



(12) BẢN MÔ TẢ SÁNG CHẾ THUỘC BẰNG ĐỘC QUYỀN SÁNG CHẾ

(19) Cộng hòa xã hội chủ nghĩa Việt Nam (VN)
CỤC SỞ HỮU TRÍ TUỆ

(11)



1-0032860

(51)^{2016.01} H01L 51/42; H01L 51/44

(13) B

(21) 1-2017-02308

(22) 19/11/2015

(86) PCT/US2015/061467 19/11/2015

(87) WO 2016/081682 26/05/2016

(30) 62/083,063 21/11/2014 US; 14/711,391 13/05/2015 US

(45) 25/08/2022 413

(43) 25/09/2017 354A

(73) Hunt Perovskite Technologies, L.L.C. (US)

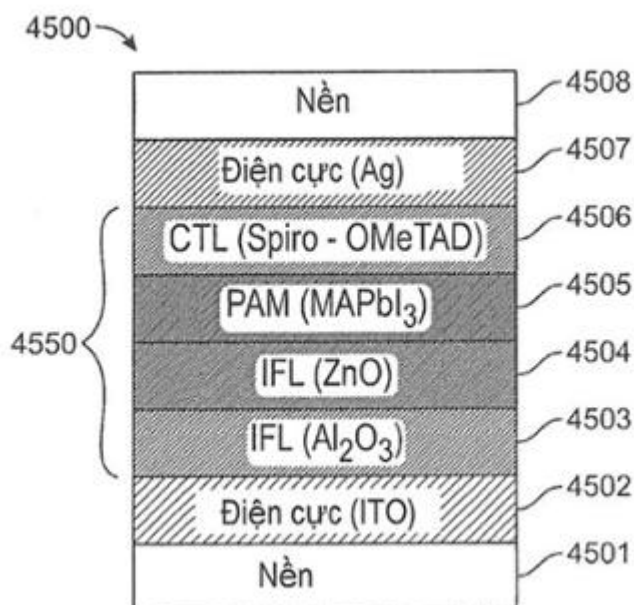
1807 Ross Ave., Suite 333, Dallas, Texas 75201, United States of America

(72) IRWIN, Michael, D. (US); CHUTE, Jerred, A. (US); DHAS, Vivek, V. (US).

(74) Công ty TNHH Tầm nhìn và Liên danh (VISION & ASSOCIATES CO.LTD.)

(54) THIẾT BỊ QUANG ĐIỆN

(57) Sáng chế đề cập đến các thiết bị quang điện như các pin mặt trời, pin mặt trời - ắc quy lai, và các thiết bị khác. Thiết bị quang điện này có thể bao gồm lớp hoạt hóa (4550) được bố trí giữa hai điện cực (4502, 4507). Lớp hoạt hóa có thể có vật liệu perovskit và vật liệu khác như vật liệu mao quản trung bình, các lớp phân cách (4503, 4504), các lớp phân cách phủ mỏng, và các hỗn hợp của chúng. Vật liệu perovskit có thể là vật liệu quang hoạt (4505). Vật liệu perovskit có thể được bố trí giữa hai vật liệu hoặc nhiều hơn trong thiết bị quang điện (4500). Sự bao gồm các vật liệu này trong các cách bố trí khác nhau bên trong lớp hoạt hóa của thiết bị quang điện có thể cải thiện tính năng của thiết bị. Các vật liệu khác có thể được bao gồm để cải thiện tiếp tính năng của thiết bị, ví dụ, như các perovskit bổ sung, và các lớp phân cách bổ sung.



Lĩnh vực kỹ thuật được đề cập

Sáng chế đề cập đến thiết bị quang điện để tạo ra điện năng.

Tình trạng kỹ thuật của sáng chế

Việc sử dụng các quang điện (PV, photovoltaic) để tạo ra điện năng từ năng lượng mặt trời hoặc bức xạ có thể mang lại nhiều lợi ích, bao gồm, ví dụ, nguồn điện, sự phát xạ thấp hoặc bằng không, sự tạo ra điện độc lập với lưới điện, các kết cấu vật lý bền vững (không có các chi tiết tháo rời), các hệ thống ổn định và tin cậy, kết cấu dạng môđun, lắp đặt tương đối nhanh, sản xuất và sử dụng an toàn và dư luận xã hội tốt và được chấp nhận sử dụng.

Bản chất kỹ thuật của sáng chế

Theo một phương án, sáng chế đề xuất thiết bị quang điện để tạo ra điện năng bao gồm điện cực thứ nhất, điện cực thứ hai, lớp hoạt hóa được bố trí ở ít nhất một phần giữa các điện cực thứ nhất và thứ hai, lớp hoạt hóa này bao gồm vật liệu quang hoạt gồm vật liệu perovskit, lớp phân cách thứ nhất được bố trí liền kề và tiếp xúc với lớp phân cách thứ hai, và lớp phân cách thứ ba được bố trí liền kề với và tiếp xúc với lớp phân cách thứ hai, trong đó lớp phân cách thứ nhất và lớp phân cách thứ ba bao gồm vật liệu khác với lớp phân cách thứ hai.

Theo một phương án khác, sáng chế đề xuất thiết bị quang điện để tạo ra điện năng bao gồm điện cực thứ nhất, điện cực thứ hai và lớp hoạt hóa được bố trí ở ít nhất một phần giữa các điện cực thứ nhất và thứ hai, lớp hoạt hóa này bao gồm vật liệu perovskit, và ba hoặc nhiều hơn ba lớp phân cách liền kề, trong đó mỗi lớp phân cách tiếp xúc với ít nhất một lớp phân cách liền kề và bao gồm vật liệu khác với các lớp phân cách liền kề mà nó tiếp xúc, trong đó vật liệu perovskit có công thức CMX_3 , trong đó C bao gồm một hoặc nhiều cation, mỗi cation được chọn từ nhóm bao gồm các kim loại nhóm 1, các kim loại nhóm 2, các cation hữu cơ và hỗn hợp của chúng, trong đó M bao gồm một hoặc nhiều kim loại, mỗi kim loại được chọn từ nhóm bao gồm Fe, Co, Ni, Cu, Sn, Pb, Bi, Ge, Ti, Zn và các hỗn hợp của chúng, và X bao gồm một hoặc nhiều anion, mỗi anion được chọn từ nhóm bao

gồm các halogenua, các giả halogenua, sulfua, selenua và các hỗn hợp của chúng.

Các dấu hiệu và các hiệu quả của sáng chế sẽ rõ ràng đối với người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực. Mặc dù nhiều thay đổi có thể được tạo ra bởi người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực, nhưng các thay đổi này cần nằm trong phạm vi của sáng chế.

Mô tả vắn tắt các hình vẽ

Fig.1 là hình vẽ minh họa thiết kế DSSC (Dye-Sensitized Solar Cell, pin mặt trời nhạy chất màu) thể hiện các lớp khác nhau của DSSC theo một số phương án của sáng chế.

Fig.2 là hình vẽ khác minh họa thiết kế DSSC thể hiện các lớp khác nhau của DSSC theo một số phương án của sáng chế.

Fig.3 là hình vẽ minh họa thiết kế của thiết bị BHJ làm ví dụ theo một số phương án của sáng chế.

Fig.4 là hình vẽ dưới dạng sơ đồ minh họa pin quang điện điển hình bao gồm lớp hoạt hóa theo một số phương án của sáng chế.

Fig.5 là hình vẽ dưới dạng sơ đồ thể hiện thiết bị DSSC ở trạng thái rắn điển hình theo một số phương án của sáng chế.

Fig.6 là hình vẽ dạng sơ đồ cách điệu minh họa các thành phần của thiết bị PV làm ví dụ theo một số phương án của sáng chế.

Fig.7 là hình vẽ dạng sơ đồ cách điệu thể hiện các thành phần của thiết bị PV làm ví dụ theo một số phương án của sáng chế.

Fig.8 là hình vẽ dạng sơ đồ cách điệu thể hiện các thành phần của thiết bị PV làm ví dụ theo một số phương án của sáng chế.

Fig.9 là hình vẽ dạng sơ đồ cách điệu thể hiện các thành phần của thiết bị PV làm ví dụ theo một số phương án của sáng chế.

Fig.10 là hình vẽ dạng sơ đồ cách điệu thể hiện thiết bị bằng vật liệu perovskit theo một số phương án của sáng chế.

Fig.11 là hình vẽ dạng sơ đồ cách điệu thể hiện thiết bị bằng vật liệu

perovskit theo một số phương án của sáng chế.

Fig.12 là các ảnh chụp từ kính hiển vi điện tử quét cắt ngang so sánh perovskit PV được chế tạo có nước (trên) và không có nước (dưới).

Các hình vẽ từ Fig.13 đến Fig.20 là các hình vẽ dạng sơ đồ cách điệu thể hiện các thiết bị bằng vật liệu perovskit theo một số phương án của sáng chế.

Mô tả chi tiết sáng chế

Các cải tiến theo các khía cạnh khác nhau của các công nghệ PV tương thích với các PV hữu cơ, vô cơ và/hoặc lai hứa hẹn giảm tiếp chi phí của cả các PV hữu cơ và các PV khác. Ví dụ, một số pin mặt trời, như pin mặt trời nhạy chất màu trạng thái rắn, có thể có ưu điểm là tiết kiệm chi phí và các thành phần thay thế có độ ổn định cao, như các vật liệu vận chuyển điện tích trạng thái rắn (hoặc thông thường là, “các chất điện phân trạng thái rắn”). Ngoài ra, các kiểu pin mặt trời khác nhau có thể có lợi là bao gồm các vật liệu phân cách hoặc các vật liệu khác, trong số các lợi ích khác, tiết kiệm chi phí hơn và bền hơn các lựa chọn thông thường hiện có.

Nói chung, sáng chế đề cập đến các chế phẩm, thiết bị và các phương pháp sử dụng các vật liệu trong các pin quang điện trong quá trình tạo ra điện năng từ bức xạ mặt trời. Cụ thể hơn là, sáng chế đề cập đến chất quang hoạt và các chế phẩm khác, cũng như thiết bị, các phương pháp sử dụng và cách tạo thành chế phẩm này.

Các ví dụ về các chế phẩm này có thể bao gồm, ví dụ, các vật liệu vận chuyển lỗ trống và/hoặc các vật liệu có thể phù hợp để sử dụng làm, ví dụ, các lớp phân cách (Interfacial Layer, IFL), các chất màu và/hoặc các chi tiết khác của các thiết bị PV. Các hợp chất này có thể được triển khai trong nhiều thiết bị PV khác nhau, như các pin chuyển tiếp dị thể (ví dụ, hai lớp và khối), các pin lai (ví dụ, các chất hữu cơ có $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, các sợi nano ZnO hoặc các chấm lượng tử PbS) và các pin mặt trời nhạy chất màu (Dye-Sensitized Solar Cell, DSSC). Các DSSC, tồn tại ở ba dạng: các chất điện phân gốc dung môi, các chất điện phân lỏng có ion và các chất vận chuyển lỗ trống trạng thái rắn (hoặc các DSSC trạng thái rắn, tức là, các SS-DSSC). Các cấu trúc SS-DSSC theo một số phương án có thể gần như

không có chất điện phân, thay vào đó chứa các vật liệu vận chuyển lỗ trống như spiro-OMeTAD, CsSnI₃ và các vật liệu hoạt hóa khác.

Một số hoặc tất cả các vật liệu theo một số phương án của sáng chế có thể cũng được sử dụng một cách có lợi trong thiết bị hữu cơ bất kỳ hoặc thiết bị điện tử khác, với một số ví dụ bao gồm, nhưng không giới hạn ở: ắc quy, các tranzito hiệu ứng trường (Field Effect Transistor, FET), các điốt phát quang (Light-Emitting Diode, LED), các thiết bị quang không tuyến tính, các điện trở bộ nhớ (memristor), các tụ điện, các bộ chỉnh lưu và/hoặc các anten chỉnh lưu.

Theo một số phương án, sáng chế có thể đề xuất các thiết bị PV và các thiết bị tương tự khác (ví dụ, ắc quy, ắc quy PV lai, các PV đa chuyển tiếp, các FET, các LED, v.v.). Các thiết bị này theo một số phương án có thể bao gồm vật liệu hoạt hóa cải tiến, các lớp phân cách và/hoặc một hoặc nhiều vật liệu perovskit. Vật liệu perovskit có thể được kết hợp vào một hoặc nhiều bộ phận khác nhau của thiết bị PV hoặc thiết bị khác. Vật liệu perovskit theo một số phương án có thể có công thức chung là CMX₃, trong đó: C bao gồm một hoặc nhiều cation (ví dụ, amin, amoni, kim loại nhóm 1, kim loại nhóm 2 và/hoặc các cation hoặc các hợp chất tương tự cation); M bao gồm một hoặc nhiều kim loại (các ví dụ bao gồm Fe, Co, Ni, Cu, Sn, Pb, Bi, Ge, Ti và Zr), X bao gồm một hoặc nhiều anion. Các vật liệu perovskit theo các phương án khác nhau được thảo luận chi tiết bên dưới.

Các pin quang điện và các thiết bị điện tử khác

Một số phương án về PV có thể được mô tả với tham chiếu đến các phần mô tả minh họa khác nhau của các pin mặt trời như được thể hiện trên Fig.1, Fig.3, Fig.4 và Fig.5. Ví dụ, cấu trúc PV làm ví dụ theo một số phương án về cơ bản có thể có dạng nền-anôt-IFL-lớp hoạt hóa-IFL-catôt. Lớp hoạt hóa theo một số phương án có thể là chất quang hoạt và/hoặc lớp hoạt hóa có thể bao gồm vật liệu quang hoạt. Các lớp và các vật liệu khác có thể được sử dụng trong pin như đã biết đến trong lĩnh vực kỹ thuật này. Ngoài ra, cần lưu ý rằng, việc sử dụng thuật ngữ “lớp hoạt hóa” không có nghĩa là giới hạn hoặc xác định theo cách khác, rõ ràng hoặc hoàn toàn, các đặc tính của lớp khác bất kỳ - chẳng hạn, theo một số phương án, một hoặc cả hai IFL cũng có thể là hoạt hóa trong phạm vi nào đó vì chúng có

thể là bán dẫn. Cụ thể là, tham chiếu đến Fig.4, pin PV chung cách điệu 2610 được minh họa, thể hiện bản chất phân cách cao của một số lớp trong PV. PV 2610 biểu diễn kết cấu chung có thể áp dụng cho một số thiết bị PV, như các phương án về vật liệu perovskit PV. Pin PV 2610 bao gồm lớp trong suốt 2612 bằng thủy tinh (hoặc vật liệu tương tự trong suốt với bức xạ mặt trời) cho phép bức xạ mặt trời 2614 truyền qua lớp này. Lớp trong suốt theo một số phương án có thể cũng được gọi là nền (ví dụ, như với lớp nền1507 trên Fig.1) và có thể bao gồm một hoặc nhiều vật liệu bất kỳ trong số các vật liệu cứng hoặc mềm dẻo khác nhau như: thủy tinh, polyetylen, PET, Kapton, thạch anh, phoi nhôm, phoi vàng, hoặc thép. Lớp quang hoạt 2616 gồm chất cho điện tử hoặc vật liệu loại p 2618 và/hoặc chất nhận điện tử hoặc vật liệu loại n 2620 và/hoặc bán dẫn lưỡng cực, thể hiện cả hai đặc tính của vật liệu loại p và loại n . Lớp hoạt hóa hoặc, như được minh họa trên Fig.4, lớp quang hoạt 2616, được kẹp giữa hai lớp điện cực dẫn 2622 và 2624. Trên Fig.4, lớp điện cực 2622 là indi oxit pha tạp chì (vật liệu ITO). Như đã lưu ý từ trước, lớp hoạt hóa theo một số phương án không nhất thiết là quang hoạt, mặc dù ở trong thiết bị được thể hiện trên Fig.4, lớp hoạt hóa là quang hoạt. Lớp điện cực 2624 là vật liệu nhôm. Các vật liệu khác có thể được sử dụng như đã biết trong lĩnh vực kỹ thuật này. Pin 2610 cũng bao gồm lớp phân cách (IFL) 2626, được thể hiện trong ví dụ trên Fig.4 như vật liệu ZnO. IFL có thể hỗ trợ cho việc tách điện tích. Theo một số phương án, IFL 2626 có thể bao gồm hợp chất hữu cơ theo sáng chế ở dạng đơn lớp tự ráp (Self-Assembled Monolayer, SAM) hoặc ở dạng màng mỏng. Theo các phương án khác, IFL 2626 có thể bao gồm IFL đa lớp, được thảo luận chi tiết bên dưới. Cũng có thể là IFL 2627 liền kề với điện cực 2624. Theo một số phương án, IFL 2627 liền kề với điện cực 2624 cũng có thể là hoặc thay vào đó bao gồm hợp chất hữu cơ theo sáng chế ở dạng đơn lớp tự ráp (Self-Assembled Monolayer, SAM) hoặc ở dạng màng mỏng. Theo các phương án khác, IFL 2627 liền kề với điện cực 2624 cũng có thể là hoặc thay vào đó bao gồm IFL đa lớp (được thảo luận chi tiết lần nữa bên dưới). IFL theo một số phương án có thể có tính chất bán dẫn và có thể là loại p hoặc loại n , hoặc có thể có tính chất điện môi. Theo một số phương án, IFL ở phía catốt của thiết bị (ví dụ, IFL 2627 như được thể hiện trên Fig.4) có thể là loại p và IFL ở phía anốt của thiết bị (ví dụ, IFL 2626 như được thể hiện trên

Fig.4) có thể là loại n . Tuy nhiên, theo các phương án khác, IFL phía catôt có thể là loại n và IFL phía anôt có thể là loại p . Pin 2610 được lắp vào các đầu dẫn 2630 và bộ xả 2632, như ắc quy.

Các phương án khác nữa có thể có thể được mô tả với tham chiếu đến Fig.3, hình vẽ này minh họa thiết kế của thiết bị BHJ cách điệu và bao gồm: nền thủy tinh 2401; ITO (indi oxit pha tạp thiếc) điện cực 2402; lớp phân cách (IFL) 2403; lớp quang hoạt 2404, các catôt LiF/Al 2405. Các vật liệu cấu thành BHJ được tham chiếu đến chỉ là các ví dụ; cấu trúc BHJ khác bất kỳ đã biết trong lĩnh vực kỹ thuật này có thể được sử dụng theo sáng chế. Theo một số phương án, lớp quang hoạt 2404 có thể bao gồm một hoặc nhiều vật liệu bất kỳ mà lớp hoạt hóa hoặc quang hoạt 2616 của thiết bị trên Fig.4 có thể bao gồm.

