

钙钛矿双功能钝化剂: 室温离子液体的机械化学制备

武文俊^{*,a} 李玉婷^b 冯茜^c 丁文星^d

(^a 华东理工大学 化学与分子工程学院 上海 200237)

(^b 华东理工大学 化工学院 上海 200237)

(^c 华东理工大学 材料科学与工程学院 上海 200237)

(^d 华东理工大学 药学院 上海 200237)

摘要 室温离子液体本身作为绿色溶剂的同时, 其绿色合成也面临着新的挑战. 机械化学又以其无溶剂、无须高温和高压等绿色过程为优势而逐渐发展成为新的学科. 本工作重点关注室温离子液体 1-甲基-3-苄基-咪唑碘的绿色合成与应用, 利用机械化学合成法, 直接将碘代苯甲烷和 *N*-甲基咪唑置于行星球磨机中球磨得到产物, 将产物应用于可印刷介观钙钛矿太阳能电池的晶体缺陷能级的钝化. 经用量优化后, 器件的短路电流密度(J_{sc})、填充因子(FF)和光电转换效率(PCE)分别从 16.19 mA·cm⁻²、68.04%和 10.00%提高至 17.59 mA·cm⁻²、71.89%和 11.47%. 这可归因于咪唑环上氮原子孤对电子对钙钛矿晶体表面未配位 Pb²⁺的电荷具有分散作用以及苯环大 π 键电子云与 I⁻间的静电作用对 I⁻迁移具有抑制作用, 进而约束了 Pb²⁺和碘空位对激发态电子的捕获, 因此大幅提升了器件的短路电流密度(J_{sc}), 为高性能新型钝化剂的制备开辟了新的路径.

关键词 离子液体; 机械化学; 可印刷介观钙钛矿太阳能电池; 钝化

Perovskite Dual-function Passivator: Room Temperature Ionic Liquid Obtained from Mechanochemical Preparation

Wu, Wenjun^{*,a} Li, Yuting^b Feng, Xi^c Ding, Wenxing^d

(^a School of Chemical and Molecular Engineering, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237)

(^b School of Chemical Engineering, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237)

(^c School of Material Science and Engineering, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237)

(^d School of Pharmacy, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237)

Abstract Although room temperature ionic liquids (RTILs) themselves are green solvents, their green synthesis faces great challenges actually. Mechanochemistry is developing as a new discipline with the advantages of solvent-free, green processes without high temperature and pressure. In this work, we obtained 1-methyl-3-benzyl-imidazolium iodide by directly mixing iodobenzenemethane and *N*-methylimidazole in a planetary ball mill using mechanochemical synthesis, and applied the product to passivate crystal defect energy levels in printable mesoscopic perovskite solar cells. Unlike ordinary thermochemical reactions, the reaction power of mechanochemistry is mechanical energy rather than thermal energy, so the reaction can be completed without high temperature, high pressure and other harsh conditions, and the whole experimental process is green and convenient. After dosage optimization, the short-circuit current density (J_{sc}), fill factor (FF) and photoelectric conversion efficiency (PCE) of the solar cells increase from 16.19 mA·cm⁻², 68.04% and 10.00% to 17.59 mA·cm⁻², 71.89% and 11.47%, respectively. Combining scanning electron microscopy (SEM) images, X-ray diffraction (XRD) tests, photoluminescence (PL) tests, time-resolved fluorescence spectroscopy (TRPL) tests, and X-ray photoelectron spectroscopy (XPS), we demonstrated that, on the one hand, the lone pair of electrons of the nitrogen atom on the imidazole ring has a dispersing effect on the charge of uncoordinated Pb²⁺ on the surface of the perovskite crystal, and on the other hand, the electrostatic interaction between the large π -bonded electron cloud of the benzene ring and I⁻ has an inhibiting effect on the migration of I⁻, which in turn constrains the capture of excited state electrons by Pb²⁺ and iodine vacancies. Thus, we believe that the introduction of the rational ionic liquid 1-methyl-3-benzyl-imidazolium iodide effectively enhances the short-circuit current density (J_{sc}) of the device, which opens a new pathway for the preparation and synthesis of new high-performance passivators.

Keywords ionic liquid; mechanochemistry; printable mesoscopic perovskite solar cells; passivation

* E-mail: wjwu@ecust.edu.cn

Received August 30, 2022; published October 25, 2022.

Supporting information for this article is available free of charge via the Internet at <http://sioc-journal.cn>.

Project supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 22075083).

项目受国家自然科学基金(No. 22075083)资助.

1 引言

为了实现 2030 年前碳达峰, 2060 年前碳中和, 光电必将在未来电力需求增长中占主导地位. 钙钛矿太阳能电池作为第三代太阳能电池, 更是以 25.5% 的高光电转换效率脱颖而出. 而钙钛矿结晶过程难免会形成一定的缺陷, 比如未配位的 Pb^{2+} 、碘空位和甲胺空位等, 尤其是前两者居多(大量的事实已证明, 碘离子在器件内部存在迁移现象). 缺陷态的存在, 可捕获激发态电子, 因而限制光电流密度的提升. 目前, 抑制缺陷态能级的有效手段就是引入钝化剂. 例如在该光电体系内引入富勒烯衍生物 PCBM ([6,6]-苯基-C61-丁酸甲酯)^[1]、Lewis 碱有机小分子^[2-3]、有机光敏染料^[4]. 最近, 离子液体因其具有高光学透过性、导电性、电荷迁移特性和无挥发性^[5-6]等优点而作为全新的钝化剂引起了广泛的关注.

