6}(MAPbBr₃)_{0.4}(CF₃-PEAI)/LiF/C₆₀/BCP/Ag, 氮气中顺序沉积. (d) ITO/SAM/Cs_{0.05}MA_{0.05}FA_{0.90}PbI₃(EDAI₂+2MTEAI)/LiF/C₆₀/BCP/Ag, 氮气中抗溶剂沉积. (e) ITO/SAM/Cs_{0.05}MA_{0.22}FA_{0.73}PbI_{2.31}Br_{0.69}(CF₃-PEAI)/LiF/C₆₀/BCP/Ag, 氮气中抗溶剂沉积. (f) FTO(氟掺杂氧化锡)/SnO₂/FAPbI₃(PEAI)/spiro-OMeTAD(2,2',7,7'-四[N,N'-二(4-甲氧基苯基)氨基]-9,9'-螺二苝)/MoO₃/Ag, 在空气(湿度25%~30%)环境下抗溶剂沉积. (g) 大面积(1 cm²)ITO/SAM/Cs_{0.05}MA_{0.05}FA_{0.90}PbI₃(EDAI₂+2MTEAI)/LiF/C₆₀/BCP/Ag, 氮气中抗溶剂沉积. (h) 大面积(1 cm²)ITO/SAM/Cs_{0.05}FA_{0.8}MA_{0.15}Pb(I_{0.75}Br_{0.25})₃(CF₃-PEAI)/LiF/C₆₀/BCP/Ag, 氮气中抗溶剂沉积, 插入器件实物照片. (i) SP策略中旋涂法与浸渍法制备器件的性能对比. (j) SP策略的通用性示意图, 说明该方法适用于多种钙钛矿体系及器件结构

Figure 2 (Color online) Generalizability of SP strategy. (a)~(h) J - V curves of reference device (Ref) and SP-based device under different fabrication processes and corresponding histogram inserted in it. (a) Indium tin oxide (ITO)/self-assembled monolayer (SAM)/Cs_{0.05}FA_{0.95}PbI₃(PEAI)/LiF/C₆₀/BCP/Ag, sequential deposition of perovskite in N₂ atmosphere. (b) ITO/SAM/(Cs_{0.05}FA_{0.95}PbI₃)_{0.8}(FAPbBr₃)_{0.2}(CF₃-PEAI)/LiF/C₆₀/BCP/Ag, sequential deposition of perovskite in N₂ atmosphere. (c) ITO/SAM/(Cs_{0.05}FA_{0.95}PbI₃)_{0.6}(MAPbBr₃)_{0.4}(CF₃-PEAI)/LiF/C₆₀/BCP/Ag, sequential deposition of perovskite in N₂ atmosphere. (d) ITO/SAM/Cs_{0.05}MA_{0.05}FA_{0.90}PbI₃(EDAI₂+2MTEAI)/LiF/C₆₀/BCP/Ag, antisolvent deposition of perovskite in N₂ atmosphere. (e) ITO/SAM/Cs_{0.05}MA_{0.22}FA_{0.73}PbI_{2.31}Br_{0.69}(CF₃-PEAI)/LiF/C₆₀/BCP/Ag, antisolvent deposition of perovskite in N₂ atmosphere. (f) FTO/SnO₂/FAPbI₃(PEAI)/spiro-OMeTAD/MoO₃/Ag, antisolvent deposition of perovskite in an air ambient with a humidity of 25%~30%. (g) 1 cm² ITO/SAM/Cs_{0.05}MA_{0.05}FA_{0.90}PbI₃(EDAI₂+2MTEAI)/LiF/C₆₀/BCP/Ag, antisolvent deposition of perovskite in N₂ atmosphere. (h) 1 cm² ITO/SAM/Cs_{0.05}FA_{0.8}MA_{0.15}Pb(I_{0.75}Br_{0.25})₃(CF₃-PEAI)/LiF/C₆₀/BCP/Ag, antisolvent deposition of perovskite in N₂ atmosphere and photograph of device inserted in it. (i) Comparison of the effects of SP strategies implemented by spin-coating and immersion methods. (j) Schematic representation of the universality of the SP strategy

推荐阅读文献

- Kim J Y, Lee J W, Jung H S, et al. High-efficiency perovskite solar cells. *Chem Rev*, 2020, 120: 7867–7918
- Liu S, Li J, Xiao W, et al. Buried interface molecular hybrid for inverted perovskite solar cells. *Nature*, 2024, 632: 536–542
- Kim H S, Lee C R, Im J H, et al. Lead iodide perovskite sensitized all-solid-state submicron thin film mesoscopic solar cell with efficiency exceeding 9%. *Sci Rep*, 2012, 2: 591

- 4 Guo Z, Yuan M, Chen G, et al. Understanding defects in perovskite solar cells through computation: current knowledge and future challenge. [Adv Sci](#), 2024, 11: 2305799
- 5 Ball J M, Petrozza A. Defects in perovskite-halides and their effects in solar cells. [Nat Energy](#), 2016, 1: 16149
- 6 Pathak S, Sepe A, Sadhanala A, et al. Atmospheric influence upon crystallization and electronic disorder and its impact on the photophysical properties of organic–inorganic perovskite solar cells. [ACS Nano](#), 2015, 9: 2311–2320
- 7 Ummadisingu A, Steier L, Seo J Y, et al. The effect of illumination on the formation of metal halide perovskite films. [Nature](#), 2017, 545: 208–212
- 8 Luo C, Gao F, Wang X, et al. Eliminating performance loss from perovskite films to solar cells. [Sci Adv](#), 2024, 10: eadp0790
- 9 Jiang Q, Zhao Y, Zhang X, et al. Surface passivation of perovskite film for efficient solar cells. [Nat Photonics](#), 2019, 13: 460–466
- 10 Alharbi E A, Alyamani A Y, Kubicki D J, et al. Atomic-level passivation mechanism of ammonium salts enabling highly efficient perovskite solar cells. [Nat Commun](#), 2019, 10: 3008
- 11 Peng J, Walter D, Ren Y, et al. Nanoscale localized contacts for high fill factors in polymer-passivated perovskite solar cells. [Science](#), 2021, 371: 390–395
- 12 Zhao Y, Ma F, Qu Z, et al. Inactive (PbI₂)₂RbCl stabilizes perovskite films for efficient solar cells. [Science](#), 2022, 377: 531–534
- 13 Wang S, Tian W, Cheng Z, et al. Fluorinated isopropanol for improved defect passivation and reproducibility in perovskite solar cells. [Nat Energy](#), 2025, doi: 10.1038/s41560-025-01791-z