Fig.1 là hình vẽ minh họa được đơn giản hóa về các PV DSSC theo một số phương án, được tham chiếu ở đây nhằm mục đích thể hiện cụm của các PV làm ví dụ này. DSSC làm ví dụ như được thể hiện trên Fig.1 có thể được tạo kết cấu theo trật tự sau: lớp điện cực 1506 (được thể hiện là thiếc oxit pha tạp flo, FTO) được lắng đọng trên lớp nền 1507 (được thể hiện là thủy tinh). Lớp vật liệu mao quản trung bình ML 1505 (theo một số phương án có thể là TiO_2) được lắng đọng trên lớp điện cực 1506, sau đó quang điện cực (cho đến nay bao gồm lớp nền 1507, lớp điện cực 1506 và lớp vật liệu mao quản trung bình 1505) được ngâm trong dung môi (không được thể hiện trên hình vẽ) và chất màu 1504. Quá trình này cho phép chất màu 1504 bám vào bề mặt của ML. Điện cực trái dấu được tạo ra bao gồm lớp nền 1501 (cũng được thể hiện là thủy tinh) và lớp điện cực 1502 (được thể hiện là Pt/FTO). Quang điện cực và điện cực trái dấu được kết hợp, kẹp các lớp khác nhau 1502 - 1506 giữa hai các lớp nền 1501 và 1507 như được thể hiện trên Fig.1 và cho phép các lớp điện cực 1502 và 1506 được sử dụng lần lượt làm catôt và anôt. Lớp chất điện phân 1503 được lắng đọng trực tiếp lên quang điện cực hoàn thành sau lớp chất màu 1504 hoặc qua khoảng hở ở thiết bị, thường là lỗ được khoan trước bằng cách thổi cát trong nền điện cực trái dấu 1501. Pin có thể cũng được lắp vào các đầu dẫn và bộ xả, như ắc quy (không được thể hiện trên hình vẽ). Lớp nền 1507 và lớp điện cực 1506 và/hoặc lớp nền 1501 và lớp điện cực 1502 cần phải đủ trong suốt để cho phép bức xạ mặt trời xuyên qua chất màu quang hoạt 1504. Theo một

số phương án, điện cực trái dấu và/hoặc quang điện cực có thể cứng, trong khi điện cực còn lại hoặc cả hai điện cực có thể mềm dẻo. Các lớp nền theo các phương án khác nhau có thể bao gồm một hoặc nhiều vật liệu bất kỳ: thủy tinh, polyetylen, PET, Kapton, thạch anh, phoi nhôm, phoi vàng và thép. Theo các phương án nhất định, DSSC có thể còn bao gồm lớp thu ánh sáng 1601, như được thể hiện trên Fig.2, để phân tán ánh sáng tới để làm tăng độ dài đường dẫn của ánh sáng qua lớp quang hoạt của thiết bị (nhờ vậy tăng khả năng ánh sáng được hấp thụ trong lớp quang hoạt).

Theo các phương án khác, sáng chế đề xuất các DSSC trạng thái rắn. Các DSSC trạng thái rắn theo một số phương án có thể có ưu điểm như không có sự rò rỉ và/hoặc các vấn đề ăn mòn mà có thể ảnh hưởng đến các DSSC bao gồm các chất điện phân lỏng. Ngoài ra, chất mang điện tích trạng thái rắn có thể tạo ra các tính chất vật lý cho thiết bị nhanh hơn (ví dụ, vận chuyển điện tích nhanh hơn). Ngoài ra, theo một số phương án, các chất điện phân trạng thái rắn là quang hoạt và do đó góp phần vào năng lượng từ thiết bị DSSC trạng thái rắn.

Một số ví dụ về các DSSC trạng thái rắn có thể được mô tả với tham chiếu đến Fig.5, là sơ đồ cách điệu của DSSC trạng thái rắn điển hình. Như với pin mặt trời làm ví dụ được minh họa trên Fig.4, lớp hoạt hóa bao gồm vật liệu hoạt hóa (ví dụ, dẫn và/hoặc bán dẫn) thứ nhất 2810 và vật liệu hoạt hóa thứ hai 2815 được kẹp giữa các điện cực 2805 và 2820 (được thể hiện trên Fig.5 lần lượt là Pt/FTO và FTO). Theo phương án được thể hiện trên Fig.5, vật liệu hoạt hóa thứ nhất 2810 là vật liệu hoạt hóa loại *p* và bao gồm chất điện phân trạng thái rắn. Theo các phương án nhất định, vật liệu hoạt hóa thứ nhất 2810 có thể bao gồm vật liệu hữu cơ như spiro-OMeTAD và/hoặc poly(3-hexylthiophen), phức chất vô cơ bậc hai, bậc ba, bậc bốn hoặc lớn hơn bốn, vật liệu bán dẫn rắn bất kỳ, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng. Theo một số phương án, vật liệu hoạt hóa thứ nhất có thể ngoài ra hoặc thay vào đó bao gồm oxit và/hoặc sulfua và/hoặc selenua và/hoặc ioda (ví dụ, CsSnI₃). Như vậy, ví dụ, vật liệu hoạt hóa thứ nhất theo một số phương án có thể bao gồm vật liệu loại *p* trạng thái rắn, có thể bao gồm đồng indi sulfua và theo một số phương án, vật liệu này có thể bao gồm đồng indi galiselenua. Vật liệu hoạt hóa thứ hai 2815 được thể hiện trên Fig.5 là vật liệu hoạt hóa loại *n* và bao gồm TiO₂ được

phủ bằng chất màu. Theo một số phương án, vật liệu hoạt hóa thứ hai tương tự có thể bao gồm vật liệu hữu cơ như spiro-OMeTAD, phức chất vô cơ bậc hai, bậc ba, bậc bốn hoặc cao hơn bốn, hoặc hỗn hợp bất kỳ của chúng. Theo một số phương án, vật liệu hoạt hóa thứ hai có thể bao gồm oxit như nhôm oxit và/hoặc vật liệu này có thể bao gồm sulfua và/hoặc vật liệu này có thể bao gồm selenua. Bởi vậy, theo một số phương án, vật liệu hoạt hóa thứ hai có thể bao gồm đồng indi sulfua và theo một số phương án, vật liệu này có thể bao gồm kim loại đồng indi gali selenua. Vật liệu hoạt hóa thứ hai 2815 theo một số phương án có thể tạo thành lớp vật liệu mao quản trung bình. Ngoài ra, ngoài hoạt hóa, một hoặc cả hai vật liệu hoạt hóa thứ nhất 2810 và vật liệu hoạt hóa thứ hai 2815 có thể là quang hoạt. Theo các phương án khác (không được thể hiện trên Fig.5), vật liệu hoạt hóa thứ hai có thể bao gồm chất điện phân rắn. Ngoài ra, theo các phương án, trong đó một trong số vật liệu hoạt hóa thứ nhất 2810 và vật liệu hoạt hóa thứ hai 2815 bao gồm chất điện phân rắn, thiết bị PV có thể thiếu lượng chất điện phân lỏng hữu dụng. Mặc dù được thể hiện và được tham chiếu đến trên Fig.5 là loại p , nhưng lớp trạng thái rắn (ví dụ, vật liệu hoạt hóa thứ nhất bao gồm chất điện phân rắn) theo một số phương án thay vào đó có thể là bán dẫn loại n . Theo các phương án này, sau đó, vật liệu hoạt hóa thứ hai (ví dụ, TiO_2 (hoặc vật liệu mao quản trung bình khác) như được thể hiện trên Fig.5) được phủ bằng chất màu có thể là bán dẫn loại p (ngược với bán dẫn loại n được thể hiện trên, và thảo luận với tham chiếu đến, Fig.5).

Các lớp nền 2801 và 2825 (cả hai lớp được thể hiện trên Fig.5 là thủy tinh) từ các lớp trên và dưới bên ngoài tương ứng của pin làm ví dụ trên Fig.5. Các lớp này có thể bao gồm vật liệu bất kỳ đủ trong suốt để cho phép bức xạ mặt trời xuyên qua lớp hoạt hóa/quang hoạt bao gồm chất màu, vật liệu hoạt hóa và/hoặc quang hoạt thứ nhất 2810 và vật liệu hoạt hóa và/hoặc quang hoạt thứ hai 2815, như thủy tinh, polyetylen, PET, Kapton, thạch anh, phoi nhôm, phoi vàng và/hoặc thép. Ngoài ra, theo phương án được thể hiện trên Fig.5, điện cực 2805 (được thể hiện là Pt/FTO) là catôt và điện cực 2820 là anôt. Như với pin mặt trời được minh họa trên Fig.4, bức xạ mặt trời xuyên qua lớp nền 2825 và điện cực 2820 vào lớp hoạt hóa, sau đó ít nhất một phần của bức xạ mặt trời được hấp thụ để tạo ra một hoặc nhiều kích thích để cho phép tạo ra điện.

DSSC trạng thái rắn theo một số phương án có thể được tạo kết cấu theo cách về cơ bản tương tự với cách được mô tả ở trên liên quan đến DSSC được minh họa cách điệu trên Fig.1. Theo phương án được thể hiện trên Fig.5, vật liệu hoạt hóa loại *p* 2810 tương ứng với chất điện phân 1503 trên Fig.1; vật liệu hoạt hóa loại *n* 2815 tương ứng với cả chất màu 1504 và ML 1505 trên Fig.1; các điện cực 2805 và 2820 lần lượt tương ứng với các lớp điện cực 1502 và 1506 trên Fig.1; và các lớp nền 2801 và 2825 lần lượt tương ứng với các lớp nền 1501 và 1507.

Các phương án khác nhau của sáng chế đề xuất các vật liệu và/hoặc thiết kế cải tiến theo các khía cạnh khác nhau của pin mặt trời và các thiết bị khác, bao gồm trong số các vật liệu khác, các vật liệu hoạt hóa (bao gồm các lớp vận chuyển lỗ trống và/hoặc vận chuyển điện tử), các lớp phân cách và thiết kế tổng thể của thiết bị.

Các lớp phân cách

Theo một số phương án, sáng chế đề xuất các vật liệu và các thiết kế có lợi của một hoặc nhiều lớp phân cách trong PV, bao gồm các IFL phủ mỏng. Các IFL phủ mỏng có thể được sử dụng trong một hoặc nhiều IFL của PV theo các phương án khác nhau được thảo luận ở đây.

Theo các phương án khác nhau, các thiết bị tùy ý có thể bao gồm lớp phân cách giữa bất kỳ hai lớp khác và/hoặc các vật liệu, mặc dù các thiết bị không cần chứa các lớp phân cách bất kỳ. Ví dụ, thiết bị bằng vật liệu perovskit có thể chứa 0, một, hai, ba, bốn, năm hoặc nhiều hơn năm lớp phân cách (như thiết bị làm ví dụ trên Fig.7, thiết bị này có năm lớp phân cách 3903, 3905, 3907, 3909 và 3911). Lớp phân cách có thể bao gồm vật liệu thích hợp bất kỳ để tăng cường sự vận chuyển và/hoặc thu gom điện tích giữa hai lớp hoặc vật liệu; lớp phân cách có thể cũng giúp cho việc ngăn chặn hoặc giảm khả năng tái kết hợp điện tích khi điện tích được vận chuyển khỏi một trong số các vật liệu liền kề với lớp phân cách. Lớp phân cách có thể ngoài ra đồng nhất về vật lý và điện các nền của nó để tạo ra dao động ở độ nhám lớp nền, hằng số điện môi, độ bám dính, tạo ra hoặc triệt tiêu các khuyết tật (ví dụ, các bẫy điện tích, các trạng thái bề mặt). Các vật liệu phân cách thích hợp có thể bao gồm một hoặc nhiều bất kỳ trong số: Al; Bi; Co; Cu; Fe; In;

Mn; Mo; Ni; bạch kim (Pt); Si; Sn; Ta; Ti; V; W; Nb; Zn; Zr; các oxit của kim loại bất kỳ trong số các kim loại nêu trên (ví dụ, nhôm oxit, silic oxit, titan oxit); sulfua của kim loại bất kỳ trong số các kim loại nêu trên; nitrua của kim loại bất kỳ trong số các kim loại nêu trên; các nhóm chức hoặc không chức alkyl silyl; graphit; graphen; các fuloren; các ống nano cacbon; vật liệu mao quản trung bình và/hoặc vật liệu phân cách bất kỳ được thảo luận trong bản mô tả này, các hỗn hợp của chúng (bao gồm, theo một số phương án, hai lớp của các vật liệu kết hợp). Theo một số phương án, lớp phân cách có thể bao gồm vật liệu perovskit. Ngoài ra, các lớp phân cách có thể bao gồm các phương án của bất kỳ vật liệu phân cách được pha tạp được nêu ở đây (ví dụ, ZnO pha tạp Y, các ống nano cacbon một vách pha N).

Trước tiên, như được lưu ý từ trước, một hoặc nhiều IFL (ví dụ, một hoặc cả hai IFL 2626 và 2627 như được thể hiện trên Fig.4) có thể bao gồm quang hoạt hợp chất hữu cơ của sáng chế là đơn lớp tự ráp (Self-Assembled Monolayer, SAM) hoặc là màng mỏng. Khi hợp chất hữu cơ quang hoạt theo sáng chế được sử dụng làm SAM, thì lớp này có thể bao gồm nhóm gắn kết, qua đó lớp này có thể được liên kết đồng hóa trị hoặc theo cách khác vào bề mặt của một hoặc cả hai anốt và catốt. Nhóm liên kết theo một số phương án có thể bao gồm một hoặc nhiều bất kỳ trong số COOH, SiX₃ (trong đó X có thể là gốc bất kỳ phù hợp để tạo ra hợp chất silic bậc ba, như Si(OR)₃ và SiCl₃), SO₃, PO₄H, OH, CH₂X (trong đó X có thể bao gồm halogenua nhóm 17) và O. Nhóm liên kết này có thể được liên kết đồng hóa trị hoặc theo cách khác với gốc kéo điện tử, gốc cho điện tử và/hoặc gốc lõi. Nhóm liên kết này có thể gắn vào bề mặt điện cực theo cách tạo ra lớp định hướng, có tổ chức của một phân tử (hoặc theo một số phương án nhiều phân tử) theo chiều dày (ví dụ, trong đó nhiều hợp chất hữu cơ quang hoạt được gắn kết với anốt và/hoặc catốt). Như đã lưu ý, SAM có thể gắn qua các tương tác đồng hóa trị, nhưng theo một số phương án có thể gắn kết tương tác hydro, ion và/hoặc lực phân tán (ví dụ Van Der Waals). Ngoài ra, theo các phương án nhất định, khi phơi sáng, SAM có thể chuyển sang trạng thái kích thích ion lưỡng tính, nhờ vậy tạo ra IFL phân cực cao, có thể hướng các chất mang điện tích từ lớp hoạt hóa vào điện cực (ví dụ, hoặc anốt hoặc catốt). Quá trình này tăng cường sự phun chất mang điện tích, theo một

số phương án, có thể được thực hiện bằng cách đánh bóng điện tử qua mặt cắt ngang của lớp hoạt hóa và do đó tăng vận tốc dịch chuyển của chất mang điện tích về phía các điện cực tương ứng (ví dụ, lỗ trống về phía anôt; điện tử về phía catôt). Các phân tử dùng cho các ứng dụng anôt theo một số phương án có thể bao gồm các hợp chất có thể điều chỉnh bao gồm gốc cho điện tử sơ cấp được gắn kết với gốc lõi, mà đến lượt nó được gắn kết với gốc kéo điện tử, mà đến lượt nó được gắn với nhóm liên kết. Trong các ứng dụng catôt theo một số phương án, các phân tử IFL có thể bao gồm hợp chất điều chỉnh bao gồm gốc nghèo điện tử được gắn kết với gốc lõi, mà đến lượt nó được gắn kết với gốc cho điện tử, mà đến lượt nó được gắn kết với nhóm liên kết. Khi hợp chất hữu cơ quang hoạt được sử dụng làm IFL theo các phương án này, thì nó có thể giữ được tính chất quang hoạt, mặc dù theo một số phương án nó không cần quang hoạt.

Ngoài ra hoặc thay vì hợp chất hữu cơ quang hoạt SAM IFL, PV theo một số phương án có thể bao gồm lớp phân cách mỏng (“lớp phân cách phủ mỏng” hoặc “IFL phủ mỏng”) được phủ lên ít nhất một phần của vật liệu hoạt hóa thứ nhất hoặc vật liệu hoạt hóa thứ hai theo các phương án này (ví dụ, vật liệu hoạt hóa thứ nhất 2810 hoặc vật liệu hoạt hóa thứ hai 2815 như được thể hiện trên Fig.5). Và đến lượt, ít nhất một phần của IFL phủ mỏng có thể được phủ bằng chất màu. IFL phủ mỏng có thể là loại n hoặc loại p ; theo một số phương án, nó có thể là cùng loại với vật liệu lớp dưới (ví dụ, TiO_2 hoặc vật liệu mao quản trung bình khác, như TiO_2 của vật liệu hoạt hóa thứ hai 2815). Vật liệu hoạt hóa thứ hai có thể bao gồm TiO_2 được phủ bằng IFL phủ mỏng bao gồm nhôm oxit (ví dụ, Al_2O_3) (không được thể hiện trên Fig.5), mà đến lượt được phủ bằng chất màu. Ở đây tham chiếu đến TiO_2 và/hoặc titan oxit không được dự định nhằm giới hạn các tỷ lệ của thiếc và oxit trong các hợp chất thiếc oxit được mô tả ở đây. Tức là, hợp chất titan oxit có thể bao gồm titan trong một hoặc nhiều bất kỳ trong số các trạng thái oxy hóa khác nhau (ví dụ, titan I, titan II, titan III, titan IV) và do đó các phương án khác nhau này có thể bao gồm các lượng hóa học lượng pháp và/hoặc không hóa học lượng pháp của titan và oxit. Bởi vậy, các phương án khác nhau có thể bao gồm (thay vì hoặc ngoài TiO_2) Ti_xO_y , trong đó x có thể là giá trị bất kỳ, số nguyên hoặc số không nguyên nằm trong khoảng từ 1 đến 100. Theo một số phương án, x có thể là nằm

trong khoảng từ 0,5 đến 3. Tương tự, y có thể nằm trong khoảng từ 1,5 đến 4 (và cũng không cần là số nguyên). Vì vậy, một số phương án có thể bao gồm, ví dụ TiO_2 và/hoặc Ti_2O_3 . Ngoài ra, titan oxit theo các tỷ lệ nào đó hoặc kết hợp của các tỷ lệ giữa titan và oxit có thể là bất kỳ một hoặc nhiều cấu trúc tinh thể theo một số phương án, bao gồm một hoặc nhiều bất kỳ trong số anatase, rutil và chất vô định hình.

Kim loại oxit làm ví dụ khác để sử dụng trong IFL phủ mỏng theo một số phương án có thể bao gồm các kim loại oxit bán dẫn, như NiO , WO_3 , V_2O_5 , hoặc MoO_3 . Phương án trong đó vật liệu hoạt hóa thứ hai (ví dụ, loại n) bao gồm TiO_2 được phủ bằng IFL phủ mỏng bao gồm Al_2O_3 có thể được tạo ra, ví dụ, bằng vật liệu tiền chất như $\text{Al}(\text{NO}_3)_3 \cdot x\text{H}_2\text{O}$, hoặc vật liệu bất kỳ khác phù hợp để lắng đọng Al_2O_3 trên TiO_2 , sau đó ủ nhiệt và phủ chất màu. Theo các phương án làm ví dụ, trong đó thay vì lớp phủ MoO_3 được sử dụng, lớp phủ có thể được tạo ra bằng vật liệu tiền chất như $\text{Na}_2\text{MoO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$; trong khi đó lớp phủ V_2O_5 theo một số phương án có thể được tạo ra bằng vật liệu tiền chất như NaVO_3 , lớp phủ WO_3 theo một số phương án có thể được tạo ra bằng vật liệu tiền chất như $\text{NaWO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$. Hàm lượng của vật liệu tiền chất (ví dụ, $\text{Al}(\text{NO}_3)_3 \cdot x\text{H}_2\text{O}$) có thể ảnh hưởng đến độ dày của màng cuối cùng (ở đây là Al_2O_3) được lắng đọng trên TiO_2 hoặc vật liệu hoạt hóa khác. Do vậy, điều chỉnh hàm lượng của vật liệu tiền chất có thể là phương pháp điều khiển độ dày màng cuối cùng. Ví dụ, độ dày màng lớn hơn có thể do hàm lượng vật liệu tiền chất lớn hơn. Độ dày màng lớn hơn có thể không nhất thiết dẫn đến PCE lớn hơn trong thiết bị PV bao gồm lớp phủ bằng kim loại oxit. Bởi vậy, phương pháp theo một số phương án có thể bao gồm bước phủ lớp TiO_2 (hoặc vật liệu mao quản trung bình khác) sử dụng vật liệu tiền chất có hàm lượng nằm trong khoảng từ 0,5 đến 10,0 mM; các phương án khác có thể bao gồm bước phủ lớp bằng vật liệu tiền chất có hàm lượng nằm trong khoảng từ 2,0 đến 6,0 mM; hoặc theo các phương án khác, từ 2,5 đến 5,5 mM.