另外, 20 世纪 90 年代初, Rowlands 等^[7]首先将机械化学方法用于含卤有机物处理, 开展了 DDT(双对氯苯基三氯乙烷)与氧化钙混合球磨处理试验, 结果发现球磨 12 h 后, 其中有机氯化物全部转化为氯化钙和石墨, 采用 GC/MS(气相色谱质谱联用仪)在产物中检测不出有机物. 此神奇效果引起了人们广泛关注, 由此揭开了含卤有机物机械化学处理研究序幕. 目前, 机械化学已发展为一门研究物料在机械力诱发和作用下发生物理、化学反应或者内部微观结构变化的新兴学科. 与普通热化学反应不同, 机械化学的反应动力是机械能而非热能, 因此反应无须高温、高压等苛刻条件即可完成, 整个实验过程绿色、便捷^[8].

本工作尝试利用机械化学的方法合成可印刷介观钙钛矿太阳能电池离子液体钝化剂 1-甲基-3-苄基咪唑碘. 借助咪唑环氮原子的孤对电子对未配位 Pb^{2+} 电荷的分散作用以及苯环大 π 键与 I⁻ 的静电排斥作用对 I⁻ 迁移的抑制作用, 进而约束了 Pb^{2+} 对激发态电子的捕获. 另外, 该离子液体的 I⁻ 还可对碘空位进行离子弥补, 因而实现对钙钛矿的多功能钝化作用(图 1). 最终器件的光电转换效率从 10.00% 提升到了 11.47%, 为高性能新型钝化剂的制备开辟了新的路径.

2 结果与讨论

2.1 电极形貌表征

为了探究离子液体 1-甲基-3-苄基咪唑碘对电极形貌的影响, 我们利用扫描电子显微镜(SEM)观察了对照组和最优实验组(IL-30)器件表面和截面的形貌(图 2).

根据器件组装的印刷工艺, 在图 2a 和 2b 中, 从上往下分别为致密 TiO_2 层、介孔 TiO_2 层、介孔 ZrO_2 层和碳层. 如图 2a 所示, 介孔 TiO_2 层和介孔 ZrO_2 层存在明显的松散现象, 这是由于钙钛矿填充效果较差导致的; 而在图 2b 中, 钙钛矿在介孔 TiO_2 和介孔 ZrO_2 层填充紧密且均匀, 有利于钙钛矿晶体与电子传输层充分接触, 从而有利于电荷的传输, 进而提高其短路电流密度. 可见加入离子液体有利于钙钛矿在介孔层的填充.

对比图 2c 和 2d, 从对照组(MAPbI₃(甲基铵碘化铅), Control)到 IL-30, 晶粒尺寸没有明显变化, 而在 IL-30 中我们可以看到钙钛矿膜表面明显变得光滑, 表明加入离子液体改善了钙钛矿的成膜性. 钙钛矿晶体膜更加致密, 有利于电荷的传输, 减少表面电子复合, 进而提高电荷传输效率.

为了进一步研究离子液体 1-甲基-3-苄基咪唑碘引入前后对钙钛矿的晶型和结晶的影响, 我们分别测试了 Control 组和 IL-30 组基于 TiO_2 (图 3a)和 ZrO_2 (图 3b)基底的钙钛矿的 X-射线衍射(XRD)图谱. 由于基底是介孔层, 其结晶度具有一定的随机性, 但对比图 3a 和 3b, 引入离子液体后, 未产生新的晶型, 表明离子液体未进入钙钛矿的晶格, 只是作用于晶界处. 另外, 在 TiO_2 基底上明显比 ZrO_2 基底上钙钛矿的结晶强度更高, 表明离子液体的加入, 对钙钛矿在 TiO_2 介孔层内部结晶更加有利.

2.2 1-甲基-3-苄基咪唑碘与钙钛矿之间的相互作用

为了探究离子液体 1-甲基-3-苄基咪唑碘与钙钛矿层的相互作用, 我们分别以绝缘层 ZrO_2 和导电层 TiO_2 为基底, 测试了 Control 组和 IL-30 组的光致发光(PL)性能(图 4). 如图 4a 所示, 经离子液体 1-甲基-3-苄基咪

