文章编号：0465–7942(2026)04–0074–09

全氟辛基磺酸实现高效稳定的反型钙钛矿太阳能电池

刘夏荣[1,2]，杨桂春[2]，任小龙[2]，范家钊[2]，韩翌佳[2]，张凤梅[2]，赵文燕[1]，李红时[2]
(1. 景德镇陶瓷大学 材料科学与工程学院，江西 景德镇 333403；2. 南开大学 材料科学与工程学院，天津 300350)

摘要：自组装分子(Self–Assembled Molecules，SAMs)作为空穴传输层材料已被广泛应用于高效反型钙钛矿太阳能电池.然而,SAMs在基底上存在覆盖率低、分布不均等问题,导致埋底界面缺陷增多、稳定性下降,限制器件性能的进一步提升.基于此,本工作在SAMs前引入全氟辛基磺酸分子制备复合空穴选择性传输层,旨在提高SAMs在基底表面的覆盖率、促进钙钛矿薄膜生长并抑制埋底界面非辐射复合.优化后的器件实现了26.32%的冠军能量转换效率,在ISOS–L–1条件下经最大功率点追踪500 h后仍可保持80.6%的初始效率,展现出良好的稳定性.

关键词：反型钙钛矿太阳能电池；全氟辛基磺酸；界面修饰；自组装分子
中图分类号：TM914.4　　**文献标识码**：A　　DOI：10.27051/j.0465–7942.2026040074

0 引　　言

反型钙钛矿太阳能电池(Perovskite Solar Cells，PSCs)因具备低温加工和良好的兼容性等优势而受到广泛研究[1–5].目前,单结钙钛矿太阳能电池的认证能量转换效率已超过27%.其中,自组装单分子(Self–Assembled Molecules，SAMs)凭借其高空穴选择性传输与低能级损耗,已成为主流的空穴传输材料[6–8].然而,由于SAMs分子间存在π–π相互作用,其在氧化镍(Nickel Oxide，NiO_x)表面易发生自聚集和纵向堆叠,导致其基底覆盖率较低,分布均匀性较差等问题.这将进一步导致钙钛矿与基底金属氧化物直接接触,引发有害的氧化还原副反应,增加界面非辐射复合和降低埋底界面稳定性,从而降低器件的效率与稳定性[9–10].

为解决这一问题,研究人员已提出了多种调控策略：(1)基底预处理策略:通过提升金属氧化物基底表面的羟基数,增加SAMs锚定位点以改善其基底覆盖率和均匀性[11–12]；(2)SAMs共混策略:将SAM分子与其他分子共混沉积以弥补单一分子在基底上覆盖率较低的局限性[13–15]；(3)SAMs分子的设计:通过分子设计引入空间位阻或正交π–骨架实现非晶化SAMs,以有效抑制自身π–π相互作用和纵向堆叠,形成均匀、稳定的非晶态SAM层[16–17].然而,上述策略无法避免处理工艺复杂繁琐、界面分子排列不明确以及复杂的分子设计与制备等,不利于器件的可重复性制备.

本工作通过在氧化镍表面优先引入全氟辛基磺酸(Perfluorooctane Sulfonate，PFOS)分子,随后再沉积起主要空穴传输作用SAMs,得到了复合空穴选择性传输层.其中,PFOS中的磺酸锚定基团可优先与基底结合,利并用全氟长链间的静电排斥效应有效抑制分子间的自聚集行为,形成离散的界面分布,从而为后续SAMs的沉积提供充足的空间.实验结果表明,PFOS的修饰可有效抑制SAMs的自聚集和堆叠行为,从而提升其在基底表面的覆盖率和均匀性.此外,PFOS可有效调控钙钛矿薄膜的成核结晶过程,从而促进结晶度更好、更致密的高质量钙钛矿薄膜的形成.最后,使用PFOS修饰的器件实现了26.32%的最佳

收稿日期：2026–03–26
基金项目：国家自然科学基金(52102267)；TCL科技创新基金(023–G02j0677)
作者简介：刘夏荣(1998–),女,山西临汾人,硕士研究生.
杨桂春(2001–),女,江西赣州人,硕士研究生.
通讯作者：赵文燕(1981–),女,山东菏泽人,教授,研究方向:新能源材料与器件(钙钛矿太阳能电池),纳米半导体材料的结构设计与应用.E–mail：zhaowenyan223@126.com
李红时(1992–),男,黑龙江哈尔滨人,特聘副研究员,研究方向:钙钛矿太阳能电池,光电转换器件.E–mail：lhs_kls@nankai.edu.cn

能量转换效率.稳定性测试显示,器件在最大功率点(MPP)连续追踪500 h后仍保持初始效率的80.6%;在65 ℃环境下老化1 000 h,未封装器件的效率维持率达85%,展现出卓越的光热稳定性.

1　实验部分

1.1 实验材料

N,*N*–二甲基甲酰胺(DMF，99.8%)购自阿法埃莎(中国)化学有限公司.二甲基亚砜(DMSO，≥99.9%)和氯苯(CB，99.9%)购自Thermo公司.氧化镍(99.999%)购自Advanced Election Technology.全氟辛烷磺酸(PFOS)购自上海安谱璀世标准技术服务有限公司.乙醇(EA，99.9%)和碘化铯(CsI，99.99%)购自Sigma–Aldrich.氢溴酸甲胺(MAI，99.5%)和3–(甲硫基)–1–丙胺氢碘酸盐(3MTPAI，98%)购自西安浴日光能科技有限公司.1,3–二氨基丙烷二氢碘酸盐(PDADI，98%)购自西安聚合光刻能源科技有限公司.甲脒氢碘酸盐(FAI，99.5%)和甲基氯化铵(MACl，99.5%)购自GreatCellSolar.碘甲胺(MAI，99.5%)碘化铅(PbI_2，>98%)购自TCI.[4–(3,6–二甲基–9H–咔唑–9–基)丁基]膦酸(Me–4PACz，>99.9%)购自TCI.异丙醇(IPA，99%)购自Macklin公司.富勒烯C_{60}购自上海易恩化学技术有限公司;BCP购自北京百灵威科技有限公司.银(Ag,纯度99.999%)购自中诺新材科技有限公司.