Ngoài ra, mặc dù ở đây được gọi là Al_2O_3 và/hoặc nhôm oxit, nhưng cần lưu ý rằng các tỷ lệ khác nhau của nhôm và oxy có thể được sử dụng trong việc tạo thành nhôm oxit. Bởi vậy, mặc dù một số phương án được thảo luận ở đây được mô tả với tham chiếu đến Al_2O_3 , nhưng phần mô tả này không nhằm xác định tỷ lệ cần

thiết của nhôm trong oxy. Thay vào đó, các phương án có thể bao gồm một hoặc nhiều hợp chất nhôm-oxit bất kỳ, mỗi hợp chất có tỷ lệ nhôm oxit theo Al_xO_y , trong đó x có thể là giá trị bất kỳ, số nguyên hoặc số không nguyên, nằm trong khoảng từ 1 đến 100. Theo một số phương án, x có thể nằm trong khoảng từ 1 đến 3 (và cũng không cần là số nguyên). Tương tự, y có thể là giá trị bất kỳ, số nguyên hoặc số không nguyên nằm trong khoảng từ 0,1 đến 100. Theo một số phương án, y có thể là giữa 2 và 4 (và cũng không cần là số nguyên). Ngoài ra, các dạng tinh thể khác nhau của Al_xO_y có thể có mặt theo các phương án khác nhau, như alpha, gama và/hoặc các dạng vô định hình của nhôm oxit.

Tương tự, mặc dù ở đây được gọi là MoO_3 , WO_3 và V_2O_5 , nhưng các hợp chất này có thể thay vì hoặc ngoài ra được thể hiện lần lượt là Mo_xO_y , W_xO_y và V_xO_y . Đối với mỗi Mo_xO_y và W_xO_y , x có thể là giá trị bất kỳ, số nguyên hoặc số không nguyên, nằm trong khoảng từ 0,5 đến 100; theo một số phương án, x có thể nằm trong khoảng từ 0,5 đến 1,5. Tương tự, y có thể là giá trị bất kỳ, số nguyên hoặc số không nguyên, nằm trong khoảng từ 1 đến 100. Theo một số phương án, y có thể là giá trị bất kỳ nằm trong khoảng từ 1 đến 4. Đối với V_xO_y , x có thể là giá trị bất kỳ, số nguyên hoặc số không nguyên, nằm trong khoảng từ 0,5 đến 100; theo một số phương án, x này có thể nằm trong khoảng từ 0,5 đến 1,5. Tương tự, y có thể là giá trị bất kỳ, số nguyên hoặc số không nguyên, nằm trong khoảng từ 1 đến 100; theo các phương án nhất định, y có thể là giá trị nguyên hoặc không nguyên nằm trong khoảng từ 1 đến 10.

Tương tự, theo một số phương án minh họa ở đây tham chiếu đến $CsSnI_3$ không nhằm giới hạn các tỷ lệ của các nguyên tố thành phần trong các hợp chất xesi-thiếc-iodin theo các phương án khác nhau. Một số phương án có thể bao gồm các lượng hóa học lượng pháp và/hoặc không hóa học lượng pháp của thiếc và iodua và bởi vậy, các phương án này có thể thay vì hoặc ngoài ra bao gồm các tỷ lệ khác nhau của xesi, thiếc và iodin, như một hoặc nhiều hợp chất xesi-thiếc-iodin bất kỳ, mỗi hợp chất có tỷ lệ $Cs_xSn_yI_z$. Theo các phương án này, x có thể là giá trị bất kỳ, số nguyên hoặc số không nguyên nằm trong khoảng từ 0,1 đến 100. Theo một số phương án, x có thể nằm trong khoảng từ 0,5 đến 1,5 (và cũng không cần là số nguyên). Tương tự, y có thể là giá trị bất kỳ, số nguyên hoặc số không nguyên

nằm trong khoảng từ 0,1 đến 100. Theo một số phương án, y có thể nằm trong khoảng từ 0,5 đến 1,5 (và cũng không cần là số nguyên). Tương tự, z có thể là giá trị bất kỳ, số nguyên hoặc số không nguyên, nằm trong khoảng từ 0,1 đến 100. Theo một số phương án, z có thể nằm trong khoảng từ 2,5 đến 3,5. Ngoài ra CsSnI_3 có thể được pha tạp hoặc trộn với các vật liệu khác, như SnF_2 , theo các tỷ lệ của $\text{CsSnI}_3:\text{SnF}_2$ nằm trong khoảng từ 0,1:1 đến 100:1, bao gồm tất cả các giá trị (số nguyên và số không nguyên) ở giữa.

Ngoài ra, IFL phủ mỏng có thể bao gồm hai lớp. Vì vậy, trở lại ví dụ trong đó IFL phủ mỏng bao gồm kim loại oxit (như nhôm oxit), IFL phủ mỏng có thể bao gồm oxit kim loại cộng TiO_2 . IFL phủ mỏng này có thể có khả năng chống lại sự tái tổ hợp điện tích lớn hơn so với chỉ có vật liệu mao quản trung bình TiO_2 hoặc vật liệu hoạt hóa khác. Ngoài ra, để tạo ra lớp TiO_2 , lớp phủ TiO_2 thứ cấp thường là cần thiết để tạo ra đủ sự phân lớp vật lý của các hạt TiO_2 , theo một số phương án của sáng chế. Việc phủ hai lớp IFL phủ mỏng trên vật liệu mao quản trung bình TiO_2 (hoặc vật liệu mao quản trung bình hoạt hóa khác) có thể bao gồm việc kết hợp phủ sử dụng hợp chất bao gồm cả hai kim loại oxit và TiCl_4 , thu được hai lớp IFL phủ mỏng bao gồm sự kết hợp của kim loại oxit và lớp phủ TiO_2 thứ cấp, có thể tạo ra sự cải tiến về hiệu suất đối với việc sử dụng riêng một trong hai vật liệu.

Theo một số phương án, IFL có thể bao gồm titanat. Titanat theo một số phương án có thể có công thức chung $\text{M}'\text{TiO}_3$, trong đó: M' bao gồm bất kỳ cation $2+$. Theo một số phương án, M' có thể bao gồm dạng cation của Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Ni, Zn, Cd, Hg, Cu, Pd, Pt, Sn, hoặc Pb. Theo một số phương án, IFL có thể bao gồm các loại titanat đơn, theo các phương án khác, IFL có thể bao gồm hai hoặc nhiều hơn hai loại các titanat khác nhau. Theo một phương án, titanat có công thức SrTiO_3 . Theo một phương án khác, titanat có thể có công thức BaTiO_3 . Theo một phương án khác nữa, titanat có thể có công thức CaTiO_3 .

Bằng cách giải thích và không ngụ ý giới hạn bất kỳ, các titanat có cấu trúc tinh thể perovskit và tạo mầm tinh thể mạnh mẽ trong quá trình chuyển hóa phát triển MAPbI_3 . Các titanat nói chung cũng thỏa mãn các yêu cầu IFL khác, như trạng thái sắt điện, tính di động của chất mang điện tích đầy đủ, trong suốt quang

học, các mức năng lượng thích hợp và hằng số điện môi cao.

Vật liệu phân cách bất kỳ được thảo luận ở đây có thể còn bao gồm các chế phẩm được pha tạp. Để cải biến các tính chất (ví dụ, điện, quang và cơ học) của vật liệu phân cách, vật liệu hóa học lượng pháp hoặc không hóa học lượng pháp có thể được pha tạp với một hoặc nhiều nguyên tố (ví dụ, Na, Y, Mg, N, P) theo các lượng nhỏ nằm trong khoảng từ 1 ppb đến 50% mol. Một số ví dụ về các vật liệu phân cách bao gồm: NiO, TiO₂, SrTiO₃, Al₂O₃, ZrO₂, WO₃, V₂O₅, MO₃, ZnO, graphen và muối than. Các ví dụ về các tạp chất khả dụng cho các vật liệu phân cách này bao gồm: Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Sc, Y, Nb, Ti, Fe, Co, Ni, Cu, Ga, Sn, In, B, N, P, C, S, As, halogenua, giả halogenua (ví dụ, xyanua, xyanat, isoxyanat, fulminat, thioxyanat, isothioxyanat, azit, tetracacbonylcobaltat, cacbamoyldixyanometanit, dixyanonitrosometanit, dixyanamit và trixyanometanit) và Al ở trạng thái bất kỳ trong số các trạng thái oxi hóa của nó. Ở đây, tham chiếu đến các vật liệu phân cách được pha tạp không nhằm giới hạn các tỷ lệ của các nguyên tố thành phần trong các hợp chất vật liệu phân cách.

Fig.10 là hình vẽ dạng sơ đồ cách điệu thể hiện thiết bị bằng vật liệu perovskit 4400 theo một số phương án. Mặc dù các thành phần khác nhau của thiết bị 4400 được minh họa là các lớp riêng biệt bao gồm vật liệu liền kề, nhưng cần hiểu rằng Fig.10 là sơ đồ cách điệu; vì vậy, các phương án theo đó có thể bao gồm các lớp riêng biệt này và/hoặc về cơ bản được trộn lẫn, các lớp không liền kề, phù hợp với việc sử dụng “các lớp” đã được thảo luận trước đó ở đây. Thiết bị 4400 bao gồm các nền thứ nhất 4401 và nền thứ hai 4407. Điện cực thứ nhất (ITO) 4402 được bố trí ở bề mặt bên trong của nền thứ nhất 4401 và điện cực thứ hai (Ag) 4406 được bố trí ở bề mặt bên trong của nền thứ hai 4407. Lớp hoạt hóa 4450 được kẹp giữa hai điện cực 4402 và 4406. Lớp hoạt hóa 4450 bao gồm IFL thứ nhất (ví dụ, SrTiO₃) 4403, vật liệu quang hoạt (ví dụ, MAPbI₃) 4404 và lớp vận chuyển điện tích (ví dụ, Spiro-OMeTAD) 4405.

Các IFL phủ mỏng và các phương pháp phủ chúng lên TiO₂ được thảo luận từ trước, theo một số phương án, có thể được sử dụng trong các DSSC bao gồm các chất điện phân lỏng. Vì vậy, trở lại ví dụ của IFL phủ mỏng và tham chiếu trở lại

đến Fig.1 để làm ví dụ, DSSC trên Fig.1 có thể còn bao gồm IFL phủ mỏng như được mô tả ở trên được phủ trên lớp vật liệu mao quản trung bình 1505 (tức là, IFL phủ mỏng sẽ được chèn giữa lớp vật liệu mao quản trung bình 1505 và chất màu 1504).

Theo một phương án, thiết bị bằng vật liệu perovskit có thể được chế tạo bằng cách đúc PbI_2 trên nền ITO phủ SrTiO_3 . PbI_2 có thể được chuyển hóa thành MAPbI_3 bằng quy trình nhúng. Quy trình này được mô tả chi tiết bên dưới. Quy trình chuyển hóa này hoàn chỉnh hơn (khi được quan sát bằng quang phổ kế) so với sự chuẩn bị nền không có SrTiO_3 .

Theo một số phương án, các IFL phủ mỏng được thảo luận trước đó theo ngữ cảnh của các DSSC có thể được sử dụng trong lớp phân cách bất kỳ của thiết bị bán dẫn như PV (ví dụ, PV lai hoặc PV khác), tranzitor hiệu ứng trường, điôt phát quang, thiết bị quang học không tuyến tính, điện trở bộ nhớ (memristor), tụ điện, chỉnh lưu, anten chỉnh lưu, v.v.. Ngoài ra, các IFL phủ mỏng theo một số phương án có thể được sử dụng trong thiết bị bất kỳ trong số các thiết bị khác nhau kết hợp với các hợp chất khác được thảo luận trong bản mô tả này, bao gồm nhưng không giới hạn ở một hoặc nhiều phương án bất kỳ sau đây trong số các phương án khác nhau của sáng chế: vật liệu vận chuyển lỗ trống rắn như vật liệu hoạt hóa và các chất phụ gia (như, theo một số phương án, axit chenodeoxycholic hoặc 1,8-diiodooctan).

Theo một số phương án, nhiều IFL được tạo ra bằng các vật liệu khác nhau có thể được bố trí liên kề với nhau để tạo ra IFL phức hợp. Kết cấu này có thể liên quan đến hai IFL khác nhau, ba IFL khác nhau, hoặc số thậm chí số lượng IFL khác nhau lớn hơn. IFL đa lớp hoặc IFL phức hợp thu được có thể được sử dụng thay cho IFL một vật liệu. Ví dụ, IFL phức hợp có thể được sử dụng làm IFL 2626 và/hoặc làm IFL 2627 trong pin 2610, được thể hiện trong ví dụ trên Fig.4. Mặc dù IFL phức hợp khác với IFL một vật liệu, nhưng việc lắp ráp của pin vật liệu perovskit PV có các IFL đa lớp về cơ bản không khác với việc lắp ráp của pin vật liệu perovskit PV chỉ có các IFL một vật liệu.

Nói chung, IFL phức hợp có thể được tạo ra sử dụng vật liệu bất kỳ trong số

các vật liệu được thảo luận ở đây là thích hợp đối với IFL. Theo một phương án, IFL bao gồm lớp Al_2O_3 và lớp ZnO hoặc M:ZnO (được pha tạp ZnO, ví dụ Be:ZnO, Mg:ZnO, Ca:ZnO, Sr:ZnO, Ba:ZnO, Sc:ZnO, Y:ZnO, Nb:ZnO). Theo một phương án, IFL bao gồm lớp ZrO_2 và lớp ZnO hoặc M:ZnO. Theo các phương án nhất định, IFL bao gồm nhiều lớp. Theo một số phương án, IFL đa lớp nói chung có lớp dẫn, lớp điện môi và lớp bán dẫn. Theo các phương án cụ thể các lớp có thể lặp lại, ví dụ, lớp dẫn, lớp điện môi, lớp bán dẫn, lớp điện môi và lớp bán dẫn. Các ví dụ về các IFL đa lớp bao gồm IFL có lớp ITO, lớp Al_2O_3 , lớp ZnO và lớp Al_2O_3 thứ hai; IFL có lớp ITO, lớp Al_2O_3 , lớp ZnO, lớp Al_2O_3 thứ hai, lớp ZnO thứ hai; IFL có lớp ITO, lớp Al_2O_3 , lớp ZnO, lớp Al_2O_3 thứ hai, lớp ZnO thứ hai và lớp Al_2O_3 thứ ba, các IFL có càng nhiều lớp càng cần thiết để thu được các tính năng mong muốn. Như được thảo luận trước đó, tham chiếu đến các tỷ lệ hóa học lượng pháp nhất định không nhằm giới hạn tỷ lệ của các nguyên tố thành phần trong các lớp IFL theo các phương án khác nhau.

Việc bố trí hai hoặc nhiều hơn hai IFL liên kế làm IFL phức hợp có thể làm tốt hơn IFL đơn trong các pin vật liệu perovskit PV, trong đó các thuộc tính từ mỗi vật liệu IFL có thể được tận dụng trong một IFL. Ví dụ, trong cấu trúc có lớp ITO, lớp Al_2O_3 và lớp ZnO, trong đó ITO là điện cực dẫn, Al_2O_3 là vật liệu điện môi và ZnO là thiết bị bán dẫn loại n, ZnO đóng vai trò là chất nhận điện tử thực hiện tốt các tính chất vận chuyển điện tử (ví dụ, tính di động). Ngoài ra, Al_2O_3 là vật liệu mạnh vật lý mà bám dính tốt vào ITO, đồng nhất bề mặt bằng cách che các khuyết tật bề mặt (ví dụ, các bẫy điện tích) và cải thiện các đặc tính diốt của thiết bị qua sự ngăn chặn dòng tối.

Fig.11 là hình vẽ dạng sơ đồ cách điệu thể hiện thiết bị bằng vật liệu perovskit 4500 theo một số phương án. Mặc dù các thành phần khác nhau của thiết bị 4500 được minh họa là các lớp riêng biệt bao gồm vật liệu liên kế, nhưng cần hiểu rằng Fig.11 là sơ đồ cách điệu; vì vậy, các phương án theo đó có thể bao gồm các lớp riêng biệt này và/hoặc về cơ bản được trộn lẫn, các lớp không liên kế, phù hợp với việc sử dụng “các lớp” đã được thảo luận trước đó. Thiết bị 4500 bao gồm các nền thứ nhất 4501 và nền thứ hai 4508. Điện cực thứ nhất (ví dụ, ITO) 4502 được bố trí trên bề mặt bên trong của nền thứ nhất 4501 và điện cực thứ hai (ví dụ,

Ag) 4507 được bố trí ở bề mặt bên trong của nền thứ hai 4508. Lớp hoạt hóa 4550 được kẹp giữa hai điện cực 4502 và 4507. Lớp hoạt hóa 4550 bao gồm IFL phức hợp bao gồm IFL thứ nhất (ví dụ, Al_2O_3) 4503 và IFL thứ hai (ví dụ, ZnO) 4504, vật liệu quang hoạt (ví dụ, MAPbI_3) 4505 và lớp vận chuyển điện tích (ví dụ, Spiro-OMeTAD) 4506.

Các hình vẽ từ Fig.13 đến Fig.20 là các hình vẽ dạng sơ đồ cách điệu của các thiết bị bằng vật liệu perovskit theo một số phương án. Mặc dù các thành phần khác nhau của các thiết bị được minh họa là các lớp riêng biệt bao gồm vật liệu liên kề, nhưng cần hiểu rằng các hình vẽ từ Fig.13 đến Fig.18 là các sơ đồ cách điệu; vì vậy, các phương án theo chúng có thể bao gồm các lớp riêng biệt này và/hoặc về cơ bản được trộn lẫn, các lớp không liên kề, phù hợp với việc sử dụng “các lớp” đã được thảo luận trước đó. Các thiết bị làm ví dụ bao gồm các lớp và các vật liệu được mô tả trong toàn bộ bản mô tả này. Các thiết bị này có thể bao gồm lớp nền (ví dụ, thủy tinh), các lớp điện cực (ví dụ, ITO, Ag), các lớp phân cách, có thể là các IFL phức hợp (ví dụ, ZnO , Al_2O_3 , Y:ZnO và/hoặc Nb:ZnO), vật liệu quang hoạt (ví dụ MAPbI_3 , FAPbI_3 , $5\text{-AVA}\cdot\text{HCl}$: MAPbI_3 và/hoặc CHP : MAPbI_3) và lớp vận chuyển điện tích (ví dụ, Spiro-OMeTAD, PCDTBT, TFB, TPD, PTB7, F8BT, PPV, MDMO-PPV, MEH-PPV và/hoặc P3HT).

Fig.13 là hình vẽ dạng sơ đồ cách điệu thể hiện thiết bị bằng vật liệu perovskit 6100 theo một số phương án. Mặc dù các thành phần khác nhau của thiết bị 6100 được minh họa là các lớp riêng biệt bao gồm vật liệu liên kề, nhưng cần hiểu rằng Fig.13 là sơ đồ cách điệu; vì vậy, các phương án theo đó có thể bao gồm các lớp riêng biệt này và/hoặc về cơ bản được trộn lẫn, các lớp không liên kề, phù hợp với việc sử dụng “các lớp” đã được thảo luận trước đó. Thiết bị 6100 bao gồm nền (ví dụ, thủy tinh) 6101. Điện cực thứ nhất (ví dụ, ITO) 6102 được bố trí trên bề mặt bên trong của nền 6101 và điện cực thứ hai (ví dụ, Ag) 6107 được bố trí ở trên cùng lớp hoạt hóa 6150, được kẹp giữa hai điện cực 6102 và 6107. Lớp hoạt hóa 6150 bao gồm IFL phức hợp bao gồm IFL thứ nhất (ví dụ, Al_2O_3) 6103 và IFL thứ hai (ví dụ, ZnO) 6104, vật liệu quang hoạt (ví dụ, MAPbI_3) 6105 và lớp vận chuyển điện tích (ví dụ, Spiro-OMeTAD) 6106.