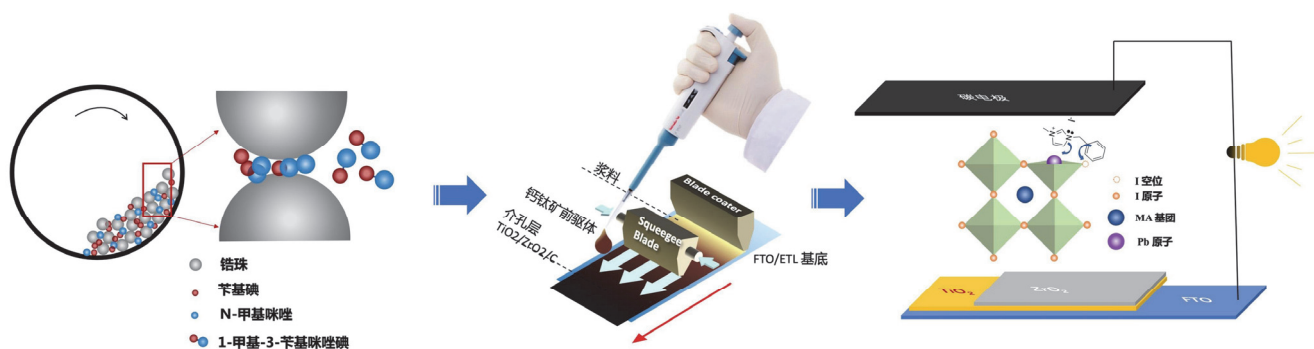


图 1 离子液体的机械化学制备及太阳能电池组装和基本结构(包括钝化位点)示意图

Figure 1 Schematic diagram of ionic liquid from mechanochemical preparation, to solar cell assembly and basic structure (including passivation sites)

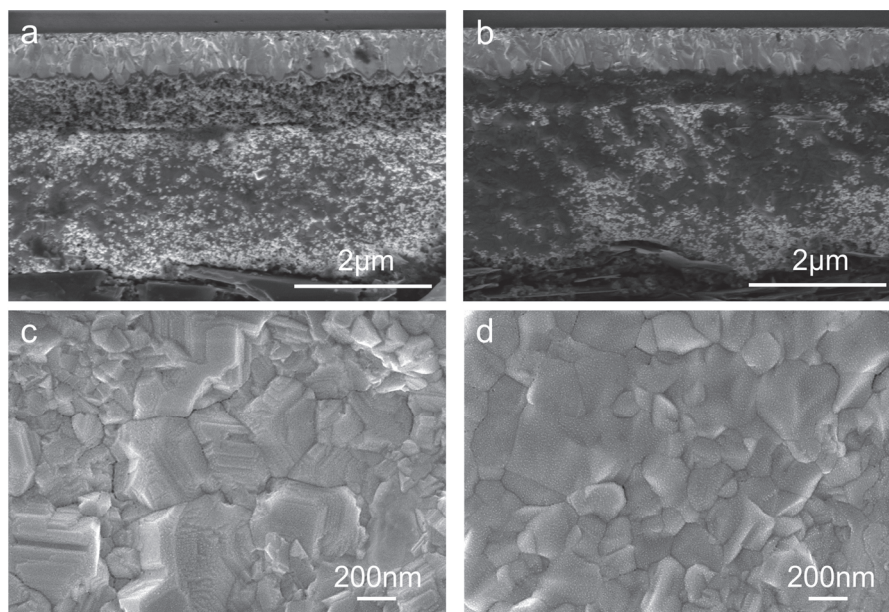


图2 (a)对照组和(b) IL-30 的钙钛矿电池截面 SEM 图; (c)对照组和(d) IL-30 钙钛矿在 TiO_2 表面的结晶情况

Figure 2 Cross-section SEM images of (a) control device and (b) IL-30 device; crystallization of perovskite on TiO_2 surface of (c) control device and (d) IL-30 device

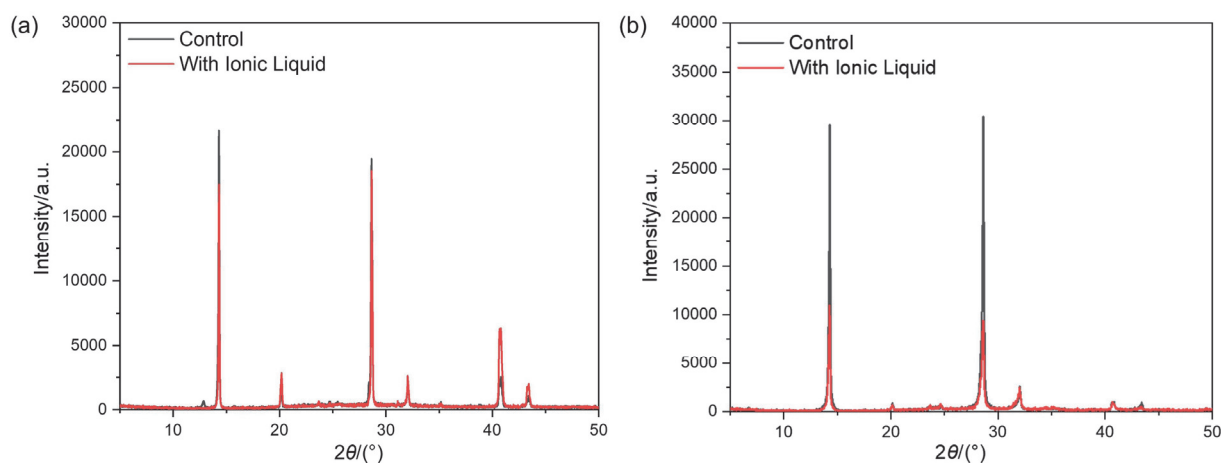


图3 基于对照组和 IL-30 的 TiO_2 (a)和 ZrO_2 (b)基底上的 XRD 图

Figure 3 XRD patterns on TiO_2 (a) and ZrO_2 (b) substrates based on control device and IL-30 device