1.2 钙钛矿太阳能电池制备

将ITO玻璃依次置于去离子水、丙酮、异丙醇和乙醇中,分别超声清洗40 min.清洗后的基底用氮气吹干,再经等离子体处理5 min.随后,将NiO_x水分散液(10 mg/mL)以4 000 r/min的转速旋涂于ITO基底上,旋涂时间为30 s,在110 ℃的热台上退火10 min.接着将完成涂覆的样品转移至手套箱中,在NiO_x层上以4 000 r/min旋涂PFOS层溶液(0.25 mg/mL,溶于异丙醇),旋涂时间为30 s,随后在100 ℃下退火10 min.以4 000 r/min旋涂Me–4PACz的乙醇溶液(0.5 mg/mL),旋涂30 s后,在100 ℃下退火10 min.将19.5 mg CsI、219.3 mg FAI、691.55 mg PbI_2和23.8 mg MAI溶解于混合溶剂溶液(体积比，DMF∶DMSO=4∶1)中,制备出化学式为$Cs_{0.05}FA_{0.85}MA_{0.1}PbI_3$的1.5 mol/L钙钛矿前驱体.此外,向前驱体中加入12.4 mol%的MACl和10 mol%过量PbI_2.采用两步旋涂法制备钙钛矿薄膜:首先以1 000 r/min旋涂10 s,然后加速至5 000 r/min继续旋涂30 s.在旋涂程序结束前10 s,将120 μL氯苯作为反溶剂快速滴加至基底中心,随后将样品置于100 ℃热台上退火30 min,以形成钙钛矿晶体薄膜.将2 mg/mL 3MTPAI和1 mg/mL PDADI溶解于异丙醇和DMF的混合溶液中(体积比150∶1)配制上界面修饰层,随后将溶液动态旋涂于薄膜上(4 000 r/min，30 s),并在100 ℃下退火10 min.接着将样品转移至真空蒸发系统中,依次沉积25 nm的C_{60}和6.5 nm的BCP的电子传输层.最后,沉积150 nm的Ag电极,完成器件制备.

1.3 薄膜与器件的表征

采用布鲁克AXSD8ADVANCE型X射线衍射仪(单色Cu Kα辐射)对样品进行X射线衍射(XRD)分析.扫描电子显微镜(SEM)图像通过场发射扫描电镜(JSM–7800F)进行观察.原子力显微镜(AFM)图像通过布鲁克DimensionIcon系统采集.接触角测量采用LSA100光学表面分析仪(LAUDAScientific).外量子效率(EQE)采用EnlitechEQE测量系统(QE–R3011)测定.紫外–可见(UV–vis)吸收光谱通过UV–LAMBDA365紫外可见分光光度计测定.光致发光(PL)、TRPL及PL映射(PL mapping)实验由FS5公司(爱丁堡)使用475 nm激发波长完成.电化学阻抗谱(EIS)和Mott–Schottky分析在暗处使用IM6Ex电化学工作站(Zahner)进行,频率范围为0.1 Hz至1 MHz.电流密度–电压曲线采用太阳模拟器(NewportOrielSol3A)与数字源计(Keithley2450)进行测量.光强设置为AM 1.5G,并使用校准标准单晶硅太阳电池(KG–5，91 150 V，418/0198)校准至100 mW/cm^2.器件表征在0.06 cm^{2}的光孔径面积下进行.

2　结果和讨论

2.1 PFOS对空穴选择性传输界面的影响

本工作选择PFOS分子作为界面修饰材料,主要基于其全氟结构及磺酸锚定基团(图1(a)).其中,由于

分子内强电负性C–F键的存在,PFOS分子间可产生明显的静电排斥效应,从而有效抑制其分子间的自聚集行为.这一结构特征使PFOS在NiO_x表面更倾向于形成离散分布而非连续致密覆盖,进而为后续Me–4PACz的锚定提供空间位阻.同时,PFOS中的磺酸基团可与NiO_x发生相互作用,以弥补单纯Me–4PACz在NiO_x表面覆盖不完全的问题.此外,PFOS与后续沉积的Me–4PACz可共同形成复合空穴选择性传输层,其界面分布示意图如图1(b)所示.

为探究PFOS界面修饰剂对SAMs空穴选择性传输层的影响,本工作在纯NiO_x(对照组)及PFOS修饰后的NiO_x表面(实验组)均沉积了Me–4PACz分子,并进行了XRD测试(图1(c)),结果显示对照组中Me–4PACz在NiO_x表面的存在明显的堆叠现象,其图谱中3.9°、8.6°和11.4°处的特征峰来源于Me–4PACz的π–π堆叠[16].相比之下,PFOS修饰后上述Me–4PACz特征衍射峰均消失,表明PFOS能有效抑制Me–4PACz分子间自聚集产生的堆叠现象.

为探究PFOS分子层修饰对空穴选择性传输界面表面形貌及电学性能的影响,本工作采用原子力显微镜(AFM)对薄膜表面粗糙度进行了表征.AFM结果显示,经PFOS修饰后,基底的均方根(RMS)粗糙度由对照组和4.02 nm降至3.90 nm(图1(d), (e)),表明PFOS修饰有助于形成更平整的表面,有利于后续减少泄漏电流通路并抑制界面复合.