Fig.14 là hình vẽ dạng sơ đồ cách điệu thể hiện thiết bị bằng vật liệu perovskit 6200 theo một số phương án. Mặc dù các thành phần khác nhau của thiết bị 6200 được minh họa là các lớp riêng biệt bao gồm vật liệu liền kề, nhưng cần hiểu rằng Fig.14 là sơ đồ cách điệu; vì vậy, các phương án theo đó có thể bao gồm các lớp riêng biệt này và/hoặc về cơ bản được trộn lẫn, các lớp không liền kề, phù hợp với việc sử dụng “các lớp” đã được thảo luận trước đó. Thiết bị 6200 bao gồm nền (ví dụ, thủy tinh) 6201. Điện cực thứ nhất (ví dụ, ITO) 6202 được bố trí trên bề mặt bên trong của nền 6201 và điện cực thứ hai (ví dụ, Ag) 6206 được bố trí ở trên cùng lớp hoạt hóa 6250, được kẹp giữa hai điện cực 6202 và 6206. Lớp hoạt hóa 6250 bao gồm IFL (ví dụ, Y:ZnO) 6203, vật liệu quang hoạt (ví dụ, MAPbI₃) 6204 và lớp vận chuyển điện tích (ví dụ, P3HT) 6205.

Fig.15 là hình vẽ dạng sơ đồ cách điệu thể hiện thiết bị bằng vật liệu perovskit 6300 theo một số phương án. Mặc dù các thành phần khác nhau của thiết bị 6300 được minh họa là các lớp riêng biệt bao gồm vật liệu liền kề, nhưng cần hiểu rằng Fig.15 là sơ đồ cách điệu; vì vậy, các phương án theo đó có thể bao gồm các lớp riêng biệt này và/hoặc về cơ bản được trộn lẫn, các lớp không liền kề, phù hợp với việc sử dụng “các lớp” đã được thảo luận trước đó. Thiết bị 6300 bao gồm nền (ví dụ, thủy tinh) 6301. Điện cực thứ nhất (ví dụ, ITO) 6302 được bố trí trên bề mặt bên trong của nền 6301 và điện cực thứ hai (ví dụ, Ag) 6309 được bố trí ở trên cùng lớp hoạt hóa 6350, được kẹp giữa hai điện cực 6302 và 6309. Lớp hoạt hóa 6350 bao gồm IFL phức hợp bao gồm IFL thứ nhất (ví dụ, Al₂O₃) 6303, IFL thứ hai (ví dụ, ZnO) 6304, IFL thứ ba (ví dụ, Al₂O₃) 6305 và IFL thứ tư (ví dụ, ZnO) 6306, vật liệu quang hoạt (ví dụ, MAPbI₃) 6307 và lớp vận chuyển điện tích (ví dụ, PCDTBT) 6308.

Fig.16 là hình vẽ dạng sơ đồ cách điệu thể hiện thiết bị bằng vật liệu perovskit 6400 theo một số phương án. Mặc dù các thành phần khác nhau của thiết bị 6400 được minh họa là các lớp riêng biệt bao gồm vật liệu liền kề, nhưng cần hiểu rằng Fig.16 là sơ đồ cách điệu; vì vậy, các phương án theo đó có thể bao gồm các lớp riêng biệt này và/hoặc về cơ bản được trộn lẫn, các lớp không liền kề, phù hợp với việc sử dụng “các lớp” đã được thảo luận trước đó. Thiết bị 6400 bao gồm nền (ví dụ, thủy tinh) 6401. Điện cực thứ nhất (ví dụ, ITO) 6402 được bố trí trên bề

mặt bên trong của nền 6401 và điện cực thứ hai (ví dụ, Ag) 6409 được bố trí ở trên cùng lớp hoạt hóa 6450, được kẹp giữa hai điện cực 6402 và 6409. Lớp hoạt hóa 6450 bao gồm IFL phức hợp bao gồm IFL thứ nhất (ví dụ, Al_2O_3) 6403, IFL thứ hai (ví dụ, ZnO) 6404, IFL thứ ba (ví dụ, Al_2O_3) 6405 và IFL thứ tư (ví dụ, ZnO) 6406, vật liệu quang hoạt (ví dụ, $5\text{-AVA}\cdot\text{HCL}:\text{MAPbI}_3$) 6407 và lớp vận chuyển điện tích (ví dụ, PCDTBT) 6408.

Fig.17 là hình vẽ dạng sơ đồ cách điệu thể hiện thiết bị bằng vật liệu perovskit 6500 theo một số phương án. Mặc dù các thành phần khác nhau của thiết bị 6500 được minh họa là các lớp riêng biệt bao gồm vật liệu liền kề, nhưng cần hiểu rằng Fig.17 là sơ đồ cách điệu; vì vậy, các phương án theo đó có thể bao gồm các lớp riêng biệt này và/hoặc về cơ bản được trộn lẫn, các lớp không liền kề, phù hợp với việc sử dụng “các lớp” đã được thảo luận trước đó. Thiết bị 6500 bao gồm nền (ví dụ, thủy tinh) 6501. Điện cực thứ nhất (ví dụ, ITO) 6502 được bố trí trên bề mặt bên trong của nền 6501 và điện cực thứ hai (ví dụ, Ag) 6506 được bố trí ở trên cùng lớp hoạt hóa 6550, được kẹp giữa hai điện cực 6502 và 6506. Lớp hoạt hóa 6550 bao gồm IFL (ví dụ, $\text{Nb}:\text{ZnO}$) 6503, vật liệu quang hoạt (ví dụ, FAPbI_3) 6504 và lớp vận chuyển điện tích (ví dụ, P3HT) 6505.

Fig.18 là hình vẽ dạng sơ đồ cách điệu thể hiện thiết bị bằng vật liệu perovskit 6600 theo một số phương án. Mặc dù các thành phần khác nhau của thiết bị 6600 được minh họa là các lớp riêng biệt bao gồm vật liệu liền kề, nhưng cần hiểu rằng Fig.18 là sơ đồ cách điệu; vì vậy, các phương án theo đó có thể bao gồm các lớp riêng biệt này và/hoặc về cơ bản được trộn lẫn, các lớp không liền kề, phù hợp với việc sử dụng “các lớp” đã được thảo luận trước đó. Thiết bị 6600 bao gồm nền (ví dụ, thủy tinh) 6601. Điện cực thứ nhất (ví dụ, ITO) 6602 được bố trí trên bề mặt bên trong của nền 6601 và điện cực thứ hai (ví dụ, Ag) 6606 được bố trí ở trên cùng lớp hoạt hóa 6650, được kẹp giữa hai điện cực 6602 và 6606. Lớp hoạt hóa 6650 bao gồm IFL (ví dụ, $\text{Y}:\text{ZnO}$) 6603, vật liệu quang hoạt (ví dụ, $\text{CHP}:\text{MAPbI}_3$) 6604 và lớp vận chuyển điện tích (ví dụ, P3HT) 6605.

Fig.19 là hình vẽ dạng sơ đồ cách điệu thể hiện thiết bị bằng vật liệu perovskit 6700 theo một số phương án. Mặc dù các thành phần khác nhau của thiết

bị 6700 được minh họa là các lớp riêng biệt bao gồm vật liệu liền kề, nhưng cần hiểu rằng Fig.19 là sơ đồ cách điệu; vì vậy, các phương án theo đó có thể bao gồm các lớp riêng biệt này và/hoặc về cơ bản được trộn lẫn, các lớp không liền kề, phù hợp với việc sử dụng “các lớp” đã được thảo luận trước. Thiết bị 6700 bao gồm nền (ví dụ, thủy tinh) 6701. Điện cực thứ nhất (ví dụ, ITO) 6702 được bố trí trên bề mặt bên trong của nền 6701 và điện cực thứ hai (ví dụ, Al) 6707 được bố trí ở trên cùng lớp hoạt hóa 6750, được kẹp giữa hai điện cực 6702 và 6707. Lớp hoạt hóa 6750 bao gồm IFL (ví dụ, SrTiO_3) 6703 vật liệu quang hoạt (ví dụ, FAPbI_3) 6704, lớp vận chuyển điện tích thứ nhất (ví dụ, P3HT) 6705 và lớp vận chuyển điện tích thứ hai (ví dụ, MoOx) 6706.

Fig.20 là hình vẽ dạng sơ đồ cách điệu thể hiện thiết bị bằng vật liệu perovskit 6800 theo một số phương án. Mặc dù các thành phần khác nhau của thiết bị 6800 được minh họa là các lớp riêng biệt bao gồm vật liệu liền kề, nhưng cần hiểu rằng Fig.16 là sơ đồ cách điệu; vì vậy, các phương án theo đó có thể bao gồm các lớp riêng biệt và/hoặc về cơ bản được trộn lẫn, các lớp không liền kề, phù hợp với việc sử dụng “các lớp” đã được thảo luận trước đó. Thiết bị 6800 bao gồm nền (ví dụ, thủy tinh) 6801. Điện cực thứ nhất (ví dụ, ITO) 6802 được bố trí trên bề mặt bên trong của nền 6801 và điện cực thứ hai (ví dụ, Al) 6811 được bố trí ở trên cùng lớp hoạt hóa 6850, được kẹp giữa hai điện cực 6802 và 6811. Lớp hoạt hóa 6850 bao gồm IFL phức hợp bao gồm IFL thứ nhất (ví dụ, Al_2O_3) 6803, IFL thứ hai (ví dụ, ZnO) 6804, IFL thứ ba (ví dụ, Al_2O_3) 6805, IFL thứ tư (ví dụ, ZnO) 6806 và IFL thứ năm (ví dụ, Al_2O_3) 6807, vật liệu quang hoạt (ví dụ, FAPbI_3) 6808, lớp vận chuyển điện tích thứ nhất (ví dụ, P3HT) 6809 và lớp vận chuyển điện tích thứ hai (ví dụ, MoOx) 6810.

Vật liệu perovskit

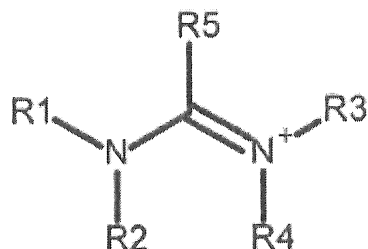
Vật liệu perovskit có thể được kết hợp vào một hoặc nhiều khía cạnh khác nhau của thiết bị PV hoặc thiết bị khác. Vật liệu perovskit theo một số phương án có thể có công thức chung CMX_3 , trong đó: C bao gồm một hoặc nhiều cation (ví dụ, amin, amoni, kim loại nhóm 1, kim loại nhóm 2 và/hoặc các cation khác hoặc các hợp chất giống cation); M bao gồm một hoặc nhiều kim loại (các ví dụ bao gồm

Fe, Co, Ni, Cu, Sn, Pb, Bi, Ge, Ti và Zr), X bao gồm một hoặc nhiều anion. Theo một số phương án, C có thể bao gồm một hoặc nhiều cation hữu cơ.

Theo các phương án nhất định, C có thể bao gồm amoni, cation hữu cơ có công thức chung $[NR_4]^+$, trong đó các nhóm R có thể là các nhóm giống hoặc khác nhau. Các nhóm R thích hợp bao gồm, nhưng không bị giới hạn ở: nhóm metyl, etyl, propyl, butyl, pentyl hoặc chất đồng phân của nó; alkan, alken, hoặc alkyn C_xH_y bất kỳ, trong đó $x = 1 - 20$, $y = 1 - 42$, mạch vòng, nhánh hoặc thẳng; alkyl halogenua, $C_xH_yX_z$, $x = 1 - 20$, $y = 0 - 42$, $z = 1 - 42$, $X = F, Cl, Br$, hoặc I ; nhóm thiom bất kỳ (ví dụ, phenyl, alkylphenyl, alkoxyphenyl, pyridin, naphthalen); các phức chất vòng, trong đó ít nhất một nitơ được chứa bên trong vòng (ví dụ, pyridin, pyrrol, pyrrolidin, piperidin, tetrahydroquinolin); nhóm chứa lưu huỳnh bất kỳ (ví dụ, sulfoxit, thiol, alkyl sulfua); nhóm chứa nitơ bất kỳ (nitroxit, amin); nhóm chứa phospho bất kỳ (phosphat); nhóm chứa bo bất kỳ (ví dụ, axitboronic); axit hữu cơ bất kỳ (ví dụ, axit axetic, axit propanoic), các dẫn xuất este hoặc amit của chúng; axit amin bất kỳ (ví dụ, glyxin, xystein, prolin, axit glutamic, arginin, serin, histindin, axit 5-amonivaleric) bao gồm alpha, beta, gama và các chất dẫn xuất lớn hơn; nhóm chứa silic bất kỳ (ví dụ, siloxan), alkoxy hoặc nhóm bất kỳ $-OC_xH_y$, trong đó $x = 0 - 20$, $y = 1 - 42$.

Theo các phương án nhất định, C có thể bao gồm formamidi, cation hữu cơ có công thức chung $[R_2NCRNR_2]^+$, trong đó các nhóm R có thể là các nhóm giống hoặc khác nhau. Các nhóm R thích hợp bao gồm, nhưng không bị giới hạn ở: hydro, nhóm metyl, etyl, propyl, butyl, pentyl hoặc chất đồng phân của nó; alkan, alken, hoặc alkyn C_xH_y bất kỳ, trong đó $x = 1 - 20$, $y = 1 - 42$, mạch vòng, nhánh hoặc thẳng; alkyl halogenua, $C_xH_yX_z$, $x = 1 - 20$, $y = 0 - 42$, $z = 1 - 42$, $X = F, Cl, Br$, hoặc I ; nhóm thiom bất kỳ (ví dụ, phenyl, alkylphenyl, alkoxyphenyl, pyridin, naphthalen); các phức chất vòng trong đó ít nhất một nitơ được chứa bên trong vòng (ví dụ, imidazol, benzimidazol, dihydro-pyrimidin, (azolidinylidenmetyl)pyrrolidin, triazol); nhóm chứa lưu huỳnh bất kỳ (ví dụ, sulfoxit, thiol, alkyl sulfua); nhóm chứa nitơ bất kỳ (nitroxit, amin); nhóm chứa phospho bất kỳ (phosphat); nhóm chứa bo bất kỳ (ví dụ, axitboronic); axit hữu cơ bất kỳ (axit axetic, axit propanoic) và các dẫn xuất este hoặc amit của chúng; axit amin bất kỳ (ví dụ, glyxin, xystein,

prolin, axit glutamic, arginin, serin, histindin, axit 5-amonivaleric) bao gồm alpha, beta, gama và các chất dẫn xuất lớn hơn; nhóm chứa silic bất kỳ (ví dụ, siloxan), alkoxy hoặc nhóm bất kỳ, $-OCxHy$, trong đó $x = 0 - 20$, $y = 1 - 42$.



Công thức 1

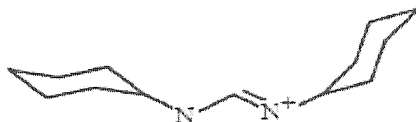
Công thức 1 minh họa cấu trúc của cation formamidi có công thức chung là $[R_2NCRNR_2]^+$ như được mô tả ở trên. Công thức 2 minh họa các cấu trúc ví dụ của một số cation formamidi có thể đóng vai trò làm cation “C” trong vật liệu perovskit.



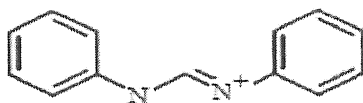
Hydroxy-[(hydroxyamino)metylen]amoni



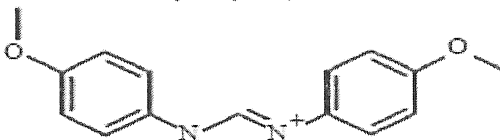
Metyl-[(metylamino)metylen]amoni



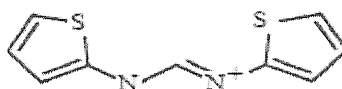
Xyclohexyl-[(xyclohexylamino)metylen]amoni



Anilinometylen(phenyl)amoni



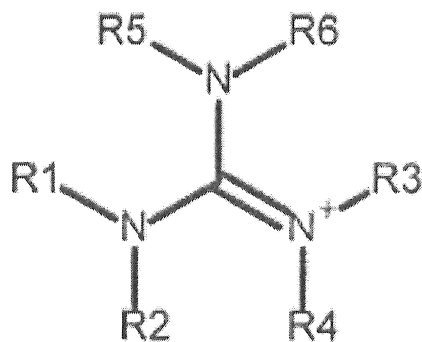
(Metoxyanilino)metylen-(4-metoxyphenyl)amoni



(Thienyl)-[(2-thienylamino)metylen]amoni

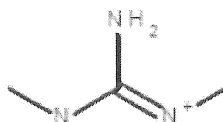
Công thức 2

Theo các phương án nhất định, C có thể bao gồm guanidi, cation hữu cơ có công thức chung $[(R_2N)_2C=NR_2]^+$, trong đó các nhóm R có thể là các nhóm giống hoặc khác nhau. Các nhóm R thích hợp bao gồm, nhưng không bị giới hạn ở: nhóm hydro, metyl, etyl, propyl, butyl, pentyl hoặc chất đồng phân của nó; alkan, alken, hoặc alkyn C_xH_y bất kỳ, trong đó $x = 1 - 20$, $y = 1 - 42$, mạch vòng, nhánh hoặc thẳng; các alkyl halogenua, $C_xH_yX_z$, $x = 1 - 20$, $y = 0 - 42$, $z = 1 - 42$, $X = F, Cl, Br$, hoặc I ; nhóm thơm bất kỳ (ví dụ, phenyl, alkylphenyl, alkoxyphenyl, pyridin, naphtalen); các phức chất vòng trong đó ít nhất một nitơ được chứa bên trong vòng (ví dụ, octahydropyrimido[1,2-a]pyrimidin, pyrimido[1,2-a]pyrimidin, hexahydroimidazo[1,2-a]imidazol, hexahydropyrimidin-2-imin); nhóm chứa lưu huỳnh bất kỳ (ví dụ, sulfoxit, thiol, alkyl sulfua); nhóm chứa nitơ bất kỳ (nitroxit, amin); nhóm chứa phospho bất kỳ (phosphat); nhóm chứa bo bất kỳ (ví dụ, axitboronic); axit hữu cơ bất kỳ (axit axetic, axit propanoic) và các dẫn xuất este hoặc amit của chúng; axit amin bất kỳ (ví dụ, glyxin, xystein, prolin, axit glutamic, arginin, serin, histindin, axit 5-amonivaleric) bao gồm alpha, beta, gama và các chất dẫn xuất lớn hơn; nhóm chứa silic bất kỳ (ví dụ, siloxan), alkoxy hoặc nhóm bất kỳ, $-OC_xH_y$, trong đó $x = 0 - 20$, $y = 1 - 42$.

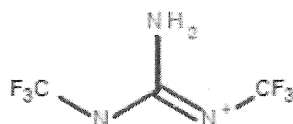


Công thức 3

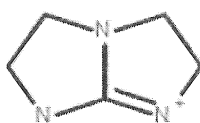
Công thức 3 minh họa cấu trúc của cation guanidi có công thức chung là $[(R_2N)_2C=NR_2]^+$ như được mô tả ở trên. Công thức 4 minh họa các ví dụ về các cấu trúc của một số cation guanidi có thể đóng vai trò làm cation “C” trong vật liệu perovskit.