唑啉修饰, 钙钛矿薄膜的 PL 强度明显高于对照组, 表明离子液体 1-甲基-3-苄基咪唑啉的钝化作用, 对于缺陷态的修复抑制了薄膜内的电荷复合, 可产生更多的激子; 而基于导电基底(图 4b), 经离子液体修饰的 IL-30 组荧光强度大幅降低. 表明其钝化作用提升了电荷的注入效率, 更少的残留激子用于产生荧光; 也表明经离子液体的钝化, 有利于电荷的注入和收集.

同时, 我们还测试了 Control 组和 IL-30 组在绝缘 ZrO_2 和导电 TiO_2 基底的时间分辨荧光光谱(TRPL)(图 4). 如图 4c 所示, 在绝缘基底上, IL-30 组的荧光平均衰减时间(τ_{ave})为 244.69 ns, 而 Control 组为 185.16 ns. 更长的荧光寿命表明钙钛矿薄膜可产生更多的电子-空穴对, 这意味着 1-甲基-3-苄基咪唑啉的钝化作用可有效降低晶界处的缺陷态密度; 而基于导电基底(图 4d), TRPL 的

τ_{ave} 从 Control 组的 111.41 ns 降低至 IL-30 组的 56.73 ns. 表明经离子液体修饰, 有利于提升钙钛矿晶体界面的电荷提取效率. 图 4c 和 4d 的测试结果与图 4a 和 4b 的测试结果一致^[9].

为了进一步探究 1-甲基-3-苄基咪唑啉与钙钛矿之间的相互作用, 我们利用 X-射线光电子能谱(XPS)分别对 Control 组和 IL-30 组进行了表征(图 5). 图 5a 为 Pb 元素的 XPS 图谱, 对照组和 IL-30 组的 $\text{Pb-4f}_{7/2}$ 轨道结合能分别为 142.10 eV 和 141.90 eV, $\text{Pb-4f}_{5/2}$ 轨道结合能分别为 137.20 eV 和 137.10 eV. $\text{Pb-4f}_{7/2}$ 和 $\text{Pb-4f}_{5/2}$ 轨道分别向低结合能方向移动 0.2 eV 和 0.1 eV, 表明离子液体的氮原子孤对电子对未完全配位的 Pb^{2+} 的给电子钝化作用; 而图 5b 则给出碘元素的 XPS 图谱, 对照组和 IL-30 的 $\text{I-3d}_{5/2}$ 轨道结合能分别为 629.60 eV 和 629.40