2.2 PFOS对钙钛矿薄膜结晶质量的影响

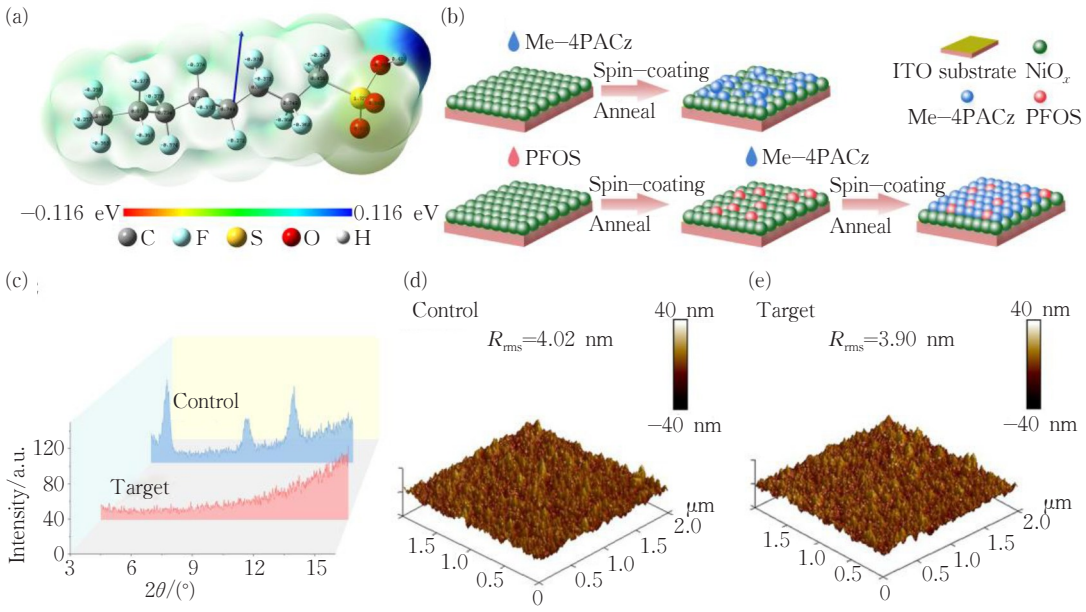


图1 (a) PFOS中各原子的电荷分布;(b) PFOS的分子作用示意图;(c) Me-4PACz在NiO_x及PFOS/NiO_x基底上的XRD图像;(d, e) Me-4PACz在NiO_x及PFOS/NiO_x基底上的AFM图像

Fig.1 (a) Atomic charge distribution of PFOS; (b) Schematic diagram of molecular interaction of PFOS; (c) XRD patterns of Me-4PACz on NiO_x and PFOS/NiO_x substrates; (d)-(e) AFM images of Me-4PACz on NiO_x and PFOS/NiO_x substrates

通过接触角测试测得钙钛矿前驱液在有无PFOS修饰基底上的接触角,结果表明,钙钛矿前驱液在ITO/NiO_x/Me–4PACz(对照组)及ITO/NiO_x/PFOS/Me–4PACz(实验组)基底上的接触角分别为26°和29.3°(图2(a), (b)).按照经典的异质成核理论,接触角增大会提高异质成核能垒并降低初始形核密度并促进钙钛矿薄膜的结晶过程,从而获得结晶质量较高的钙钛矿薄膜.

为了进一步探究PFOS界面修饰剂对钙钛矿薄膜结晶质量的影响,本工作采用扫描电子显微镜(SEM)对不同衬底上钙钛矿薄膜的形貌进行了表征.首先通过紫外胶将钙钛矿薄膜与衬底剥离后,直接观察其埋底界面形貌,结果如图2(c)和2(d)所示.其中,对照组薄膜在晶界处存在较多裂缝和孔洞,薄膜整体致密性较差;而经PFOS分子层修饰的实验组薄膜则展现出更为平整均匀的埋底界面,晶界清晰且无明显

孔洞，显示出更好的致密性．进一步对晶粒尺寸进行统计(图2(e))，结果显示，实验组薄膜的平均晶粒尺寸明显大于对照组的晶粒尺寸．晶粒尺寸的增加有助于降低晶界密度，进而减少与晶界相关的缺陷态密度，促进形成更均匀致密的钙钛矿薄膜．采用X射线衍射(XRD)进一步表征薄膜的结晶质量，如图2(f)所示，实验组钙钛矿主相的衍射峰强度明显高于对照组，该结果表明，在PFOS分子界面层的调控下，钙钛矿相的转化更加充分，从而使得钙钛矿薄膜的整体结晶度得到提高．这一趋势在钙钛矿薄膜表面SEM图像中也得到了验证(图2(g)–(j))．上述形貌与结晶质量的优化，有助于抑制界面处载流子的非辐射复合，减少电荷损失，进而为提升器件性能奠定基础．

截面SEM图像(图2(k)，(l))显示，实验组薄膜的晶粒沿膜厚方向呈现较为连续且近似垂直的排列特征，这种晶体取向有助于缩短载流子传输路径，促进其在垂直方向上的有效传输．而对于对照组，晶粒在纵向不贯穿，载流子在晶界处堆积并发生非辐射复合，降低载流子扩散长度．

结合SEM与XRD的结果可知，PFOS的引入能够调控钙钛矿薄膜的成核结晶过程，促进晶粒的择优生长，从而获得晶粒尺寸更大、缺陷密度更低且晶体取向更为有利的钙钛矿薄膜．