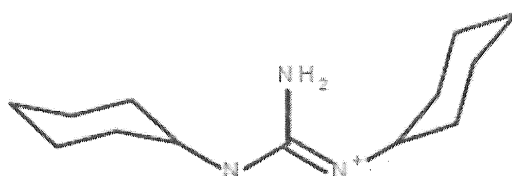
[Amino(methylamino)metylen]-metyl-amoni



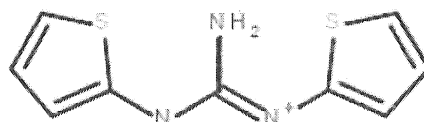
[Amino(triflometylamino)metylen]-(triflometyl)amoni



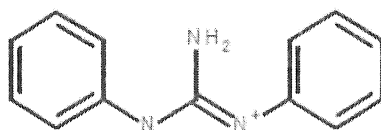
2,3,5,6-Tetrahydro-1H-imidazo[1-2-a]imidazol-7-um



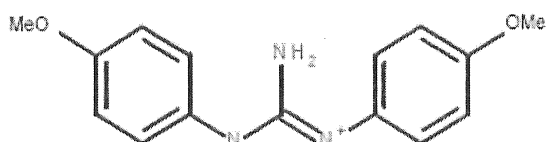
[Amino-(xyclohexylamino)metylen]xyclohexyl-amoni



[Amino-(2-thienylamino)metylen]-2-thienyl)amoni



[Amino(anilino)metylen]-phenyl-amoni

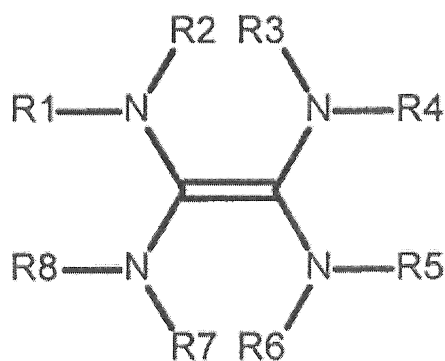


[Amino-(4-metoxyanilino)metylen]-(4-metoxyphenyl)amoni

Công thức 4

Theo các phương án nhất định, C có thể bao gồm eten tetramin cation, cation

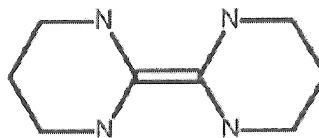
hữu cơ có công thức chung $[(R_2N)_2C=C(NR_2)_2]^+$, trong đó các nhóm R có thể là các nhóm giống hoặc khác nhau. Các nhóm R thích hợp bao gồm, nhưng không bị giới hạn ở: nhóm hydro, metyl, etyl, propyl, butyl, pentyl hoặc chất đồng phân của nó; alkan, alken, hoặc alkyn C_xH_y bất kỳ, trong đó $x = 1 - 20$, $y = 1 - 42$, mạch vòng, nhánh hoặc thẳng; alkyl halogenua, $C_xH_yX_z$, $x = 1 - 20$, $y = 0 - 42$, $z = 1 - 42$, $X = F, Cl, Br$, hoặc I ; nhóm thơm bất kỳ (ví dụ, phenyl, alkylphenyl, alkoxyphenyl, pyridin, naphtalen); các phức chất vòng, trong đó ít nhất một nitơ được chứa bên trong vòng (ví dụ, 2-hexahydropyrimidin-2-ylidenhexahydropyrimidin, octahydropyrazino[2,3-b]pyrazin, pyrazino[2,3-b]pyrazin, quinoxalino[2,3-b]quinoxalin); nhóm chứa lưu huỳnh bất kỳ (ví dụ, sulfoxit, thiol, alkyl sulfua); nhóm chứa nitơ bất kỳ (nitroxit, amin); nhóm chứa phospho bất kỳ (phosphat); nhóm chứa bo bất kỳ (ví dụ, axit boronic); axit hữu cơ bất kỳ (axit axetic, axit propanoic) và các dẫn xuất este hoặc amit của chúng; axit amin bất kỳ (ví dụ, glyxin, xystein, prolin, axit glutamic, arginin, serin, histindin, axit 5-amonivaleric) bao gồm alpha, beta, gama và các chất dẫn xuất lớn hơn; nhóm chứa silic bất kỳ (ví dụ, siloxan), alkoxy hoặc nhóm bất kỳ, $-OC_xH_y$, trong đó $x = 0 - 20$, $y = 1 - 42$.



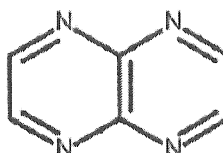
Công thức 5

Công thức 5 minh họa cấu trúc của eten tetramin cation có công thức chung là $[(R_2N)_2C=C(NR_2)_2]^+$ như được mô tả ở trên. Công thức 6 minh họa các ví dụ về các cấu trúc của một số eten tetramin ion có thể đóng vai trò làm cation “C” trong vật liệu perovskit.

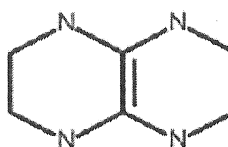
2-hexahydroxypimidin-2-ylidenhexahydropyrimidin



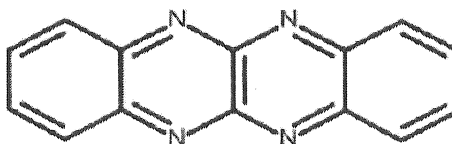
pyrazino[2,3-b]pyrazin



1,2,3,4,5,6,7,8-octahydropyrazino[2,3-b]pyrazin



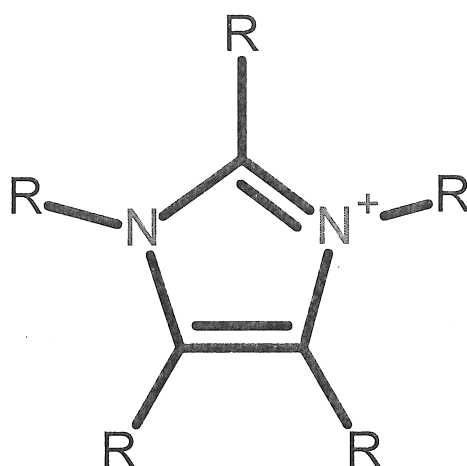
quinoxalino[2,3-b]quinoxalin



Công thức 6

Theo các phương án nhất định, C có thể bao gồm imidazoli cation, cation hữu cơ thơm, vòng có công thức chung $[CRNRCRNRCR]^+$, trong đó các nhóm R có thể là các nhóm giống hoặc khác nhau. Các nhóm R thích hợp có thể bao gồm nhưng không bị giới hạn ở: nhóm hydro, metyl, etyl, propyl, butyl, pentyl hoặc chất đồng phân của nó; alkan, alken, hoặc alkyn C_xH_y bất kỳ, trong đó $x = 1 - 20$, $y = 1 - 42$, mạch vòng, nhánh hoặc thẳng; alkyl halogenua, $C_xH_yX_z$, $x = 1 - 20$, $y = 0 - 42$, $z = 1 - 42$, $X = F, Cl, Br$, hoặc I ; nhóm thơm bất kỳ (ví dụ, phenyl, alkylphenyl, alkoxyphenyl, pyridin, naphtalen); các phức chất vòng trong đó ít nhất một nitơ được chứa bên trong vòng (ví dụ, 2-hexahydropyrimidin-2-ylidenhexahydropyrimidin, octahydropyrazino[2,3-b]pyrazin, pyrazino[2,3-b]pyrazin, quinoxalino[2,3-b]quinoxalin); nhóm chứa lưu huỳnh bất kỳ (ví dụ,

sulfoxit, thiol, alkyl sulfua); nhóm chứa nitơ bất kỳ (nitroxit, amin); nhóm chứa phospho bất kỳ (phosphat); nhóm chứa bo bất kỳ (ví dụ, axit boronic); axit hữu cơ bất kỳ (axit axetic, axit propanoic) và các dẫn xuất este hoặc amit của chúng; axit amin bất kỳ (ví dụ, glyxin, xystein, prolin, axit glutamic, arginin, serin, histindin, axit 5-amonivaleric) bao gồm alpha, beta, gama và các chất dẫn xuất lớn hơn; nhóm chứa silic bất kỳ (ví dụ, siloxan), alkoxy hoặc nhóm bất kỳ, $-OC_xHy$, trong đó $x = 0 - 20$, $y = 1 - 42$.



Công thức 7

Theo một số phương án, X có thể là một hoặc nhiều halogenua. Theo các phương án nhất định, X có thể thay vì hoặc ngoài ra bao gồm anion nhóm 16. Theo các phương án nhất định, anion nhóm 16 có thể là sulfua hoặc selenua. Theo các phương án nhất định, X có thể thay vì hoặc ngoài ra bao gồm một hoặc nhiều giả halogenua (ví dụ, xyanua, xyanat, isoxyanat, fulminat, thioxyanat, isothioxyanat, azit, tetracarbonylcobaltat, carbamoyldixyanometanit, dixyanonitrosometanit, dixyanamit và trixyanometanit). Theo một số phương án, mỗi cation hữu cơ C có thể lớn hơn mỗi kim loại M và mỗi anion X có thể gắn kết với cả cation C và kim loại M. Các ví dụ về các vật liệu perovskit theo các phương án khác nhau bao gồm $CsSnI_3$ (đã được thảo luận trước đó) và $Cs_xSn_yI_z$ (với x, y và z thay đổi theo sự thảo luận trước đó). Các ví dụ khác bao gồm các hợp chất có công thức chung $CsSnX_3$, trong đó X có thể bao gồm một hoặc nhiều bất kỳ trong số: I_3 , $I_{2.95}F_{0.05}$, I_2Cl , ICl_2 , Cl_3 . Theo các phương án khác, X có thể bao gồm một hoặc nhiều bất kỳ trong

số: I, Cl, F và Br theo các lượng sao cho tổng tỷ lệ của X so với Cs và Sn dẫn đến hóa học lượng pháp chung là CsSnX_3 . Theo một số phương án, hóa học lượng pháp kết hợp của các nguyên tố tạo thành X có thể tuân theo cùng nguyên tắc như I_z như thảo luận trước đó liên quan đến $\text{Cs}_x\text{Sn}_y\text{I}_z$. Các ví dụ khác nữa bao gồm các hợp chất có công thức chung RNH_3PbX_3 , trong đó R có thể là $\text{C}_n\text{H}_{2n+1}$, với n nằm trong khoảng từ 0 - 10 và X có thể bao gồm một hoặc nhiều bất kỳ trong số F, Cl, Br và I theo các lượng, sao cho tổng tỷ lệ của X so với cation RNH_3 và kim loại Pb dẫn đến hóa học lượng pháp chung là RNH_3PbX_3 . Ngoài ra, một số ví dụ cụ thể về R bao gồm H, các mạch alkyl (ví dụ, CH_3 , CH_3CH_2 , $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2$ và v.v.) và các axit amin (ví dụ, glyxin, xystein, prolin, axit glutamic, arginin, serin, histindin, axit 5-amonivaleric) bao gồm alpha, beta, gama và các chất dẫn xuất lớn hơn.

Thiết kế của thiết bị bằng vật liệu perovskit phức hợp

Theo một số phương án, sáng chế có thể đề xuất thiết kế phức hợp của các thiết bị PV và các thiết bị tương tự khác (ví dụ, ắc quy, ắc quy PV lai, các FET, các LED, v.v.) bao gồm một hoặc nhiều vật liệu perovskit. Ví dụ, một hoặc nhiều vật liệu perovskit có thể đóng vai trò làm một hoặc cả hai trong số vật liệu hoạt hóa thứ nhất và thứ hai theo một số phương án (ví dụ, các vật liệu hoạt hóa 2810 và 2815 trên Fig.5). Theo các thuật ngữ chung hơn, một số phương án của sáng chế đề xuất các thiết bị PV hoặc các thiết bị khác có lớp hoạt hóa bao gồm một hoặc nhiều vật liệu perovskit. Theo các phương án này, vật liệu perovskit (tức là, vật liệu bao gồm một hoặc nhiều vật liệu perovskit bất kỳ) có thể được sử dụng trong các lớp hoạt hóa có các cấu trúc khác nhau. Ngoài ra, vật liệu perovskit có thể thực hiện (các) chức năng của một hoặc nhiều thành phần bất kỳ của lớp hoạt hóa (ví dụ, vật liệu vận chuyển điện tích, vật liệu mao quản trung bình, vật liệu quang hoạt và/hoặc vật liệu phân cách, mỗi trong số các vật liệu này được thảo luận chi tiết bên dưới). Theo một số phương án, cùng các vật liệu perovskit có thể thực hiện nhiều chức năng này, mặc dù theo các phương án khác, các vật liệu perovskit có thể nằm trong thiết bị, mỗi vật liệu perovskit thực hiện một hoặc nhiều chức năng này. Theo các phương án nhất định, vai trò bất kỳ mà vật liệu perovskit có thể thực hiện, vật liệu perovskit này có thể được chuẩn bị và/hoặc có mặt trong thiết bị ở các trạng thái khác nhau. Ví dụ, theo một số phương án, vật liệu perovskit có thể về cơ bản là rắn.

Theo các phương án khác, vật liệu này có thể là dung dịch (ví dụ, vật liệu perovskit có thể được hòa tan trong chất lỏng và có mặt trong chất lỏng này trong các loại ion phụ riêng biệt của nó); hoặc vật liệu này có thể là huyền phù (ví dụ, của các hạt vật liệu perovskit). Dung dịch hoặc huyền phù có thể được phủ hoặc theo cách khác được lắng đọng bên trong thiết bị (ví dụ, trên thành phần khác của thiết bị như lớp vật liệu mao quản trung bình, phân lớp, vận chuyển điện tích, quang hoạt, hoặc lớp khác và/hoặc trên điện cực). Các vật liệu perovskit theo một số phương án có thể được tạo ra tại chỗ trên bề mặt của thành phần khác của thiết bị (ví dụ, bằng cách lắng đọng hơi là chất rắn màng mỏng). Phương tiện thích hợp khác bất kỳ tạo thành lớp rắn hoặc lỏng bao gồm vật liệu perovskit có thể được sử dụng.

Nói chung, thiết bị bằng vật liệu perovskit có thể bao gồm điện cực thứ nhất, điện cực thứ hai và lớp hoạt hóa bao gồm vật liệu perovskit, lớp hoạt hóa này được bố trí ở ít nhất một phần giữa các điện cực thứ nhất và thứ hai. Theo một số phương án, điện cực thứ nhất có thể là một trong số anốt và catốt và điện cực thứ hai có thể là điện cực còn lại trong số anốt và catốt. Lớp hoạt hóa theo các phương án nhất định có thể bao gồm một hoặc nhiều thành phần của lớp hoạt hóa bất kỳ, bao gồm một hoặc nhiều bất kỳ trong số: vật liệu vận chuyển điện tích; chất điện phân lỏng; vật liệu mao quản trung bình; vật liệu quang hoạt (ví dụ, chất màu, silic, cadmi telurit, cadmisulfua, cadmiselenua, đồng indi galiselenua, galiarsenua, germani indi phosphua, các polyme bán dẫn, các vật liệu quang hoạt khác)), và vật liệu phân cách. Một hoặc nhiều bất kỳ trong số các thành phần của lớp hoạt hóa này có thể bao gồm một hoặc nhiều vật liệu perovskit. Theo một số phương án, một số hoặc tất cả các thành phần của lớp hoạt hóa có thể được bố trí toàn bộ hoặc một phần trong các lớp phụ. Ví dụ, lớp hoạt hóa có thể bao gồm một hoặc nhiều bất kỳ trong số: lớp phân cách bao gồm vật liệu phân cách; lớp vật liệu mao quản trung bình bao gồm vật liệu mao quản trung bình, lớp vận chuyển điện tích bao gồm vật liệu vận chuyển điện tích. Theo một số phương án, vật liệu quang hoạt như chất màu có thể được phủ lên, hoặc theo cách khác được lắng đọng trên, một hoặc nhiều lớp bất kỳ trong số các lớp này. Theo các phương án nhất định, một hoặc nhiều lớp bất kỳ này có thể được phủ bằng chất điện phân lỏng. Ngoài ra, lớp phân cách có thể được nằm giữa hai hoặc nhiều lớp bất kỳ khác trong số các lớp hoạt hóa theo một số

phương án và/hoặc giữa một lớp và lớp phủ (như giữa chất màu và lớp vật liệu mao quản trung bình) và/hoặc giữa hai lớp phủ (như giữa chất điện phân lỏng và chất màu) và/hoặc giữa thành phần lớp hoạt hóa và điện cực. Tham chiếu đến các lớp ở đây có thể bao gồm cách bố trí cuối cùng (ví dụ, về cơ bản là các phần riêng biệt của mỗi vật liệu xác định được theo cách riêng biệt trong thiết bị) và/hoặc tham chiếu đến lớp có thể có nghĩa là cách bố trí trong khi tạo thành thiết bị, bất kể khả năng trộn lẫn sau đó của (các) vật liệu ở mỗi lớp. Các lớp có thể theo một số phương án là riêng biệt và bao gồm vật liệu về cơ bản liền kề (ví dụ, các lớp có thể như được minh họa theo phong cách trên Fig.1). Theo các phương án khác, các lớp có thể về cơ bản được trộn lẫn (như trong trường hợp ví dụ BHJ, lai và một số pin DSSC), ví dụ về nó được thể hiện bởi vật liệu hoạt hóa thứ nhất 2618 và vật liệu hoạt hóa thứ hai 2620 bên trong lớp quang hoạt 2616 trên Fig.4. Theo một số phương án, thiết bị có thể bao gồm hỗn hợp của hai loại lớp này, như cũng được thể hiện bởi thiết bị trên Fig.4, chứa các lớp liền kề riêng biệt 2627, 2626 và 2622, ngoài lớp quang hoạt 2616 bao gồm các lớp được trộn lẫn của vật liệu hoạt hóa thứ nhất 2618 và vật liệu hoạt hóa thứ hai 2620. Trong trường hợp bất kỳ, hai hoặc nhiều hơn hai lớp bất kỳ của loại bất kỳ có thể theo các phương án nhất định được bố trí liền kề với nhau (và/hoặc được trộn lẫn với nhau) theo cách để đạt được diện tích bề mặt tiếp xúc cao. Theo các phương án nhất định, lớp bao gồm vật liệu perovskit có thể được bố trí liền kề với một hoặc nhiều lớp khác để đạt được diện tích bề mặt tiếp xúc cao (ví dụ, trong đó vật liệu perovskit thể hiện tính di động điện tích thấp). Theo các phương án khác, diện tích bề mặt tiếp xúc cao có thể không cần thiết (ví dụ, trong đó vật liệu perovskit thể hiện tính di động điện tích cao).

Thiết bị bằng vật liệu perovskit theo một số phương án tùy ý có thể bao gồm một hoặc nhiều nền. Theo một số phương án, một hoặc cả điện cực thứ nhất và thứ hai có thể được phủ hoặc theo cách khác được bố trí trên nền, sao cho điện cực được bố trí về cơ bản giữa nền và lớp hoạt hóa. Các vật liệu cấu thành của các thiết bị (ví dụ, nền, điện cực, lớp hoạt hóa và/hoặc thành phần của lớp hoạt hóa) có thể toàn bộ hoặc một phần cứng hoặc mềm dẻo theo các phương án khác nhau. Theo một số phương án, điện cực có thể đóng vai trò làm nền, bởi vậy phủ nhận nhu cầu

đối với nền riêng biệt.

Ngoài ra, thiết bị bằng vật liệu perovskit theo các phương án nhất định tùy ý có thể bao gồm vật liệu thu ánh sáng (ví dụ, trong lớp thu ánh sáng, như lớp thu ánh sáng 1601 được minh họa trong PV làm ví dụ trên Fig.2). Ngoài ra, thiết bị bằng vật liệu perovskit có thể bao gồm một hoặc nhiều chất phụ gia bất kỳ, như một hoặc nhiều chất phụ gia bất kỳ được thảo luận ở trên theo một số phương án của sáng chế.