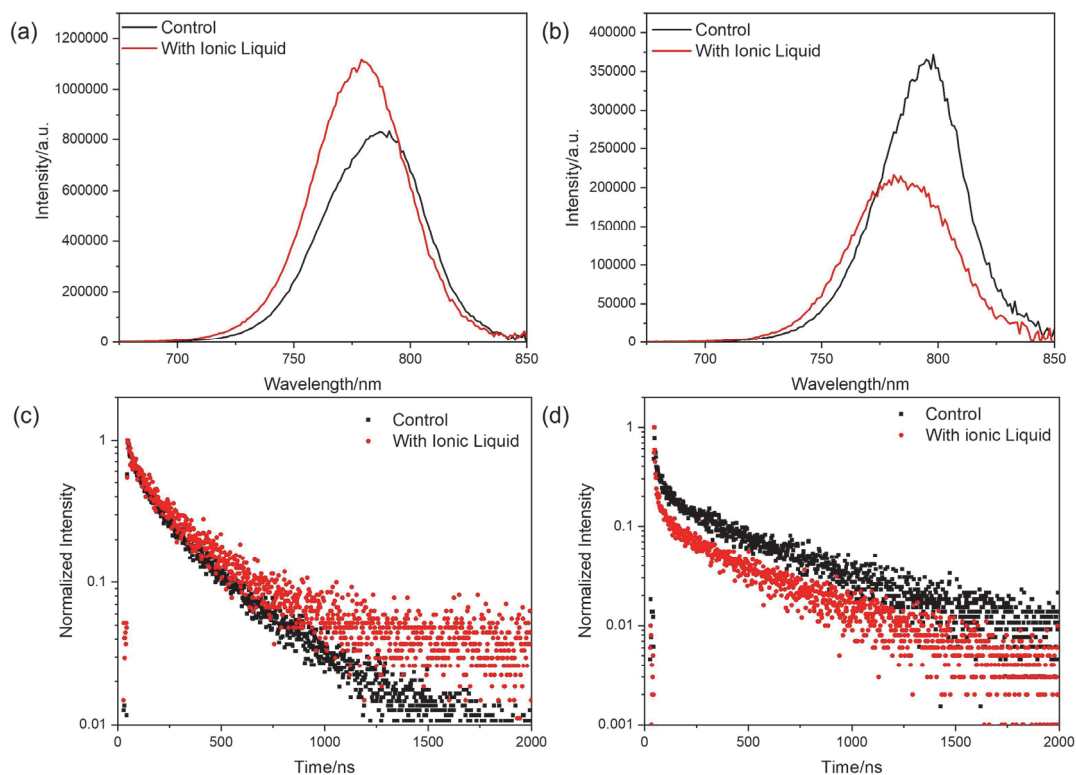


图4 对照组和 IL-30 在(a)玻璃/ZrO₂和(b)玻璃/FTO/TiO₂上的稳态发光光谱; 对照组和 IL-30 在(c)玻璃/ZrO₂和(d)玻璃/FTO/TiO₂上的时间分辨光致发光光谱

Figure 4 Steady-state luminescence spectra of control device and IL-30 device on (a) glass/ZrO₂ and (b) glass/FTO/TiO₂; time-resolved photoluminescence spectra of control device and IL-30 device on (c) glass/ZrO₂ and (d) glass/FTO/TiO₂

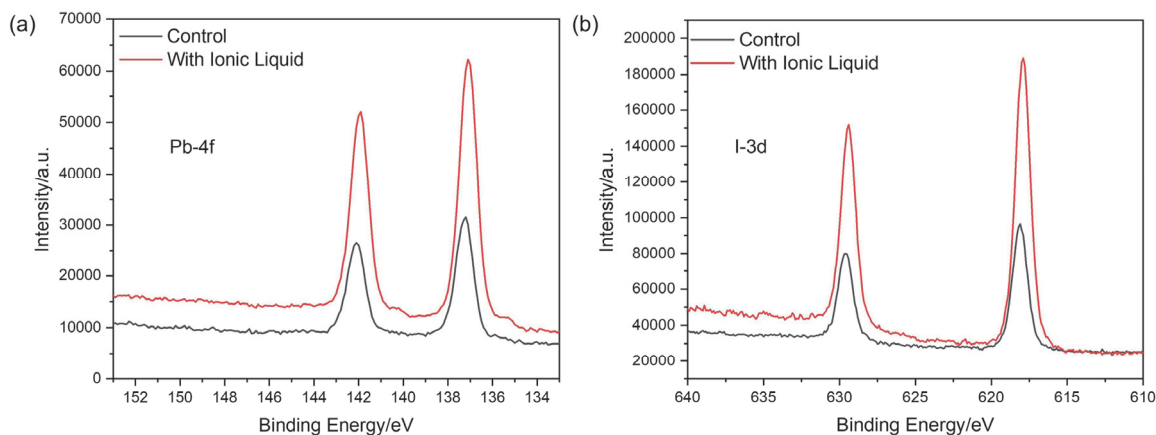


图5 基于对照组和 IL-30 的钙钛矿膜的 XPS 图

Figure 5 XPS images of perovskite membranes of control device and IL-30 device

eV, I-3d_{3/2} 轨道结合能分别为 618.10 eV 和 617.90 eV, 两轨道均向低结合能方向移动 0.2 eV. 这是苯环的大 π 键对 I 的静电作用增强了其表面电子云密度所致^[10].

2.3 1-甲基-3-苄基咪唑碘的合成与表征

本实验所合成的离子液体 1-甲基-3-苄基咪唑碘, 是通过机械化学的创新方法将碘代苯甲烷和 *N*-甲基咪唑进行烷基化反应, 在不利用任何溶剂和反应装置的情况下, 一步得到产物. 最终得到产品约 1.3 mg, 产率为

61.90%, 所得产物利用核磁氢谱进行确认(见 Supporting Information, 图 S1).

2.4 基于离子液体钝化作用的可印刷介观钙钛矿太阳能电池光伏性能

对于离子液体 1-甲基-3-苄基咪唑碘对可印刷介观钙钛矿太阳能电池缺陷态钝化性能表征, 主要通过光电性能的变化情况进行间接表征. 将钙钛矿前驱体(对照组), IL-20, IL-30 和 IL-40(编号的意义见 4.2.2 节)分别

用来组装太阳能电池光伏器件, 测试所得具体的光电性能参数列于表 1.

表 1 基于对照组(Control), **IL-20**, **IL-30** 和 **IL-40** 的可印刷介观钙钛矿太阳能电池光伏性能参数

Table 1 Photovoltaic performance parameters of printable mesoscopic perovskite solar cells based on the control group, **IL-20**, **IL-30** and **IL-40**

样品	V_{oc}/V	$J_{sc}/(mA \cdot cm^{-2})$	FF/%	PCE/%
Control	0.91	16.19	68.04	10.00
IL-20	0.89	16.70	72.57	10.82
IL-30	0.91	17.59	71.89	11.47
IL-40	0.90	18.60	66.03	11.00