2.3 PFOS对载流子传输动力学的影响

为进一步表征PFOS分子层界面对钙钛矿薄膜光生载流子动力学的影响，本文对钙钛矿薄膜的埋底

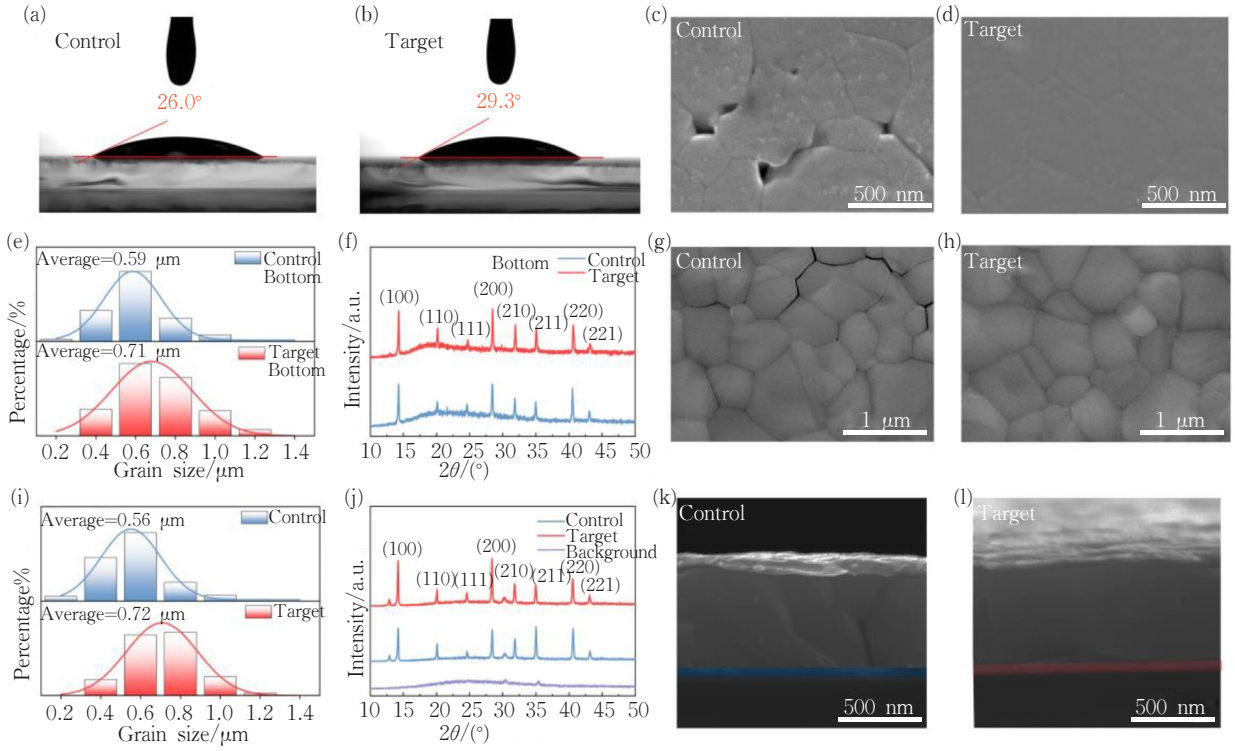


图2 (a)-(b) 钙钛矿前驱液在ITO/NiO_x/Me-4PACz和ITO/NiO_x/PFOS/Me-4PACz基底的接触角；(c)-(d) 对照组和实验组钙钛矿薄膜埋底界面的SEM图像；(e) 对照组和实验组钙钛矿薄膜埋底界面晶粒尺寸统计图；(f) 对照组和实验组钙钛矿薄膜埋底界面的XRD图像；(g)-(h) 对照组和实验组钙钛矿薄膜的表面SEM图像；(i) 对照组和实验组钙钛矿薄膜表面的晶粒尺寸统计图；(j) 对照组和实验组钙钛矿薄膜表面的XRD图像；(k)-(l) 对照组和实验组器件截面的SEM图像

Fig.2 (a)-(b) Contact angle of perovskite on ITO/NiO_x/Me-4PACz and ITO/NiO_x/PFOS/Me-4PACz substrates; (c)-(d) SEM images of the buried interface of perovskite films in the control and target groups; (e) Statistical graph of grain size at the buried interface of perovskite films in the control and target groups; (f) XRD patterns of the buried interface of perovskite films in the control and target groups; (g)-(h) Surface SEM images of perovskite films in the control and target groups; (i) Statistical graph of grain size on the surface of perovskite films in the control and target groups; (j) XRD patterns of the surface of perovskite films in the control and target groups; (k)-(l) Cross-sectional SEM images of devices in the control and target groups

界面及表面均进行了稳态光致发光(PL)测试,结果如图3(a)、(b)所示.可以看出,无论是埋底界面还是钙钛矿表面,实验组薄膜的PL强度均显著高于对照组.

为了研究PFOS分子层修饰与钙钛矿界面的电荷转移,进行了时间分辨光致发光(TRPL)测量(图3(c),(d)).时间分辨光致发光(TRPL)光谱采用以下方程进行拟合:

$$I(t) = I_0 + A_1 e^{\frac{-t}{\tau_1}} + A_2 e^{\frac{-t}{\tau_2}}, \tag{1}$$

其中A_1和A_2分别代表快速衰减过程和慢速衰减过程的衰减幅度,τ_1和τ_2则对应快速衰减与慢速衰减的时常数.平均载流子寿命(τ_{ave})通过以下公式计算:

$$\tau_{ave} = \frac{A_1\tau_1^2 + A_2\tau_2^2}{A_1\tau_1 + A_2\tau_2}. \tag{2}$$