Phần mô tả về một số vật liệu khác nhau có thể nằm trong thiết bị bằng vật liệu perovskit sẽ được thực hiện một phần với tham chiếu đến Fig.7. Fig.7 là hình vẽ dạng sơ đồ cách điệu thể hiện thiết bị bằng vật liệu perovskit 3900 theo một số phương án. Mặc dù các thành phần khác nhau của thiết bị 3900 được minh họa là các lớp riêng biệt bao gồm vật liệu liền kề, nhưng cần hiểu rằng Fig.7 là sơ đồ cách điệu; vì vậy, các phương án theo đó có thể bao gồm các lớp riêng biệt này và/hoặc về cơ bản được trộn lẫn, các lớp không liền kề, phù hợp với việc sử dụng “các lớp” đã được thảo luận trước đó. Thiết bị 3900 bao gồm các nền thứ nhất 3901 và nền thứ hai 3913. Điện cực thứ nhất 3902 được bố trí trên bề mặt bên trong của nền thứ nhất 3901 và điện cực thứ hai 3912 được bố trí ở bề mặt bên trong của nền thứ hai 3913. Lớp hoạt hóa 3950 được kẹp giữa hai điện cực 3902 và 3912. Lớp hoạt hóa 3950 bao gồm lớp vật liệu mao quản trung bình 3904; các vật liệu quang hoạt thứ nhất 3906 và vật liệu quang hoạt thứ hai 3908; lớp vận chuyển điện tích 3910 và một số lớp phân cách. Ngoài ra, Fig.7 minh họa thiết bị làm ví dụ 3900 theo các phương án trong đó các lớp phụ của lớp hoạt hóa 3950 được tách biệt bởi các lớp phân cách và ngoài ra, trong đó các lớp phân cách được bố trí trên mỗi điện cực 3902 và 3912. Cụ thể là, lớp phân cách thứ hai 3905, lớp phân cách thứ ba 3907 và lớp phân cách thứ tư 3909 lần lượt được bố trí giữa mỗi trong số lớp vật liệu mao quản trung bình 3904, vật liệu quang hoạt thứ nhất 3906, vật liệu quang hoạt thứ hai 3908 và lớp vận chuyển điện tích 3910. Các lớp phân cách thứ nhất 3903 và lớp phân cách thứ năm 3911 lần lượt được bố trí giữa (i) điện cực thứ nhất 3902 và lớp vật liệu mao quản trung bình 3904, (ii) lớp vận chuyển điện tích 3910 và điện cực thứ hai 3912. Vì vậy, kết cấu của thiết bị làm ví dụ được minh họa trên Fig.7 có thể khác biệt ở: nền—điện cực—lớp hoạt hóa—điện cực—nền. Kết cấu của lớp hoạt

hóa 3950 có thể khác biệt ở: lớp phân cách—lớp vật liệu mao quản trung bình—lớp phân cách—vật liệu quang hoạt—lớp phân cách—vật liệu quang hoạt—lớp phân cách—lớp vận chuyển điện tích—lớp phân cách. Như đã lưu ý trước đó, theo một số phương án, các lớp phân cách không cần có mặt; hoặc một hoặc nhiều lớp phân cách có thể được bao gồm chỉ giữa, nhưng không phải tất cả, các thành phần nhất định của lớp hoạt hóa và/hoặc các thành phần nhất định của thiết bị.

Nền, như một hoặc cả nền thứ nhất 3901 và nền thứ hai 3913, có thể là mềm dẻo hoặc cứng. Nếu bao gồm hai nền, thì ít nhất một nền cần phải trong suốt hoặc mờ đối với bức xạ điện từ (Electromagnetic, EM) (như, ví dụ bức xạ UV, nhìn thấy, hoặc IR). Nếu bao gồm một nền, thì tương tự nền này có thể là trong suốt hoặc mờ, mặc dù nó không cần như vậy, miễn là một phần của thiết bị cho phép bức xạ EM tiếp xúc lớp hoạt hóa 3950. Các vật liệu nền thích hợp bao gồm một hoặc nhiều bất kỳ trong số: thủy tinh; saphia; magieoxit (MgO); mica; các polyme (ví dụ, PET, PEG, polypropylen, polyetylen, v.v.); gốm; vải (ví dụ, bông, lụa, len); gỗ; tường khô; kim loại, các hỗn hợp của chúng.

Như đã lưu ý trước đó, điện cực (ví dụ, một trong số các điện cực 3902 và 3912 trên Fig.7) có thể là anôt hoặc catôt. Theo một số phương án, một điện cực có thể đóng vai trò làm catôt và điện cực còn lại có thể đóng vai trò làm anôt. Một hoặc cả hai điện cực 3902 và 3912 có thể được ghép nối với các đầu dẫn, các cáp, các dây, hoặc các phương tiện khác cho phép vận chuyển điện tích tới và/hoặc từ thiết bị 3900. Điện cực có thể tạo thành vật liệu dẫn bất kỳ và ít nhất một điện cực cần phải trong suốt hoặc mờ đối với bức xạ EM và/hoặc được bố trí theo cách mà cho phép bức xạ EM tiếp xúc ít nhất một phần của lớp hoạt hóa 3950. Các vật liệu điện cực thích hợp có thể bao gồm một hoặc nhiều bất kỳ trong số: indi thiếc oxit hoặc indi oxit pha tạp thiếc (ITO); thiếc oxit pha tạp flo (FTO); cadmioxit (CdO); kẽm indi thiếc oxit (ZITO); nhôm kẽm oxit (AZO); nhôm (Al), vàng (Au); canxi (Ca); magie (Mg); titan (Ti); thép; cacbon (và các thù hình của chúng), các hỗn hợp của chúng.

Vật liệu mao quản trung bình (ví dụ, vật liệu nằm trong lớp vật liệu mao quản trung bình 3904 trên Fig.7) có thể bao gồm vật liệu chứa lỗ rỗng bất kỳ. Theo

một số phương án, các lỗ rỗng có thể có các đường kính nằm trong khoảng từ 1 đến 100 nm; theo các phương án khác, đường kính lỗ rỗng có thể nằm trong khoảng từ 2 đến 50 nm. Vật liệu mao quản trung bình thích hợp bao gồm một hoặc nhiều bất kỳ trong số: vật liệu phân cách và/hoặc vật liệu mao quản trung bình bất kỳ được thảo luận trong bản mô tả này; nhôm (Al); bitmut (Bi); indi (In); molybden (Mo); niobi (Nb); niken (Ni); silic (Si); titan (Ti); vanadi (V); kẽm (Zn); zirconi (Zr); oxit của một hoặc nhiều kim loại bất kỳ trong số các kim loại nêu trên (ví dụ, nhôm oxit, xeri oxit, titan oxit, kẽm oxit, ziricon oxit, v.v.); sulfua của một hoặc nhiều kim loại bất kỳ trong số các kim loại nêu trên; nitrua của một hoặc nhiều kim loại bất kỳ trong số các kim loại nêu trên, và các hỗn hợp của chúng.

Vật liệu quang hoạt (ví dụ, vật liệu quang hoạt thứ nhất 3906 hoặc vật liệu quang hoạt thứ hai 3908 trên Fig.7) có thể bao gồm hợp chất quang hoạt bất kỳ, như một hoặc nhiều bất kỳ trong số silic (trong một số trường hợp, silic đơn tinh thể), cadmitelurit, cadmisulfua, cadmiselenua, đồng indi galiselenua, galiarsenua, germani indi phosphua, một hoặc nhiều polyme bán dẫn và các hỗn hợp của chúng. Theo các phương án nhất định, vật liệu quang hoạt có thể thay vì hoặc ngoài ra bao gồm chất màu (ví dụ, N719, N3, các chất màu gốc ruteni khác). Theo một số phương án, chất màu (của chế phẩm bất kỳ) có thể được phủ trên lớp khác (ví dụ, lớp vật liệu mao quản trung bình và/hoặc lớp phân cách). Theo một số phương án, vật liệu quang hoạt có thể bao gồm một hoặc nhiều vật liệu perovskit. Nền quang hoạt chứa vật liệu perovskit có thể có dạng rắn, hoặc theo một số phương án, nền này có thể có dạng chất màu bao gồm huyền phù hoặc dung dịch bao gồm vật liệu perovskit. Dung dịch hoặc huyền phù này có thể được phủ trên các thành phần thiết bị khác theo cách tương tự với các chất màu khác. Theo một số phương án, vật liệu chứa perovskit rắn có thể được lắng đọng nhờ phương tiện thích hợp bất kỳ (ví dụ, lắng đọng hơi, lắng đọng dung dịch, thay thế trực tiếp vật liệu rắn, v.v.). Các thiết bị theo các phương án khác nhau có thể bao gồm một, hai, ba, hoặc nhiều hơn ba hợp chất quang hoạt (ví dụ, một, hai, ba, hoặc nhiều hơn ba vật liệu perovskit, chất màu, hoặc các hỗn hợp của chúng). Theo các phương án nhất định bao gồm nhiều chất màu hoặc các vật liệu quang hoạt khác, mỗi trong số hai hoặc nhiều hơn hai chất màu hoặc các vật liệu quang hoạt khác có thể được tách biệt bởi một hoặc

nhiều lớp phân cách. Theo một số phương án, nhiều chất màu và/hoặc các hợp chất quang hoạt có thể ít nhất một phần được trộn lẫn.

Vật liệu vận chuyển điện tích (ví dụ, vật liệu vận chuyển điện tích của lớp vận chuyển điện tích 3910 trên Fig.7) có thể bao gồm vật liệu vận chuyển điện tích trạng thái rắn (ví dụ, chất điện phân trạng thái rắn được gắn nhãn thông thường), hoặc vật liệu này có thể bao gồm chất điện phân lỏng và/hoặc chất lỏng ion. Một bất kỳ trong số chất điện phân lỏng, chất lỏng ion và vật liệu vận chuyển điện tích trạng thái rắn có thể được gọi là vật liệu vận chuyển điện tích. Khi được sử dụng ở đây, “vật liệu vận chuyển điện tích” đề cập đến vật liệu bất kỳ, thể rắn, thể lỏng, hoặc thể khác, có thể thu thập các chất mang điện tích và/hoặc vận chuyển các chất mang điện tích. Chẳng hạn, trong các thiết bị PV theo một số phương án, vật liệu vận chuyển điện tích có thể vận chuyển các chất mang điện tích tới điện cực. Các chất mang điện tích có thể bao gồm các lỗ trống (sự vận chuyển lỗ trống sẽ khiến cho vật liệu vận chuyển điện tích được gắn nhãn chính xác là “vật liệu vận chuyển lỗ trống”) và các điện tử. Các trống có thể được vận chuyển về phía anốt và các điện tử về phía catốt, phụ thuộc vào vị trí của vật liệu vận chuyển điện tích liên quan đến catốt hoặc anốt trong PV hoặc thiết bị khác. Các ví dụ thích hợp về vật liệu vận chuyển điện tích theo một số phương án có thể bao gồm một hoặc nhiều bất kỳ trong số: vật liệu perovskit; I/I_3^- ; các phức chất Co; các polythiophen (ví dụ, poly(3-hexylthiophen) và các dẫn xuất của chúng, hoặc P3HT); các chất đồng trùng hợp gốc carbazol như polyheptadecanylcarbazol dithienylbenzothiadiazol và các dẫn xuất của chúng (ví dụ, PCDTBT); các chất đồng trùng hợp khác như polyxyclopentadithiophen—benzothiadiazol và các dẫn xuất của chúng (ví dụ, PCPDTBT), polybenzodithiophenyl-thienothiophenediyl và các dẫn xuất của chúng (ví dụ, PTB6, PTB7, PTB7-th, PCE-10); các hợp chất poly (triaryl amin) và các dẫn xuất của chúng (ví dụ, PTAA); Spiro-OMeTAD; các polyphenylen vinylen và các dẫn xuất của chúng (ví dụ, MDMO-PPV, MEH-PPV); các fuloren và/hoặc các chất dẫn xuất của fuloren (ví dụ, C60, PCBM), các hỗn hợp của chúng. Theo các phương án nhất định, vật liệu vận chuyển điện tích có thể bao gồm vật liệu bất kỳ, thể rắn hoặc lỏng, có thể thu gom các chất mang điện tích (các điện tử hoặc các lỗ trống) và/hoặc có thể vận chuyển các chất mang điện tích. Vật liệu vận chuyển điện

tích theo một số phương án do đó có thể là vật liệu hoạt hóa và/hoặc bán dẫn loại n hoặc p . Vật liệu vận chuyển điện tích có thể được bố trí gần với một trong số các điện cực của thiết bị. Vật liệu này có thể theo một số phương án được bố trí liền kề với điện cực, mặc dù theo các phương án khác lớp phân cách có thể được bố trí giữa vật liệu vận chuyển điện tích và điện cực (như được thể hiện, ví dụ trên Fig.7 có lớp phân cách thứ năm 3911). Theo các phương án nhất định, loại vật liệu vận chuyển điện tích có thể được chọn dựa trên điện cực mà nó ở gần. Ví dụ, nếu vật liệu vận chuyển điện tích thu gom và/hoặc vận chuyển lỗ trống, thì vật liệu này có thể gần với anốt để vận chuyển lỗ trống tới anốt. Tuy nhiên, vật liệu vận chuyển điện tích có thể thay vì được đặt gần với catốt và được chọn hoặc được tạo ra để vận chuyển các điện tử tới catốt.

Như đã lưu ý trước đó, các thiết bị theo các phương án khác nhau tùy ý có thể bao gồm lớp phân cách giữa hai lớp và/hoặc vật liệu khác bất kỳ, mặc dù các thiết bị theo một số phương án không cần chứa các lớp phân cách bất kỳ. Vì vậy, ví dụ, thiết bị bằng vật liệu perovskit có thể chứa 0, một, hai, ba, bốn, năm hoặc nhiều hơn năm lớp phân cách (như thiết bị làm ví dụ trên Fig.7, có năm lớp phân cách 3903, 3905, 3907, 3909 và 3911). Lớp phân cách có thể bao gồm lớp phân cách phủ mỏng theo các phương án đã được thảo luận trước đó trong bản mô tả này (ví dụ, bao gồm nhôm oxit và/hoặc các hạt kim loại oxit khác và/hoặc hai lớp titan oxit/kim loại oxit và/hoặc các hợp chất khác theo các lớp phân cách phủ mỏng như cũng đã thảo luận trong phần khác của bản mô tả). Lớp phân cách theo một số phương án có thể bao gồm vật liệu thích hợp bất kỳ để tăng cường vận chuyển và/hoặc thu gom điện tích giữa hai lớp hoặc vật liệu; vật liệu này có thể cũng giúp ngăn chặn hoặc giảm khả năng tái kết hợp điện tích khi điện tích đã được vận chuyển khỏi một trong số các vật liệu liền kề với lớp phân cách. Các vật liệu phân cách thích hợp có thể bao gồm một hoặc nhiều bất kỳ trong số: vật liệu mao quản trung bình và/hoặc vật liệu phân cách bất kỳ được thảo luận trong bản mô tả này; Al; Bi; Co; Cu; Fe; In; Mn; Mo; Ni; bạch kim (Pt); Si; Sn; Ta; Ti; V; W; Nb; Zn; Zr; các oxit của kim loại bất kỳ trong số các kim loại nêu trên (ví dụ, nhôm oxit, silic oxit, titan oxit); sulfua của kim loại bất kỳ trong số các kim loại nêu trên; nitrua của kim loại bất kỳ trong số các kim loại nêu trên; các nhóm alkyl silyl chức

năng hóa hoặc không chức năng hóa; graphit; graphen; các fuloren; các ống nano cacbon, các hỗn hợp của chúng (theo một số phương án bao gồm hai lớp vật liệu kết hợp). Theo một số phương án, lớp phân cách có thể bao gồm vật liệu perovskit.

Thiết bị theo sự biểu diễn cách điệu trên Fig.7 theo một số phương án có thể là PV, như DSSC, BHJ, hoặc pin mặt trời lai. Theo một số phương án, các thiết bị trên Fig.7 có thể tạo thành nhiều pin PV mắc song song hoặc nối tiếp, ắc quy, ắc quy PV lai, các FET, các LED và/hoặc thiết bị khác bất kỳ được thảo luận ở đây. Ví dụ, BHJ theo một số phương án có thể bao gồm hai điện cực tương ứng với các điện cực 3902 và 3912 và lớp hoạt hóa bao gồm ít nhất hai các vật liệu trong bề mặt chuyển tiếp dị thể (ví dụ, hai bất kỳ trong số các vật liệu và/hoặc các lớp của lớp hoạt hóa 3950). Theo các phương án nhất định, các thiết bị khác (như ắc quy PV lai, nhiều pin PV mắc song song hoặc nối tiếp, v.v.) có thể bao gồm lớp hoạt hóa bao gồm vật liệu perovskit, tương ứng với lớp hoạt hóa 3950 trên Fig.7. Tóm lại, bản chất cách điệu phần mô tả của thiết bị làm ví dụ trên Fig.7 không được giới hạn ở cấu trúc hoặc kết cấu cho phép của các thiết bị theo các phương án khác nhau trên Fig.7.

Ngoài ra, cụ thể hơn là, các phương án làm ví dụ về các thiết bị perovskit sẽ được thảo luận về các phần mô tả cách điệu hơn của các thiết bị làm ví dụ. Bản chất cách điệu của các phần mô tả này, các hình vẽ từ Fig.8 đến Fig.18, tương tự không nhằm giới hạn loại thiết bị theo một số phương án có thể được tạo kết cấu theo một hoặc nhiều bất kỳ trong số các hình vẽ từ Fig.8 đến Fig.18. Tức là, các kết cấu được thể hiện trên các hình vẽ từ Fig.8 đến Fig.18 có thể được sử dụng để tạo ra các BHJ, ắc quy, các FET, ắc quy PV lai, nhiều pin PV nối tiếp, nhiều pin PV song song và các thiết bị tương tự khác theo các phương án khác của sáng chế, theo phương tiện thích hợp bất kỳ (bao gồm cả hai thiết bị được thảo luận trong phần khác của bản mô tả và các phương tiện thích hợp khác, sẽ rõ ràng đối với người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực với hiệu quả của sáng chế).

Fig.8 minh họa thiết bị làm ví dụ 4100 theo các phương án khác nhau. Thiết bị 4100 minh họa các phương án bao gồm các nền thủy tinh thứ nhất 4101 và nền thủy tinh thứ hai 4109. Mỗi nền thủy tinh có điện cực FTO được bố trí trên bề mặt

trong của nó (lần lượt là điện cực thứ nhất 4102 và điện cực thứ hai 4108) và mỗi điện cực có lớp phân cách được lắng đọng trên bề mặt bên trong của nó: lớp phân cách TiO_2 thứ nhất 4103 được lắng đọng trên điện cực thứ nhất 4102 và lớp phân cách Pt thứ hai 4107 được lắng đọng trên điện cực thứ hai 4108. Được kẹp giữa hai các lớp phân cách là: lớp vật liệu mao quản trung bình 4104 (bao gồm TiO_2); vật liệu quang hoạt 4105 (bao gồm vật liệu perovskit MAPbI_3), lớp vận chuyển điện tích 4106 (ở đây bao gồm CsSnI_3).

Fig.9 minh họa thiết bị làm ví dụ 4300 lược bỏ lớp vật liệu mao quản trung bình. Thiết bị 4300 bao gồm hợp chất vật liệu perovskit quang hoạt 4304 (bao gồm MAPbI_3) được kẹp giữa các lớp phân cách thứ nhất 4303 và lớp phân cách thứ hai 4305 (lần lượt bao gồm titan oxit và nhôm oxit). Lớp phân cách titan oxit 4303 được phủ trên điện cực FTO thứ nhất 4302, mà đến lượt được bố trí trên bề mặt bên trong của nền thủy tinh 4301. Lớp vận chuyển điện tích spiro-OMeTAD 4306 được phủ trên lớp phân cách nhôm oxit 4305 và được bố trí trên bề mặt bên trong của điện cực vàng thứ hai 4307.