随着加入离子液体的量从 $20 \text{ mg} \cdot \text{mL}^{-1}$ 增加到 $40 \text{ mg} \cdot \text{mL}^{-1}$, 器件的开路电压 V_{oc} 并未发生明显的变化, 均为 $(0.90 \pm 0.01) \text{ V}$. 而短路电流密度则从对照组的 $16.19 \text{ mA} \cdot \text{cm}^{-2}$ 增加到 $18.60 \text{ mA} \cdot \text{cm}^{-2}$. 这可归因于咪唑环上氮原子的孤对电子与钙钛矿晶体表面未配位的 Pb^{2+} 相结合, 分散其表面正电荷, 从而降低了 Pb^{2+} 对激发态电子的捕获作用; 而其侧链苯环上的大 π 键具有高密度电子云, 与钙钛矿八面体晶体中的 I^- 形成静电排斥作用, 进而抑制了 I^- 的迁移. 因为 I^- 迁移形成的碘空位同样可形成正电缺陷中心来捕获激发态电子. 但随着离子液体浓度的增加, 填充因子从 **IL-20** 的 72.57% 降低至 **IL-40** 的 66.03%, 这可能因为随着离子液体用量的增大, 钙钛矿晶体与碳电极被间隔开来, 阻碍了电子的跨界面试传输^[11]. 最终, 基于 **IL-30** 的样品, 我们得到了最佳的光电转换效率(PCE). 基于对照组(Control)和 **IL-30** 的可印刷介观钙钛矿太阳能电池的 $J-V$ 特性曲线见图 6a. 为了进一步确认所得 $J-V$ 特性曲线的有效性, 以及离子液体钝化后在不同波段可见光光电转换特性的影响, 我们

测试了对照组(Control)和 **IL-30** 的单色入射光光电转换效率图谱(IPCE)(图 6b).

如图 6b 所示, 基于对照组和 **IL-30** 的 IPCE 曲线形状, 除大小区别外几乎一致. 这表明离子液体的引入并未破坏钙钛矿晶体基本形貌. 由于离子液体的钝化作用, 从 $340 \sim 760 \text{ nm}$, **IL-30** 的 IPCE 值均高于对照组, 钙钛矿有效捕获了入射光子, 产生了较高的电流密度, 最大值从 59% 提高至 65%, IPCE 达到优化, 积分电流的趋势与 $J-V$ 结果中的短路电流密度吻合^[12].

离子液体对钙钛矿太阳能电池的钝化作用必然可提升器件抑制电荷复合的能力. 如图 S2(见 Supporting Information), 在开路电压(-0.80 V 左右)暗态下的交流阻抗谱图测试结果中, 谱图所对应半圆与 X 轴的两交点的差值对应于器件的电荷复合电阻. 显然, **IL-30** 对应器件的复合电阻要比对照组的大, 表明通过离子液体的钝化作用, 可显著提升器件抑制电荷复合的能力, 有利于有效的电子提取和传输, 这也是其短路电流密度提升的主要原因, 其结果与 $J-V$ 测试结果相一致.

3 结论

本实验将机械化学方法(球磨法)引入到离子液体 1-甲基-3-苄基咪唑碘的制备过程, 并将产物应用于可印刷介观钙钛矿太阳能电池的钝化. 实现了离子液体的绿色制备和绿色应用. 测试结果表明, 通过离子液体咪唑环氮原子孤对电子对钙钛矿晶体表面未配位的 Pb^{2+} 电荷的分散作用和苯环对八面体 I^- 的迁移的抑制作用, 实现了对钙钛矿晶体的双功能钝化. 最终将器件的短路电流密度(J_{sc})、填充因子(FF)和光电转换效率(PCE)分别从 $16.19 \text{ mA} \cdot \text{cm}^{-2}$ 、68.04% 和 10.00% 提高至 $17.59 \text{ mA} \cdot \text{cm}^{-2}$ 、71.89% 和 11.47%. 并且由于离子液体的钝化作用, 显著提升了器件电荷复合阻抗.