通过双指数函数拟合TRPL测试结果得到对照组和实验组埋底界面的平均载流子寿命由0.227 μs延长至0.373 μs(表1),表面的平均载流子寿命由0.280 μs延长至0.518 μs(表2).载流子寿命的显著延长表明

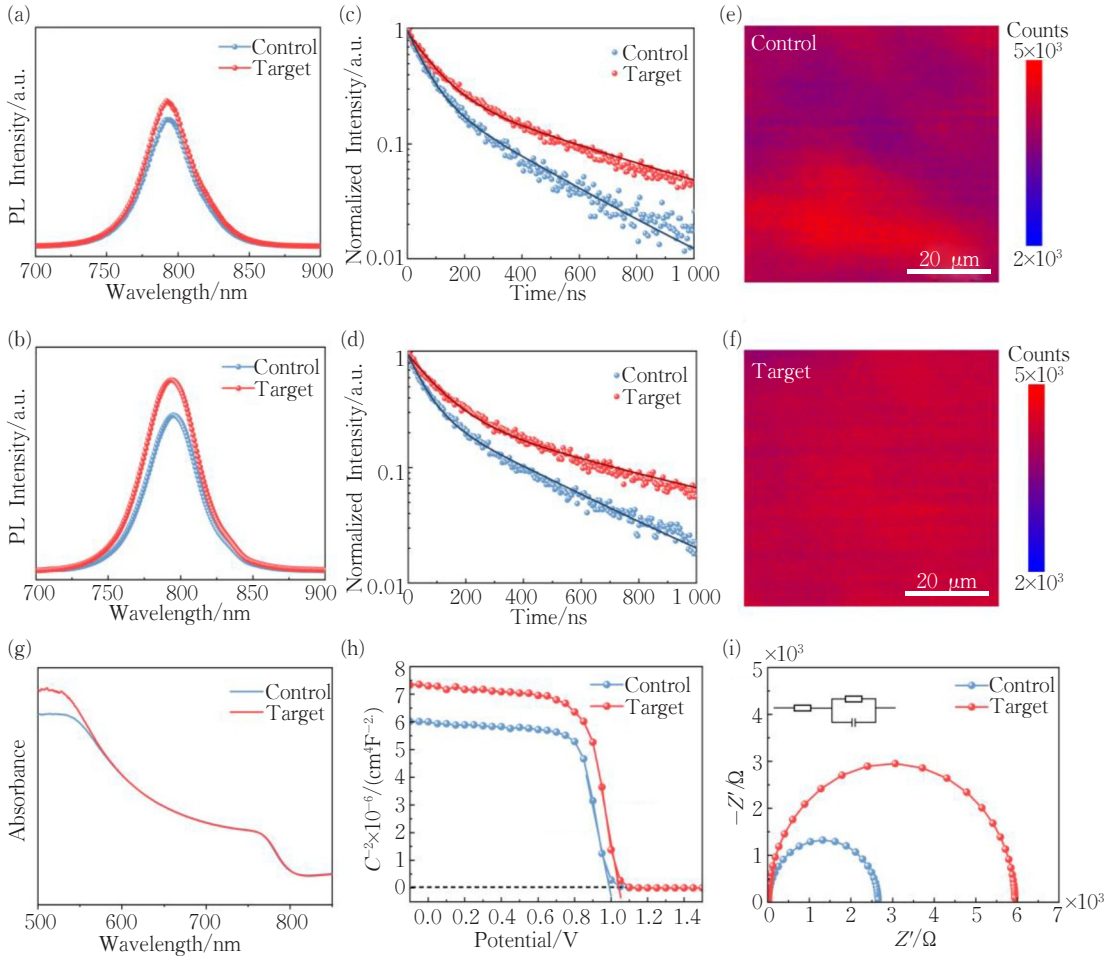


图3 (a)-(b)对照组和实验组薄膜埋底界面及表面的PL图像;(c)-(d)对照组和实验组薄膜埋底界面及表面的TRPL图像;(e)-(f)对照组和实验组钙钛矿薄膜埋底界面的PL mapping图像;(g)对照组和实验组钙钛矿薄膜埋底界面的紫外吸收图像;(h) 对照组和实验组的Mott-Schottky图像;(i) 对照组和实验组的EIS图像

Fig.3 (a)-(b) PL images of the buried interface and surface of perovskite films for the control and target groups. (c)-(d) TRPL images of the buried interface and surface of perovskite films for the control and target groups. (e)-(f) PL mapping images of the buried interface of perovskite films for the control and target groups. (g) UV-vis absorption spectra of the buried interface of perovskite films for the control and target groups. (h) Mott-Schottky plots of the control and target groups. (i) EIS plots of the control and target groups

表1 钙钛矿薄膜埋底界面的双指数函数拟合TRPL平均载流子寿命

Table 1 Biexponential fitting of TRPL average carrier lifetime at the buried interface of perovskite films

Samples	A_1	τ_1/ns	A_2	τ_2/ns	τ_{ave}/ns
Control	0.69	59.18	0.28	306.99	226.75
Target	1.19	88.53	0.33	552.89	373.43

表2 钙钛矿薄膜表面的双指数函数拟合TRPL平均载流子寿命

Table 2 Average carrier lifetime of TRPL fitted by biexponential function on the surface of perovskite films

Samples	A_1	τ_1/ns	A_2	τ_2/ns	τ_{ave}/ns
Control	0.63	58.37	0.31	354.32	280.02
Target	0.67	105.81	0.28	675.24	518.22

实验组薄膜中的非辐射复合得到了有效抑制，这为后续器件V_{oc}及FF的提升奠定了基础.