Như rõ ràng với người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực với hiệu quả của sáng chế, các phương án khác nhau là khả dụng, như thiết bị có nhiều lớp quang hoạt (như được minh họa bằng các lớp quang hoạt 3906 và 3908 của thiết bị làm ví dụ trên Fig.7). Theo một số phương án, như được thảo luận ở trên, mỗi lớp quang hoạt có thể được tách biệt bởi lớp phân cách (như được thể hiện bởi lớp phân cách thứ ba 3907 trên Fig.7). Ngoài ra, lớp vật liệu mao quản trung bình có thể được bố trí trên điện cực như được minh họa trên Fig.7 bằng lớp vật liệu mao quản trung bình 3904 được bố trí trên điện cực thứ nhất 3902. Mặc dù Fig.7 minh họa lớp phân cách xen kẽ 3903 được bố trí giữa hai, theo một số phương án, lớp vật liệu mao quản trung bình có thể được bố trí trực tiếp trên điện cực.

Các ví dụ về thiết bị bằng vật liệu perovskit bổ sung

Các kết cấu của thiết bị bằng vật liệu perovskit làm ví dụ khác sẽ rõ ràng đối với người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực với hiệu quả của sáng chế. Các ví dụ bao gồm, nhưng không bị giới hạn ở, các thiết bị chứa các lớp hoạt hóa có kết cấu bất kỳ trong số các kết cấu sau: (1) chất điện phân lỏng—vật liệu perovskit—

lớp vật liệu mao quản trung bình; (2) vật liệu perovskit—chất màu—lớp vật liệu mao quản trung bình; (3) vật liệu perovskit thứ nhất—vật liệu perovskit thứ hai—lớp vật liệu mao quản trung bình; (4) vật liệu perovskit thứ nhất—vật liệu perovskit thứ hai; (5) vật liệu perovskit thứ nhất—chất màu—vật liệu perovskit thứ hai; (6) vật liệu vận chuyển điện tích trạng thái rắn—vật liệu perovskit; (7) vật liệu vận chuyển điện tích trạng thái rắn—chất màu—vật liệu perovskit—lớp vật liệu mao quản trung bình; (8) vật liệu vận chuyển điện tích trạng thái rắn—vật liệu perovskit—chất màu—lớp vật liệu mao quản trung bình; (9) vật liệu vận chuyển điện tích trạng thái rắn—chất màu—vật liệu perovskit—lớp vật liệu mao quản trung bình, (10) vật liệu vận chuyển điện tích trạng thái rắn—vật liệu perovskit—chất màu—lớp vật liệu mao quản trung bình. Các thành phần riêng biệt của mỗi kết cấu làm ví dụ (ví dụ, lớp vật liệu mao quản trung bình, vật liệu vận chuyển điện tích, v.v.) có thể theo phần thảo luận ở trên đối với mỗi thành phần. Ngoài ra, mỗi kết cấu làm ví dụ được thảo luận chi tiết dưới đây.

Là ví dụ cụ thể về một số trong số các lớp hoạt hóa nêu trên, theo một số phương án, lớp hoạt hóa có thể bao gồm chất điện phân lỏng, vật liệu perovskit và lớp vật liệu mao quản trung bình. Lớp hoạt hóa theo phương án nhất định trong số các phương án này về cơ bản có thể có cấu trúc: chất điện phân lỏng—vật liệu perovskit—lớp vật liệu mao quản trung bình. Chất điện phân lỏng bất kỳ có thể là thích hợp, lớp vật liệu mao quản trung bình bất kỳ (ví dụ, TiO_2) có thể là thích hợp. Theo một số phương án, vật liệu perovskit có thể được lắng đọng trên lớp vật liệu mao quản trung bình và trên đó được phủ bằng chất điện phân lỏng. Vật liệu perovskit theo một số phương án này có thể đóng vai trò ít nhất một phần làm chất màu (vì vậy, vật liệu này có thể là quang hoạt).

Theo các phương án làm ví dụ khác, lớp hoạt hóa có thể bao gồm vật liệu perovskit, chất màu và lớp vật liệu mao quản trung bình. Lớp hoạt hóa theo phương án nhất định trong số các phương án này về cơ bản có thể có kết cấu: vật liệu perovskit—chất màu—lớp vật liệu mao quản trung bình. Chất màu có thể được phủ trên lớp vật liệu mao quản trung bình và vật liệu perovskit có thể được bố trí trên lớp vật liệu mao quản trung bình phủ chất màu. Vật liệu perovskit có thể có đóng vai trò làm vật liệu vận chuyển lỗ trống theo phương án nhất định trong số các

phương án này.

Theo các phương án ví dụ khác nữa, lớp hoạt hóa có thể bao gồm vật liệu perovskit thứ nhất, vật liệu perovskit thứ hai và lớp vật liệu mao quản trung bình. Lớp hoạt hóa theo phương án nhất định trong số các phương án này về cơ bản có thể có kết cấu: vật liệu perovskit thứ nhất—vật liệu perovskit thứ hai—lớp vật liệu mao quản trung bình. Mỗi trong số vật liệu perovskit thứ nhất và thứ hai có thể bao gồm cùng (các) vật liệu perovskit hoặc các vật liệu này có thể bao gồm các vật liệu perovskit khác nhau. Một trong số các vật liệu perovskit thứ nhất và thứ hai có thể là quang hoạt (ví dụ, vật liệu perovskit thứ nhất và/hoặc thứ hai theo các phương án này có thể có đóng vai trò ít nhất một phần làm chất màu).

Theo các phương án ví dụ nhất định, lớp hoạt hóa có thể bao gồm vật liệu perovskit thứ nhất và vật liệu perovskit thứ hai. Lớp hoạt hóa theo phương án nhất định trong số các phương án này về cơ bản có thể có kết cấu: vật liệu perovskit thứ nhất—vật liệu perovskit thứ hai. Mỗi trong số vật liệu perovskit thứ nhất và thứ hai có thể bao gồm cùng (các) vật liệu perovskit hoặc các vật liệu này có thể bao gồm các vật liệu perovskit khác nhau. Một trong số các vật liệu perovskit thứ nhất và thứ hai có thể là quang hoạt (ví dụ, vật liệu perovskit thứ nhất và/hoặc thứ hai theo các phương án này có thể có đóng vai trò ít nhất một phần làm chất màu). Ngoài ra, một trong số các vật liệu perovskit thứ nhất và thứ hai có thể đóng vai trò làm vật liệu vận chuyển lỗ trống. Theo một số phương án, một trong số các vật liệu perovskit thứ nhất và thứ hai đóng vai trò làm vật liệu truyền dẫn điện tử và các vật liệu perovskit thứ nhất và thứ hai khác đóng vai trò làm chất màu. Theo một số phương án, các vật liệu perovskit thứ nhất và thứ hai có thể được bố trí trong lớp hoạt hóa theo cách thu được diện tích phân lớp cao giữa vật liệu perovskit thứ nhất và vật liệu perovskit thứ hai, như cách bố trí được thể hiện lần lượt đối với vật liệu hoạt hóa thứ nhất 2810 và vật liệu hoạt hóa thứ hai 2815 trên Fig.5 (hoặc như được thể hiện tương tự bởi lần lượt vật liệu loại p - 2618 và n -2620 trên Fig.4).

Theo các phương án ví dụ nữa, lớp hoạt hóa có thể bao gồm vật liệu perovskit thứ nhất, chất màu và vật liệu perovskit thứ hai. Lớp hoạt hóa theo phương án nhất định trong số các phương án này về cơ bản có thể có kết cấu: vật

liệu perovskit thứ nhất—chất màu—vật liệu perovskit thứ hai. Một trong số các vật liệu perovskit thứ nhất và thứ hai có thể đóng vai trò làm vật liệu vận chuyển điện tích và các vật liệu perovskit thứ nhất và thứ hai khác có thể đóng vai trò làm chất màu. Theo một số phương án, cả hai vật liệu perovskit thứ nhất và thứ hai ít nhất một phần có thể thực hiện chức năng chống lún, tương tự và/hoặc các chức năng giống nhau (ví dụ, cả hai có thể đóng vai trò làm chất màu và/hoặc cả hai có thể đóng vai trò làm vật liệu vận chuyển lỗ trống).

Theo một số phương án ví dụ khác, lớp hoạt hóa có thể bao gồm vật liệu vận chuyển điện tích trạng thái rắn và vật liệu perovskit. Lớp hoạt hóa theo phương án nhất định trong số các phương án này về cơ bản có thể có kết cấu: vật liệu vận chuyển điện tích trạng thái rắn—vật liệu perovskit. Ví dụ, vật liệu perovskit và vật liệu vận chuyển điện tích trạng thái rắn có thể được bố trí bên trong lớp hoạt hóa theo cách thu được điện tích phân lớp cao, như cách bố trí được thể hiện lần lượt đối với vật liệu hoạt hóa thứ nhất 2810 và vật liệu hoạt hóa thứ hai 2815 trên Fig.5 (hoặc như được thể hiện tương tự lần lượt bởi vật liệu loại p 2618 và n 2620 trên Fig.4).

Theo các phương án ví dụ khác, lớp hoạt hóa có thể bao gồm vật liệu vận chuyển điện tích trạng thái rắn, chất màu, vật liệu perovskit và lớp vật liệu mao quản trung bình. Lớp hoạt hóa theo phương án nhất định trong số các phương án này về cơ bản có thể có kết cấu: vật liệu vận chuyển điện tích trạng thái rắn—chất màu—vật liệu perovskit—lớp vật liệu mao quản trung bình. Lớp hoạt hóa theo phương án nhất định khác trong số các phương án này về cơ bản có thể có kết cấu: vật liệu vận chuyển điện tích trạng thái rắn—vật liệu perovskit—chất màu—lớp vật liệu mao quản trung bình. Vật liệu perovskit theo một số phương án có thể đóng vai trò làm chất màu thứ hai. Vật liệu perovskit theo các phương án này có thể tăng độ rộng của phổ ánh sáng nhìn thấy được hấp thụ bởi thiết bị PV hoặc thiết bị khác bao gồm lớp hoạt hóa theo các phương án này. Theo các phương án nhất định, vật liệu perovskit có thể cũng hoặc thay vì đóng vai trò làm lớp phân cách giữa chất màu và lớp vật liệu mao quản trung bình và/hoặc giữa chất màu và vật liệu vận chuyển điện tích.

Theo một số phương án ví dụ, lớp hoạt hóa có thể bao gồm chất điện phân lỏng, chất màu, vật liệu perovskit và lớp vật liệu mao quản trung bình. Lớp hoạt hóa theo phương án nhất định trong số các phương án này về cơ bản có thể có kết cấu: vật liệu vận chuyển điện tích trạng thái rắn—chất màu—vật liệu perovskit—lớp vật liệu mao quản trung bình. Lớp hoạt hóa theo phương án nhất định khác trong số các phương án này về cơ bản có thể có kết cấu: vật liệu vận chuyển điện tích trạng thái rắn—vật liệu perovskit—chất màu—lớp vật liệu mao quản trung bình. Vật liệu perovskit có thể đóng vai trò làm vật liệu quang hoạt, lớp phân cách và/hoặc tổ hợp của chúng.

Một số phương án đề xuất các thiết bị BHJ PV bao gồm các vật liệu perovskit. Ví dụ, BHJ theo một số phương án có thể bao gồm lớp quang hoạt (ví dụ, lớp quang hoạt 2404 trên Fig.3), có thể bao gồm một hoặc nhiều vật liệu perovskit. Lớp quang hoạt của BHJ này có thể cũng hoặc thay vì bao gồm một hoặc nhiều thành phần bất kỳ trong số các thành phần làm ví dụ được liệt kê ở trên liên quan đến các lớp hoạt hóa DSSC. Ngoài ra, theo một số phương án, lớp quang hoạt BHJ có thể có kết cấu theo phương án bất kỳ trong số các phương án làm ví dụ của các lớp hoạt hóa DSSC được thảo luận ở trên.

Theo một số phương án, lớp hoạt hóa bất kỳ trong số các lớp hoạt hóa bao gồm các vật liệu perovskit được kết hợp vào các thiết bị PV hoặc các thiết bị khác như được thảo luận ở đây có thể còn bao gồm vật liệu bất kỳ trong số các vật liệu phụ gia khác nhau cũng được thảo luận ở đây thích hợp để đưa vào lớp hoạt hóa. Ví dụ, lớp hoạt hóa bất kỳ bao gồm vật liệu perovskit có thể còn bao gồm lớp phân cách theo các phương án khác nhau được thảo luận ở đây (như, ví dụ lớp phân cách phủ mỏng). Bằng cách lấy ví dụ khác, lớp hoạt hóa bao gồm vật liệu perovskit có thể còn bao gồm lớp thu ánh sáng, như lớp thu ánh sáng 1601 được minh họa trong PV làm ví dụ được thể hiện trên Fig.2.

Chế tạo lớp hoạt hóa vật liệu perovskit

Như được thảo luận trên đây, theo một số phương án, vật liệu perovskit trong lớp hoạt hóa có thể có công thức $CMX_{3-y}X'_y$ ($0 \leq y \leq 3$), trong đó: C bao gồm một hoặc nhiều cation (ví dụ, amin, amoni, kim loại nhóm 1, kim loại nhóm 2,

formamidi, guanidi, eten tetramin và/hoặc các cation khác hoặc các hợp chất giống cation); M bao gồm một hoặc nhiều kim loại (ví dụ, Fe, Cd, Co, Ni, Cu, Hg, Sn, Pb, Bi, Ge, Ti, Zn và Zr), X và X' bao gồm một hoặc nhiều anion. Theo một phương án, vật liệu perovskit có thể bao gồm $\text{CPbI}_{3-y}\text{Cl}_y$. Theo các phương án ưu tiên nhất định, vật liệu perovskit có thể được lắng đọng ở dạng lớp hoạt hóa trong thiết bị PV, ví dụ, bằng cách đúc nhỏ giọt, đúc quay, in khe khuôn đúc, in lưới, hoặc in phun mực trên nền sử dụng các bước được mô tả bên dưới.

Trước tiên, mực tiền chất chì halogenua được tạo ra. Lượng chì halogenua có thể được đựng trong một lọ nhỏ sạch, khô bên trong hộp đựng (ví dụ, hộp có khí quyển được kiểm soát có các rãnh chữ V cho phép thao tác các vật liệu trong môi trường không có không khí). Các chì halogenua thích hợp bao gồm, nhưng không bị giới hạn ở, chì (II) iodua, chì (II) bromua, chì (II) clorua và chì (II) florua. Chì halogenua có thể bao gồm các loại chì halogenua riêng hoặc chì halogenua có thể bao gồm hỗn hợp chì halogenua theo tỷ lệ chính xác. Theo các phương án nhất định, hỗn hợp chì halogenua có thể bao gồm tỷ lệ bậc hai, bậc ba hoặc bậc bốn bất kỳ trong số 0,001-100%mol của iodua, bromua, clorua, hoặc florua. Theo một phương án, hỗn hợp chì halogenua có thể bao gồm chì (II) clorua và chì (II) iodua theo tỷ lệ khoảng 10:90 mol:mol. Theo các phương án khác, hỗn hợp chì halogenua có thể bao gồm chì (II) clorua và chì (II) iodua theo tỷ lệ là khoảng 5:95, khoảng 7,5:92,5, hoặc khoảng 15:85 mol:mol.

Theo cách khác, các tiền chất của muối chì khác có thể được sử dụng kết hợp với hoặc thay cho các muối chì halogenua để tạo ra mực tiền chất. Các muối tiền chất thích hợp có thể bao gồm hỗn hợp bất kỳ của chì (II) hoặc chì (IV) và các anion sau: nitrat, nitrit, carboxylat, axetat, format, oxylat, sulfat, sulfua, thiosulfat, phosphat, tetrafloroborat, hexaflorophosphat, tetra(perflorophenyl) borat, hydrua, oxit, peroxit, hydroxit, nitrua, arsenat, arsenua, perclorat, cacbonat, bicarbonat, cromat, dicromat, iodat, bromat, clorat, clorit, hypoclorit, hypobromit, xyanua, xyanat, isoxyanat, fulminat, thioxyanat, isothioxyanat, azit, tetracarbonylcobaltat, carbamoyldixyanometanit, dixyanonitrosometanit, dixyan-amit, trixyanometanit, amit và permanganat.

Mực tiền chất có thể còn bao gồm muối chì (II) hoặc chì (IV) theo các tỷ lệ mol từ 0 đến 100% với các ion kim loại sau đây Fe, Cd, Co, Ni, Cu, Hg, Sn, Pb, Bi, Ge, Ti, Zn và Zr là muối của các anion nêu trên.

Sau đó, dung môi có thể được bổ sung vào lọ nhỏ để hòa tan chất rắn chì để tạo ra mực tiền chất chì halogenua. Các dung môi thích hợp bao gồm, nhưng không bị giới hạn ở, N-xyclohexyl-2-pyrrolidon khô, alkyl-2-pyrrolidon, dimetylformamit, dialkylformamit, dimetylsulfoxit (DMSO), metanol, etanol, propanol, butanol, tetrahydrofuran, formamit, tert-butylpyridin, pyridin, alkylpyridin, pyrrolidin, clobenzen, diclobenzen, diclometan, cloroform và các hỗn hợp của chúng. Theo một phương án, các chất rắn chì được hòa tan trong dimetylformamit (DMF) khô. Các chất rắn chì có thể được hòa tan ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 20°C đến 150°C. Theo một phương án, các chất rắn chì được hòa tan ở nhiệt độ khoảng 85°C. Các chất rắn chì có thể được hòa tan trong khoảng thời gian cần thiết để tạo ra dung dịch, quá trình hòa tan có thể xảy ra trong khoảng thời gian lên đến 72 giờ. Dung dịch thu được tạo ra chất nền của mực tiền chất chì halogenua. Theo một số phương án, mực tiền chất chì halogenua có thể có nồng độ chì halogenua nằm trong khoảng từ 0,001M đến 10M. Theo một phương án, mực tiền chất chì halogenua có nồng độ chì halogenua là khoảng 1 M.

Một cách tùy ý, các chất phụ gia nhất định có thể được bổ sung vào mực tiền chất chì halogenua để ảnh hưởng đến độ kết tinh và độ ổn định của perovskit cuối cùng. Theo một số phương án, mực tiền chất chì halogenua có thể còn bao gồm axit amin (ví dụ, axit 5-aminovaleric, histidin, glyxin, lyxin), hydrohalogenua của axit amin (ví dụ, hydroclorua của axit 5-amino valeric), chất cải biến bề mặt (Surface-Modifying, SAM) IFL (như các chất được thảo luận ở phần trước đó trong bản mô tả này), hoặc hỗn hợp của chúng. Theo một phương án, formamidiclorua có thể được bổ sung vào mực tiền chất chì halogenua. Theo các phương án khác, halogenua của cation bất kỳ được thảo luận ở phần trước đó trong bản mô tả này có thể được sử dụng. Theo một số phương án, hỗn hợp của các chất phụ gia có thể được bổ sung vào mực tiền chất chì halogenua bao gồm, ví dụ, hỗn hợp của formamidiclorua và hydroclorua của axit 5-amino valeric.