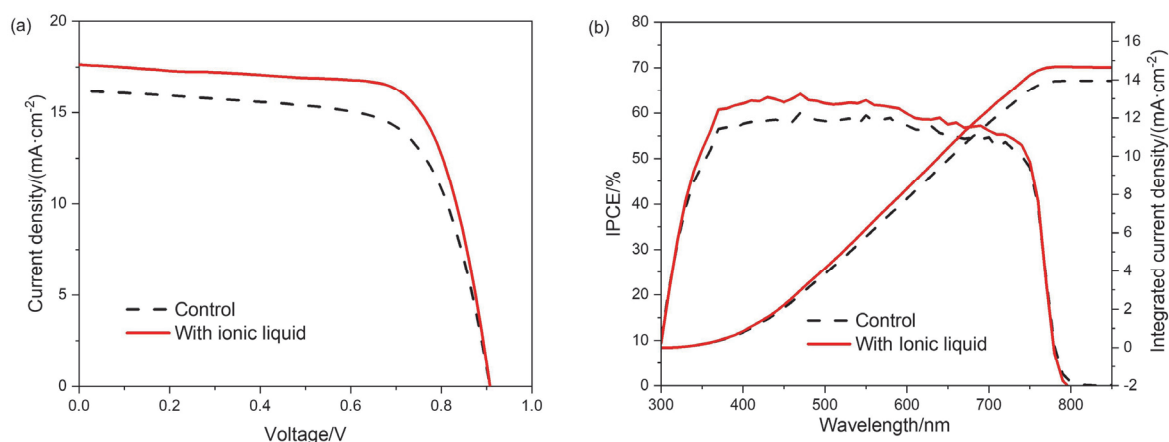


图 6 基于对照组和 **IL-30** 的(a)钙钛矿太阳能电池的 $J-V$ 特性曲线; (b)单色入射光光电转换效率图谱(IPCE)和积分电流密度
Figure 6 (a) $J-V$ characteristic curves of perovskite solar cells; (b) monochromatic incident light photovoltaic conversion efficiency profile (IPCE) and integrated current density based on control device and **IL-30** device

4 实验部分

4.1 实验原料

碘代苯甲烷、*N*-甲基咪唑购自 TCI; 碘化铅(PbI₂)和甲基碘化铵(MAI)购自优选新能源有限公司; TiO₂ 浆料(18NRT)购自澳大利亚的 GreatCell Solar 公司; 无水 GBL(γ -丁内酯)购自 Acros; ZrO₂ 和碳黑纳米粉末则购自北京德科岛津科技有限公司. 所有材料均买来后直接使用, 未经进一步纯化.

4.2 实验方法

4.2.1 离子液体的制备

(1)用移液枪分别吸取碘代苯甲烷(890 μ L, 7.00 mmol)和 *N*-甲基咪唑(1.27 mL, 15.77 mmol), 加入到一个 250 mL 不锈钢研磨罐中, 加入 62 个铅珠(直径 0.5 cm), 放入行星磨机, 以 500 r/min 的转速研磨 1 h. 具体的反应过程如图 7 所示.

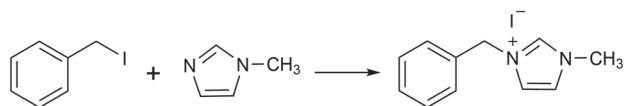


图 7 1-甲基-3-苄基咪唑碘的合成过程

Figure 7 Synthesis of 1-methyl-3-benzyl imidazolium iodide

(2)反应完毕后冷却到室温, 研磨罐底部生成红棕色液体, 用移液枪转移至样品瓶中, 并用旋涡振荡器充分振荡. 分别用乙酸乙酯、DCM(二氯甲烷)进行萃取、分液后得浅黄色透明液体.

(3)用水、DCM 清洗三次, 分液后, 最后再加入 DCM, 利用旋转蒸发器以 78 r/min 的转速、65 $^{\circ}$ C 条件下得到浅黄色凝胶状固体.

(4)对其进行核磁氢谱(¹H NMR)的表征, 确认其化学结构的正确性.

4.2.2 钙钛矿前驱体溶液的配制

在真空手套箱中, 向装有离子液体的样品瓶中加入 1.3 mL DMF(二甲基甲酰胺)溶液, 使其充分溶解, 得到溶液 A. 向一空样品瓶中依次加入 27 mg MAOI(甲基氯化铵), 159 mg MAI, 480 mg PbI₂, 并加入适量 DMF, 完成 MAPbI₃ 前驱体溶液的配制. 取 1 μ L 溶液 A 加到 200 μ L MAPbI₃ 前驱体溶液中, 混合均匀. 而钝化剂的引入, 则分别直接加入 20, 30 和 40 mg 1-甲基-3-苄基咪唑碘到所制备的钙钛矿前驱体溶液中, 搅拌均匀. 分别编号为 IL-20, IL-30 和 IL-40.

4.2.3 太阳能电池器件组装

使用锌粉和 2 mol·L⁻¹ 的盐酸选择性刻蚀掺氟氧化锡(FTO)导电玻璃. 然后分别用含清洁剂的自来水、去离子水、丙酮和无水乙醇各超声清洗 30 min. 利用喷雾热解技术制备致密 TiO₂ 层, 将 FTO 玻璃在 500 $^{\circ}$ C 下预热, 并将 10 mL 二异丙氧基双乙酰丙酮钛溶液喷涂在 FTO

导电基底上, 此时会立即引起溶剂的蒸发和金属盐的热分解, 以此形成致密的 TiO₂ 层, 接着在 500 $^{\circ}$ C 下烧结 30 min^[13]. 冷却至室温后, 利用丝网印刷机在致密层上再印刷介孔 TiO₂ 层、ZrO₂ 层和碳层, 并在 400 $^{\circ}$ C 下烧结 30 min. 冷却至 50 $^{\circ}$ C 后, 将 4.5 μ L 钙钛矿或不同离子液体含量的钙钛矿前驱体溶液滴在介孔碳层上, 然后在 60 $^{\circ}$ C 下退火 2.5 h^[12].

