

环状氧化钛纳米簇组合物及含有该组合物的装置

能源和环境

节能/发电/管理/储存 (电池)

纳米技术与新材料

机会

钙钛矿太阳能电池 (PVSCs) 因其高功率转换效率 (PCE) 和低成本制造潜力，一直是可再生能源研究的重点。然而，阻碍其商业化的一个主要挑战是钙钛矿材料在环境条件下的不稳定性，例如暴露于湿气、氧气和热量下会导致降解和性能随时间的推移而下降。此外，钙钛矿层界面和体材料内部存在的缺陷会导致电荷复合，限制效率提升。传统的功能层，包括金属氧化物纳米颗粒、金属有机纳米片、石墨烯或氧化石墨烯，已被用于解决这些问题，通过钝化缺陷、增强电荷提取以及提供针对环境因素的屏障特性。然而，这些纳米材料通常存在一些缺点，如合成过程复杂、储存要求严格、制备条件有限、缺乏详细的结构信息、成分分布不均匀以及重现性差。因此，迫切需要具有明确结构、高产率、良好重现性和高度可定制性的新型纳米材料，以便将多种官能团整合到单一材料中，从而提高 PVSCs 的效率和稳定性，同时简化制造过程。

技术

本专利介绍了一系列环状氧化钛簇 (CTOC) 组合物，其通式为 $Ti_{32}O_{16}(OCH_2CH_2O)_{32}(R_1COO)_x(ArCOO)_{16-x}(R_2O)_{16}$ ，其中 x 为 0 至 15 的整数， R_1 、 Ar 和 R_2 是可定制的有机官能团。创新之处在于这些 CTOCs 具有精确的分子结构，其特点是具有一个坚固的 $Ti_{32}O_{16}(OCH_2CH_2O)_{32}$ 核心和可定制的表面配体。这种设计允许通过合成后配体交换或衍生化反应进行广泛的修饰，从而能够引入各种官能团，例如氟化芳基基团 (如 CTOC-Ph-5F 中的五氟苯基) 或三氟甲基苯基基团。当作为功能层应用于 PVSCs 时，这些 CTOCs 能在钙钛矿表面形成光滑、均匀的薄膜。它们能有效钝化钙钛矿界面的缺陷，减少非辐射电荷复合，并增强电荷提取和传输。此外，特定 CTOC 变体中的氟化基团与钙钛矿材料 (例如通过 Pb^{2+} 结合) 和电子传输层 (例如 C_{60}) 均能发生强相互作用，从而改善界面通信和稳定性。合成过程高效且可扩展，从已知的 CTOCs 出发，采用基于溶液的方法，实现了高产率和重现性。该技术通过提供结构明确、高度可定制且稳定的功能层，解决了现有纳米材料的局限性，从而提升了 PVSC 的性能和耐久性。

优势

- 通过模块化配体设计实现高度可定制性，允许针对特定应用调整性能。
- 由于坚固的核心结构和保护性表面基团，具有优异的稳定性，延长了器件寿命。
- 有效钝化钙钛矿界面缺陷，减少电荷复合，提高效率。
- 与钙钛矿和电荷传输层均能发生强界面相互作用，促进更好的电荷提取。
- 可溶液加工，便于通过旋涂轻松集成到现有的 PVSC 制造工艺中。
- 合成重现性高、产率高，克服了传统纳米材料的问题。

备注

IDF:1605

IP 状态

已申请专利



技术成熟度等级 (TRL) ?

4

发明人

任广禹教授

赵朝委

李凤珠

查询: kto@cityu.edu.hk

Develop
Concept

Proof
Concept

Follow-on

Build Value

- 通过官能团具有潜在的铅（Pb）捕获能力，解决了对Pb泄漏的环境担忧。
- 兼容p-i-n和n-i-p两种PVSC结构，提供器件设计的灵活性。

应用

- 作为钙钛矿太阳能电池中的功能层，以提高功率转换效率和稳定性。
- 用于其他光电器件，如光电探测器或发光二极管，以改进界面工程。
- 作为电子器件中的环境屏障涂层，防止湿气和氧气渗透。
- 在催化领域，利用可调的表面化学性质进行催化反应。
- 作为研究氧化钛纳米尺度性质和相互作用的分子模型。
- 用于传感器，利用官能团进行分析物的选择性结合和检测。
- 适用于柔性电子器件，因为其可溶液加工且可能兼容柔性基底。