为进一步表征PFOS对钙钛矿薄膜结晶均匀性的影响，本工作采用对剥离后的钙钛矿薄膜埋底界面进行了PL mapping测试(图3(e)，(f))，结果表明实验组薄膜的整体分布强度显著高于对照组，且其PL强度分布更均匀，表明PFOS有利于改善埋底界面接触并促进更结晶质量较好、更均匀钙钛矿薄膜的形成.此外，紫外可见吸收(Uv–vis)光谱显示(图3(g))，实验组薄膜在可见光区域内的吸收强度得到提升但吸收边位置基本不变，PFOS修饰剂并未改变钙钛矿的带隙，薄膜结晶质量的提升是吸收增强的主要原因，而非能带结构的改变.

为定量地确定缺陷密度并阐明钙钛矿太阳能电池中的载流子动力学，使用Mott–Schottky方程进行了电容演化测量，如图3(h)所示.内建电势(V_{bi})的计算公式如下：

$$\frac{1}{C^2}=\frac{2}{e\varepsilon\varepsilon_0 N_D}\left(V_{bi}-V-\frac{kT}{e}\right), \tag{3}$$

其中C是空间电荷区的电容，V_{bi}是内建电势，V是外加电压，N_D，e，ε，ε_0，k和T分别表示施主密度、基元电荷、相对介电常数、真空介电常数、玻尔兹曼常数和绝对温度.经PFOS处理后，V_{bi}从对照组的0.98 V提升至1.04 V，V_{bi}的提升归因于PFOS对Me–4PACz中空位缺陷的有效填充，从而促进界面电荷的提取与传输，并有效抑制器件内部的非辐射复合.这一结果与前述钙钛矿薄膜结晶质量及形貌优化的趋势高度一致，共同揭示了PFOS提升器件性能的内在机制.

采用电化学阻抗谱(EIS)在暗态条件下研究PFOS分子层修饰对钙钛矿太阳能电池电荷转移动力学的影响.图3(i)展示了基于等效电路模型拟合得到的器件奈奎斯特图.拟合结果显示，经PFOS分子层修饰的器件的电荷复合电阻(R_{rec})较对照组显著增大.这一变化表明PFOS分子层有效钝化了埋底界面缺陷，抑制了器件内部的非辐射复合损耗.R_{rec}的增大与器件V_{oc}及FF的提升规律高度吻合，从电荷动力学角度揭示了PFOS修饰剂提升器件性能的内在机制.

2.4 PFOS对钙钛矿太阳能电池性能的影响

为评估PFOS分子层对钙钛矿太阳能电池性能的影响，本工作制备了结构为ITO/NiO_x/PFOS/Me–4PACz/perovskite/3MPTAI+PDADI/C_{60}/BCP/Ag的钙钛矿太阳能电池(图4(a)).从器件的J–V特性曲线可以看出，实验组器件的效率最佳PCE为26.32%，显著高于对照组的25.02%，同时其V_{oc}和FF得到了明显提升.这主要归因于PFOS对钙钛矿薄膜结晶质量的改善及界面非辐射的有效抑制.此外，对照组与实验组器件正反扫效率均表现出较小的迟滞，表明界面与传输层之间具有良好的能级匹配和电荷传输特性(图4(b)，表3).

稳态输出方面，实验组器件在1.04 V偏压下维持300 s后稳态输出效率为25.97%，而对照组在1.01 V偏压下的稳态输出效率为24.98%(图4(c)).结合外量子效率(EQE)光谱(图4(d))，积分得实验组器件的归一化短路电流密度为25.49 mA/cm^{2}高于对照组的25.38 mA/cm^2，表明光子吸收到电荷收集的转化效率在实验组得到有效提升.另外，根据PFOS浓度优化实验结果可知(图4(e)–(h))，实验组器件的最优条件为0.25 mg/mL.

表3 对照组及实验组器件的正反扫性能参数

Table 3 Forward and reverse scan performance parameters of the control and target devices

	J_{sc}/(mA·cm^{-2})	V_{oc}/V	FF/%	PCE/%
Control–R	26.01	1.148	83.73	25.02
Control–F	26.25	1.149	81.99	24.75
Target–R	26.15	1.173	85.81	26.32
Target–F	26.21	1.174	84.60	26.03