4.2.4 测试仪器

太阳能电池的光电流密度-电压(*J-V*)特性曲线是在 AM1.5 标准光强(100 mW·cm⁻²)下, 使用 Oriel 91106 太阳能模拟器(美国 Newport 公司生产), 以 20 mV·s⁻¹ 的扫描速率下通过 Keithley 2400 数据源表采集数据. 所组装的太阳能电池的有效面积约为 0.64 cm², 并在 *J-V* 测试下应用了长方形掩模板(面积为 0.0875 cm²). 单色入射光光电转换效率(IPCE)光谱由 Newport-74125 系统(Newport Instruments)获得. 电化学阻抗谱(EIS)则在 Zahner Ennium 电化学工作站上测量, 频率范围为 1 Hz~3.92 MHz.

4.2.5 光电转换效率的计算

衡量钙钛矿太阳能电池性能的四个主要评价参数有: 短路电流密度(*J*_{sc})、开路电压(*V*_{oc})、填充因子(FF)和光电转换效率(PCE).

*J*_{sc}: 太阳能电池在短路条件下的工作电流. 此时, 电池输出的电压为零.

*V*_{oc}: 太阳能电池在开路条件下的输出电压. 此时, 电池的输出电流为零.

FF: $FF = P_{\max} / (J_{sc} \cdot V_{oc})$, $P_{\max}$ 为最大输出功率.

PCE: $PCE = P_{\max} / P_{\text{light}}$, 也就是太阳能电池的最大输出功率与入射太阳光的能量(P_{light})之比.

其中, *J*_{sc}, *V*_{oc} 和 $P_{\max}$ 均来自 *J-V* 曲线的测试.

References

- [1] Kojima, A.; Teshima, K.; Shirai, Y.; Miyasaka, T. *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 6050.
- [2] Chen, H.; Ye, F.; Tang, W.; He, J.; Yin, M.; Wang, Y.; Xie, F.; Bi, E.; Yang, X.; Grätzel, M.; Han, L. *Nature* **2017**, *550*, 92.
- [3] Malinkiewicz, O.; Yella, A.; Lee, Y. H.; Espallargas, G. M.; Grätzel, M.; Nazeeruddin, M. K.; Bolink, H. J. *Nat. Photonics* **2014**, *8*, 128.
- [4] Xie, J.-S.; Huang, K.; Yu, X.-G.; Yang, Z.; Xiao, K.; Qiang, Y.-P.; Zhu, X.-D.; Xu, L.-B.; Wang, P.; Cui, C.; Yang, D.-R. *ACS Nano* **2017**, *11*, 9176.
- [5] Jeon, N. J.; Na, H.; Jung, E. H.; Yang, T.-Y.; Lee, Y. G.; Kim, G.; Shin, H.-W.; Seok, S. I.; Lee, J.; Seo, J. *Nat. Energy* **2018**, *3*, 682.
- [6] Sahli, F.; Werner, J.; Kamino, B. A.; Bräuninger, M.; Monnard, R.; Paviet-Salomon, B.; Barraud, L.; Ding, L.; Leon, J. J. D.; Sacchetto, D.; Cattaneo, G.; Despeisse, M.; Boccard, M.; Nicolay, S.; Jeangros, Q.; Niesen, B.; Ballif, C. *Nat. Mater.* **2018**, *17*, 820.
- [7] Rowlands, S. A.; Hall, A. K.; McCormick, P. G.; Street, R.; Hart, R. J.; Ebell, G. F.; Donecker, P. *Nature* **1994**, *367*, 223.
- [8] Fiss, B. G.; Richard, A. J.; Douglas, G.; Kojic, M.; Frišić, T.; Moores, A. *Chem. Soc. Rev.* **2021**, *50*, 8279.
- [9] Xu, L. *Ph.D. Dissertation*, East China University of Science and Technology, Shanghai, **2020** (in Chinese). (徐梁, 博士学位论文, 华东理工大学, 上海, **2020**.)
- [10] Chen, Y.; Ma, D.; Wang, Z.-Q.; He, J.-S.; Gong, X.-Q.; Wu, W.-J. *Adv. Mater. Interfaces* **2022**, 2200326.

- [11] Ming, Y.; Hu, Y.; Mei, A.-Y.; Rong, Y.-G.; Han, H.-W. *J. Inorg. Mater.* **2022**, *37*, 197 (in Chinese). (明月, 胡玥, 梅安意, 荣耀光, 韩宏伟, 无机材料学报, **2022**, *37*, 197.)
- [12] Luo, Y.; Zhu, C.-T.; Ma, S.-P.; Zhu, L.; Guo, X.-Y.; Yang, Y. *Chin. J. Phys.* **2022**, *71*, 390 (in Chinese). (罗媛, 朱从潭, 马书鹏, 朱刘, 郭学益, 杨英, 物理学报, **2022**, *71*, 390.)
- [13] Gao, P.-Y.; Fan, X.-Y.; Li, J.-K.; Guo, P.-C.; Huang, L.-Q.; Sun, J.; Zhu, H.; Wang, Y.-X. *Mater. Rev.* **2022**, *36*, 17 (in Chinese). (高培养, 范学运, 李家科, 郭平春, 黄丽群, 孙健, 朱华, 王艳香, 材料导报, **2022**, *36*, 17.)

(Cheng, B.)