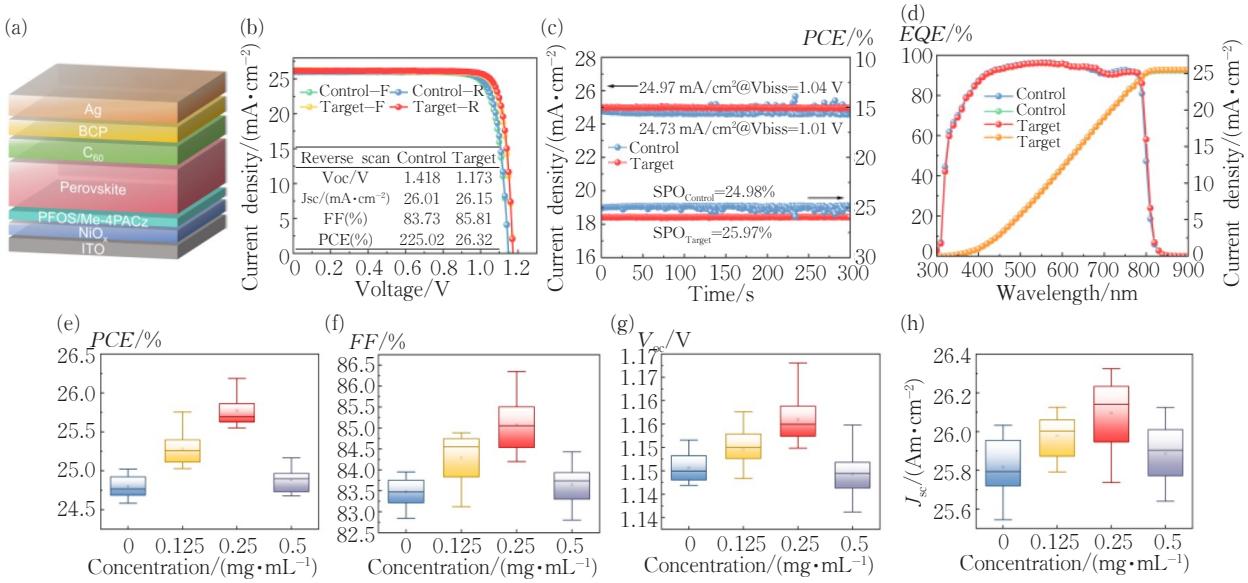


图4 (a)钙钛矿器件示意图;(b)对照组和实验组效率最高器件正扫和反扫*J-V*曲线;(c)对照组和实验组器件的稳态功率输出;(d) 对照组和实验组*EQE*对比图;(e)-(h)不同浓度器件的*PCE*、*FF*、V_{oc}、J_{sc}图

Fig.4 (a) Schematic diagram of the perovskite device; (b) Forward and reverse *J-V* curves of the champion devices for the control and target groups; (c) Steady-state power output of the control and target groups; (d) *EQE* comparison of the control and target groups; (e)-(h) Plots of *PCE*, *FF*, V_{oc}, and J_{sc} for devices with different concentrations of PFOS.

最后,本文对器件的长期运行稳定性进行了系统评估.根据ISOS–L–1国际标准协议,对器件在连续光照下进行了最大功率点(MPP)跟踪测试.结果显示(图5(a)),实验组器件在500 h连续光照后仍保持初始PCE的80.6%,而对照组器件在运行约200 h后已衰减至初始值的48.5%.为进一步考察器件的热稳定性,本工作还将器件置于65 ℃条件下进行连续热退火,结果表明(图5(b)),实验组器件在长达1 000 h的热老化后仍保留了初始效率的85%,表现出卓越的热稳定性,而对照组器件约780 h已降低至初始效率的75%.

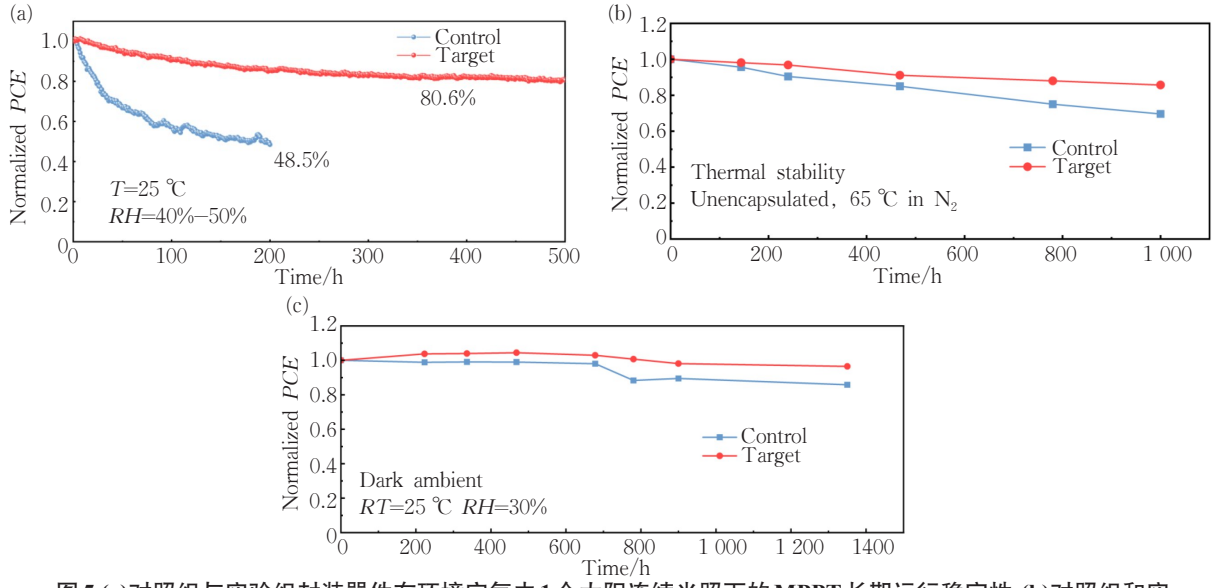


图5 (a)对照组与实验组封装器件在环境空气中1个太阳连续光照下的MPPT长期运行稳定性;(b)对照组和实验组器件在N_2中65 ℃持续加热的稳定性;(c)对照组及实验组器件在黑暗环境中的储存稳定性

Fig.5 (a) Long-term operational stability of encapsulated devices from the control and target groups under continuous 1-sun illumination in ambient air, measured by MPPT. (b) Stability of devices from the control and target groups under continuous heating at 65 ℃ in N_2 atmosphere. (c) Storage stability of devices from the control and target groups in dark ambient conditions

此外，实验组器件在暗态存储中同样表现出优异的稳定性(图5(c))．综合上述结果可知，PFOS界面修饰材料不仅能提升器件光电性能，同时还能显著增器件对光照、热应等苛刻条件的耐受能力．

3 结　论

本文在钙钛矿薄膜埋底界面引入PFOS修饰剂，与Me-4PACz共同组成复合选择性空穴传输层．PFOS修饰分子可通过抑制Me-4PACz的自聚集，并提升Me-4PACz的基底覆盖度和均匀性，优化界面接触，提升钙钛矿薄膜结晶质量和降低界面非辐射复合损耗．本工作为高效、稳定的反型钙钛矿太阳能电池提供了一条钙钛矿薄膜的埋底界面上实现良好接触的途径．

参 考 文 献

[1] Yu X Y, Sun X L, Zhu Z L, et al. Stabilization strategies of buried interface for efficient SAM-based inverted perovskite solar cells[J]. Angewandte Chemin-international Edition, 2025, 137(4): e202419608.

[2] Al-Ashouri A, Magomedov A, Ross M, et al. Conformal monolayer contacts with lossless interfaces for perovskite single junction and monolithic tandem solar cells[J]. Energy & Environmental Science, 2019, 12(11): 3 356-3 369.

[3] Tang H C, Shen Z C, Shen Y Z, et al. Reinforcing self-assembly of hole transport molecules for stable inverted perovskite solar cells[J]. Science, 2024, 383(6 688): 1 236-1 240.

[4] Liu T H, Luo C Y, He R Q, et al. Advancing self-assembled molecules toward interface-optimized perovskite solar cells: from one to two[J]. Advanced Materials, 2025, 37(48): 2502032 .

[5] Gao M, Ou Z, Wang C, et al. Multifunctional buried molecule-bridge for high-performance inverted perovskite solar cells[J]. Advanced materials, 2026, 38(2): e14273.

[6] Jiang W, Qu G, Huang X, et al. Toughened self-assembled monolayers for durable perovskite solar cells[J]. Nature, 2025, 646(8 083): 95-101.

[7] Xu R D, Wang C J, Zhang Z Y, et al. Buried interface engineering: a key to unlocking the potential of self-assembled monolayer (SAM)-based inverted perovskite solar cells[J]. Small, 2025, 21(32): 2503114.

[8] Peng C, Sun X, Zhang B, et al. Strengthened perovskite/SAM heterointerface for stable perovskite solar cells[J]. Journal of the American Chemical Society, 2025, 147(52): 48391-48399.

[9] Boyd C C, Shallcross R C, Moot T, et al. Overcoming redox reactions at perovskite-nickel oxide interfaces to boost voltages in perovskite solar cells[J]. Joule, 2020, 4(8): 1 759-1 775.

[10] Zhang J, Long J, Huang Z, et al. Obstructing interfacial reaction between NiO_x and perovskite to enable efficient and stable inverted perovskite solar cells[J]. Chemical Engineering Journal, 2021, 426: 131357.

[11] Yu S, Xiong Z, Zhou H, et al. Homogenized NiO_x nanoparticles for improved hole transport in inverted perovskite solar cells[J]. Science, 2023, 382(6 677): 1 399-1 404.

[12] Luo C, Zhou Q, Wang K, et al. Engineering bonding sites enables uniform and robust self-assembled monolayer for stable perovskite solar cells[J]. Nature Materials, 2025, 24(8): 1 265-1 272.

[13] Bu C, Sun A, Mo L, et al. Buried interface passivation with sulfonic acid-based co-assembled monolayer enables high-performance inverted perovskite solar cells[J]. ACS Appl Mater Interfaces, 2026, 18(1): 3 284-3 292.

[14] Shi C, Wang J, Lei X, et al. Modulating competitive adsorption of hybrid self-assembled molecules for efficient wide-bandgap perovskite solar cells and tandems[J]. Nature Communications, 2025, 16(1): 3 029.

[15] Cao S G, Luo S Z, Zheng T J, et al. Hybrid self-assembled molecular interlayers for efficient and stable inverted perovskite solar cells[J]. Advanced Energy Materials, 2025, 15(23): 2405367.

[16] Wang X, Li J, Guo R, et al. Regulating phase homogeneity by self-assembled molecules for enhanced efficiency and stability of inverted perovskite solar cells [J]. Nature Photonics, 2024, 18(12): 1 269-1 275.

[17] Zhou J, Luo Y, Li R, et al. Molecular contacts with an orthogonal π-skeleton induce amorphization to enhance perovskite solar cell performance[J]. Nature Chemistry, 2025, 17(4): 564-570.

[18] Peng Y, Chen Y, Zhou J, et al. Enlarging moment and regulating orientation of buried interfacial dipole for efficient

inverted perovskite solar cells[J]. Nature Communications, 2025, 16(1): 1 252.

Perfluorooctanesulfonic Acid Enables Efficient and Stable Inverted Perovskite Solar Cells

Liu Xiarong[1,2], Yang Guichun[2], Ren Xiaolong[2], Fan Jiazhao[2], Han Yijia[2], Zhang Fengmei[2], Zhao Wenyan[1], Li Hongshi[2]

(1. *School of Materials Science and Engineering, Jingdezhen Ceramic University, Jingdezhen* 333403, *China*; 2. *School of Materials Science and Engineering, Nankai University, Tianjin* 300350, *China*)

Abstract: Self-assembled molecules (SAMs) have been widely employed as hole transport layer materials in high-efficiency inverted perovskite solar cells. However, SAMs have problems including low coverage and uneven distribution on the substrate, which leads to an increase in buried interface defects and reduced stability, limiting further improvements in device performance. To address these problems, a composite hole-selective transport layers was fabricated by introducing perfluorooctane sulfonate molecules prior to the SAMs. This strategy aims to increase the coverage of SAMs on the substrate surface, promote the growth of perovskite films, and suppress non-radiative recombination at the buried interface. The optimized device achieved a champion power conversion efficiency of 26.32% and retained 80.6% of its initial efficiency after 500 hours of maximum power point tracking under ISOS-L-1 conditions, demonstrating excellent stability.

Keywords: inverted perovskite solar cells; perfluorooctane sulfonate; interface modification; self-assembled molecules

[责任编辑: 彭艺]