Bằng cách giải thích và không giới hạn sáng chế ở lý thuyết hoặc cơ chế cụ thể bất kỳ, đã phát hiện ra rằng formamidi và axit 5-amino valeric cải thiện độ ổn định của thiết bị perovskit PV khi các chất này được sử dụng làm các chất phụ gia hoặc các cation trái dấu trong quá trình chế tạo thiết bị perovskit một công đoạn. Cũng phát hiện ra rằng clorua, ở dạng PbCl_2 , cải thiện hiệu suất của thiết bị perovskit PV khi được bổ sung vào dung dịch tiền chất PbI_2 trong phương pháp hai công đoạn. Đã phát hiện ra rằng quy trình lắng đọng màng mỏng perovskit hai bước có thể được cải thiện bằng cách bổ sung formamidiclorua và/hoặc hydroclorua của axit 5-amino valeric trực tiếp vào dung dịch tiền chất chì halogenua (ví dụ, PbI_2) để tận dụng cả hai ưu điểm của vật liệu đơn. Quy trình lắng đọng màng perovskite khác tương tự có thể được cải thiện bằng cách bổ sung formamidiclorua, hydroclorua của axit 5-amino valeric, hoặc PbCl_2 và dung dịch tiền chất chì halogenua.

Các chất phụ gia, bao gồm formamidiclorua và/hoặc hydroclorua của axit 5-amino valeric có thể được bổ sung vào mực tiền chất chì halogenua ở các nồng độ khác nhau phụ thuộc vào các đặc tính mong muốn của vật liệu perovskite thu được. Theo một phương án, các chất phụ gia có thể được bổ sung với hàm lượng nằm trong khoảng từ 1 nM đến n M. Theo một phương án khác, các chất phụ gia có thể được bổ sung với hàm lượng nằm trong khoảng từ n μM đến 1 M. Theo phương án khác, các chất phụ gia có thể được bổ sung với hàm lượng nằm trong khoảng từ 1 μM đến 1 mM.

Một cách tùy ý, theo các phương án nhất định, nước có thể được bổ sung vào mực tiền chất chì halogenua. Bằng cách giải thích và không giới hạn sáng chế ở lý thuyết hoặc cơ chế cụ thể bất kỳ, sự có mặt của nước ảnh hưởng đến sự phát triển tinh thể của màng mỏng perovskit. Dưới các điều kiện bình thường, nước có thể được hấp thụ ở dạng hơi từ không khí. Tuy nhiên, có thể kiểm soát độ kết tinh của perovskit PV nhờ việc bổ sung trực tiếp nước vào mực tiền chất chì halogenua theo nồng độ cụ thể. Nước thích hợp bao gồm nước cất, được khử ion, hoặc nguồn nước khác bất kỳ về cơ bản không có chất gây ô nhiễm (bao gồm các khoáng chất). Đã phát hiện ra, dựa vào việc quét ánh sáng I-V, rằng hiệu quả chuyển hóa ánh sáng thành năng lượng của perovskit PV có thể gần gấp ba khi bổ sung nước so với thiết

bị khô hoàn toàn.

Nước có thể được bổ sung vào mực tiền chất chì halogenua theo các hàm lượng khác nhau phụ thuộc vào các đặc tính mong muốn của vật liệu perovskite thu được. Theo một phương án, nước có thể được bổ sung với hàm lượng nằm trong khoảng từ 1 nL/mL đến 1 mL/mL. Theo một phương án khác, nước có thể được bổ sung với hàm lượng nằm trong khoảng từ 1 μ L/mL đến 0,1 mL/mL. Theo một phương án khác, nước có thể được bổ sung với hàm lượng nằm trong khoảng từ 1 μ L/mL đến 20 μ L/mL.

Fig.12 là các ảnh chụp từ kính hiển vi điện tử quét cắt ngang so sánh PV perovskit được chế tạo có nước (5110) và không có nước (5120). Như có thể thấy trên Fig.12, có sự thay đổi cấu trúc đáng kể trong lớp vật liệu perovskit (5111 và 5121) khi nước được loại bỏ (ở dưới) trong quá trình chế tạo, so với khi có nước (ở trên). Lớp vật liệu perovskit 5111 (được chế tạo có nước) được coi là tiếp giáp và dày đặc hơn đáng kể lớp vật liệu perovskit lớp 5121 (được chế tạo không có nước).

Sau đó, mực tiền chất chì halogenua có thể được lắng đọng trên nền mong muốn. Các lớp nền thích hợp có thể bao gồm lớp nền bất kỳ trong số các lớp nền được nhận dạng ở phần trước đó trong bản mô tả này. Như đã lưu ý ở trên, mực tiền chất chì halogenua có thể được lắng đọng nhờ các phương tiện khác nhau, bao gồm nhưng không bị giới hạn ở, đúc nhỏ giọt, đúc quay, in khe khuôn đúc, in lưới, hoặc in phun mực. Theo các phương án nhất định, mực tiền chất chì halogenua có thể được phủ quay trên nền ở tốc độ nằm trong khoảng từ 500 vòng/phút đến 10.000 vòng/phút trong khoảng thời gian từ 5 giây đến 600 giây. Theo một phương án, mực tiền chất chì halogenua có thể được phủ quay trên nền ở tốc độ khoảng 3000 vòng/phút trong thời gian khoảng 30 giây. Mực tiền chất chì halogenua có thể được lắng đọng trên nền ở môi trường xung quanh có độ ẩm tương đối nằm trong khoảng từ 0% đến 50%. Sau đó, mực tiền chất chì halogenua có thể được để khô trong môi trường hầu như không chứa nước, ví dụ độ ẩm tương đối nhỏ hơn 20%, để tạo ra màng mỏng.

Sau đó, màng mỏng này có thể được ủ nhiệt trong khoảng thời gian lên đến 24 giờ ở nhiệt độ nằm trong khoảng từ 20°C đến 300°C. Theo một phương án,

màng mỏng này có thể được ủ nhiệt trong thời gian khoảng mười phút ở nhiệt độ 50°C. Sau đó, lớp hoạt hóa bằng vật liệu perovskit có thể được hoàn thành bằng quy trình chuyển hóa, trong đó màng tiền chất được nhúng hoặc rửa bằng dung dịch bao gồm dung môi hoặc hỗn hợp của các dung môi (ví dụ, DMF, isopropanol, metanol, etanol, butanol, cloroform, clorobenzen, dimetyl-sulfoxit, nước) và muối (ví dụ, metylamoniiiodua, formamidiiiodua, guanidiiiodua, 1,2,2-triaminovinylamoniiiodua, hydroiodua của axit 5-aminovaleric) ở nồng độ nằm trong khoảng từ 0,001M đến 10M. Theo các phương nhất định, các màng mỏng cũng có thể được ủ nhiệt sau theo cùng cách ở dòng thứ nhất của đoạn này.

Do đó, sáng chế được điều chỉnh tốt để đạt được các mục đích và hiệu quả được đề xuất cũng như các mục đích và hiệu quả vốn có. Các phương án cụ thể được bộc lộ ở trên chỉ nhằm mục đích minh họa, vì sáng chế có thể được cải biến và được thực hiện theo cách khác nhau nhưng tương đương là rõ ràng đối với người có hiểu biết trung bình trong lĩnh vực có hiệu quả khi đọc phần mô tả này. Ngoài ra, sáng chế không được dự định là giới hạn ở các chi tiết kết cấu hoặc thiết kế được thể hiện ở đây, ngoài những gì được nêu trong yêu cầu bảo hộ dưới đây. Do đó, rõ ràng là các phương án minh họa cụ thể đã bộc lộ ở trên có thể được thay đổi hoặc cải biến và tất cả các biến thể này được coi là nằm trong phạm vi và bản chất của sáng chế. Cụ thể là, mọi khoảng giá trị (có dạng “từ khoảng a đến b,” hoặc tương đương, “từ xấp xỉ a đến b,” hoặc tương đương, “từ xấp xỉ a-b”) được bộc lộ ở đây được hiểu là tham chiếu đến tập hợp các giá trị (tập hợp của tất cả các tập con) của khoảng các giá trị tương ứng và mọi khoảng được nêu nằm trong khoảng các giá trị rộng hơn. Ngoài ra, các thuật ngữ trong yêu cầu bảo hộ có ý nghĩa đơn giản, thông thường trừ khi được quy định một cách chính xác và rõ ràng bởi chủ đơn.

Yêu cầu bảo hộ

1. Thiết bị quang điện bao gồm:

điện cực thứ nhất (6802);

điện cực thứ hai (6811); và

lớp hoạt hóa (6850) được bố trí ở ít nhất một phần giữa các điện cực thứ nhất và thứ hai, lớp hoạt hóa này bao gồm:

lớp vật liệu quang hoạt (6808) bao gồm vật liệu perovskit,

lớp phân cách thứ nhất (6803) được bố trí liền kề và tiếp xúc với lớp phân cách thứ hai (6804), và

lớp phân cách thứ ba (6805) được bố trí liền kề và tiếp xúc với lớp phân cách thứ hai (6804), trong đó lớp phân cách thứ nhất (6803) và lớp phân cách thứ ba (6805) bao gồm vật liệu khác với lớp phân cách thứ hai (6804);

trong đó lớp phân cách thứ nhất (6803) bao gồm Al_2O_3 , lớp phân cách thứ hai (6804) bao gồm ZnO , và lớp phân cách thứ ba (6805) bao gồm Al_2O_3 .

2. Thiết bị quang điện theo điểm 1, trong đó vật liệu perovskit có công thức CMX_3 , trong đó C bao gồm một hoặc nhiều cation, mỗi cation được chọn từ nhóm bao gồm các kim loại nhóm 1, các kim loại nhóm 2, các cation hữu cơ, và các hỗn hợp của chúng;

trong đó M bao gồm một hoặc nhiều kim loại, mỗi kim loại được chọn từ nhóm bao gồm Fe, Co, Ni, Cu, Sn, Pb, Bi, Ge, Ti, Zn, và các hỗn hợp của chúng; và

trong đó X bao gồm một hoặc nhiều anion, mỗi anion được chọn từ nhóm bao gồm các halogenua, giả halogenua, sulfua, selenua, và các hỗn hợp của chúng.

3. Thiết bị quang điện theo điểm 1, trong đó lớp hoạt hóa (6850) còn bao gồm vật liệu mao quản trung bình (3904).

4. Thiết bị quang điện theo điểm 1, trong đó lớp hoạt hóa (6850) còn bao gồm lớp phân cách thứ tư (6806) được bố trí liền kề lớp phân cách thứ nhất (6803), lớp phân

cách thứ hai (6804) hoặc lớp phân cách thứ ba (6805).

5. Thiết bị quang điện theo điểm 4, trong đó lớp hoạt hóa (6850) còn bao gồm lớp phân cách thứ năm (6807) được bố trí liền kề lớp phân cách thứ nhất (6803), lớp phân cách thứ hai (6804), lớp phân cách thứ ba (6805) hoặc lớp phân cách thứ tư (6806).

6. Thiết bị quang điện theo điểm 1, trong đó:

điện cực thứ nhất (6802) còn bao gồm anôt;

điện cực thứ hai (6811) còn bao gồm catôt; và

lớp phân cách thứ nhất (6803) và lớp phân cách thứ hai (6804) được bố trí giữa lớp quang hoạt (6808) và điện cực thứ nhất (6802).

7. Thiết bị quang điện theo điểm 2, trong đó:

C là metylamoni hoặc formamidi;

M là Pb hoặc Sn; và

X bao gồm một hoặc nhiều halogenua.

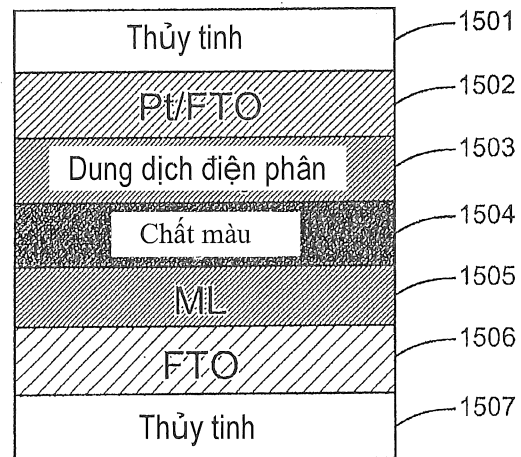


Fig. 1

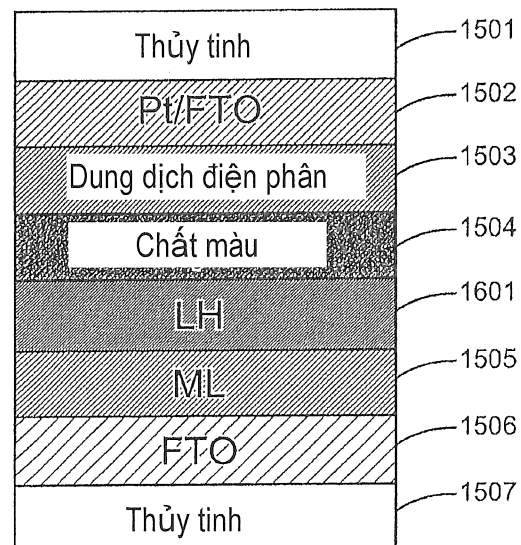


Fig. 2

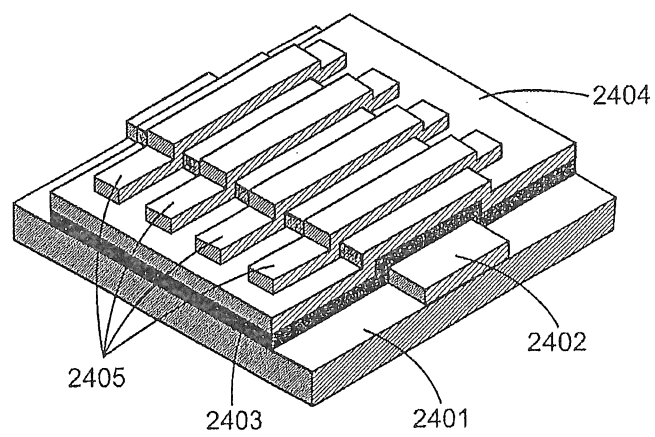


Fig. 3

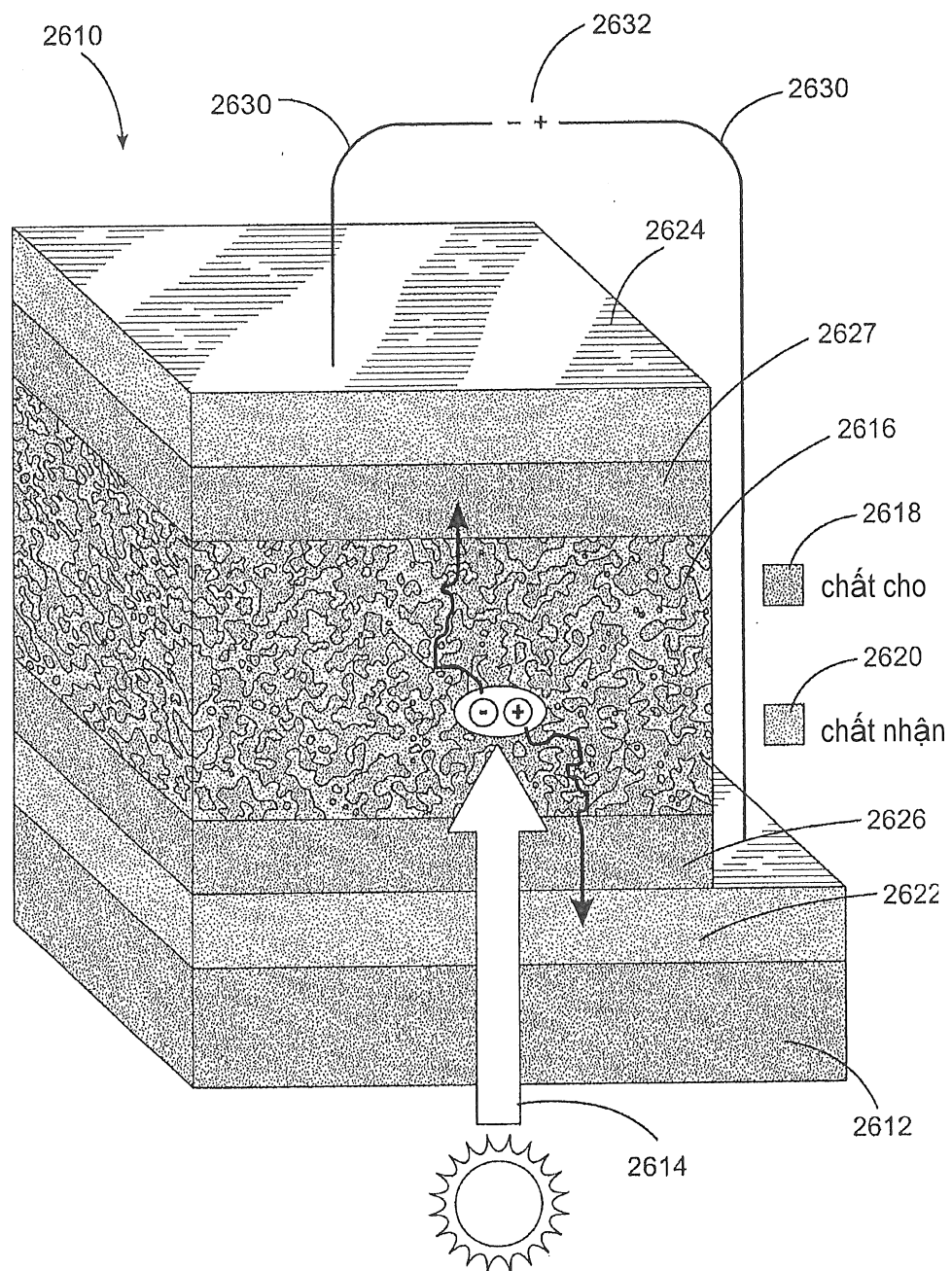


Fig. 4

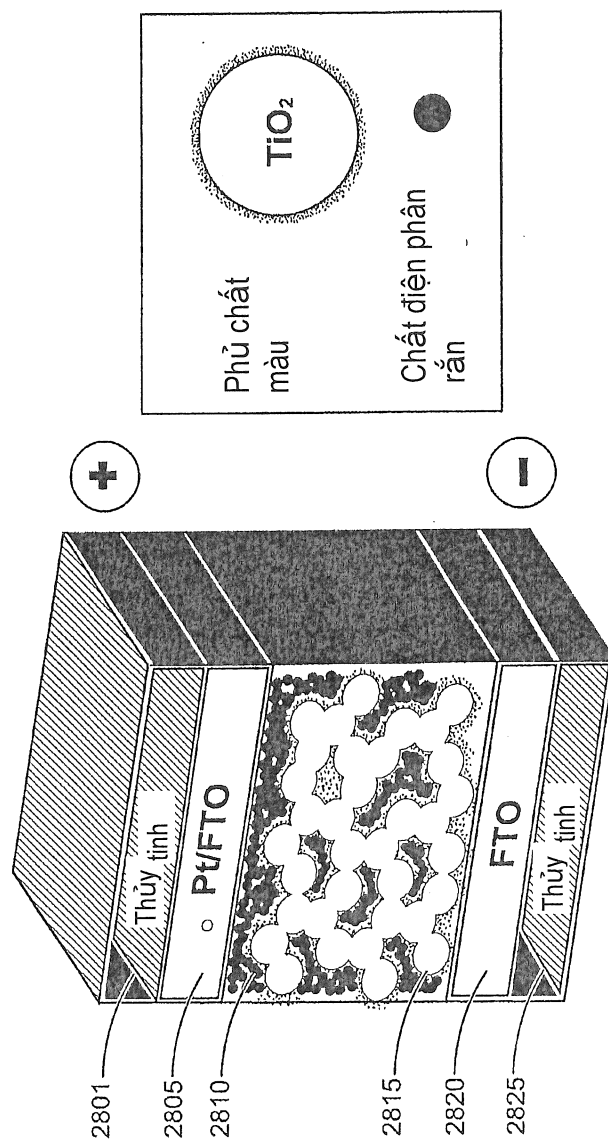


Fig. 5

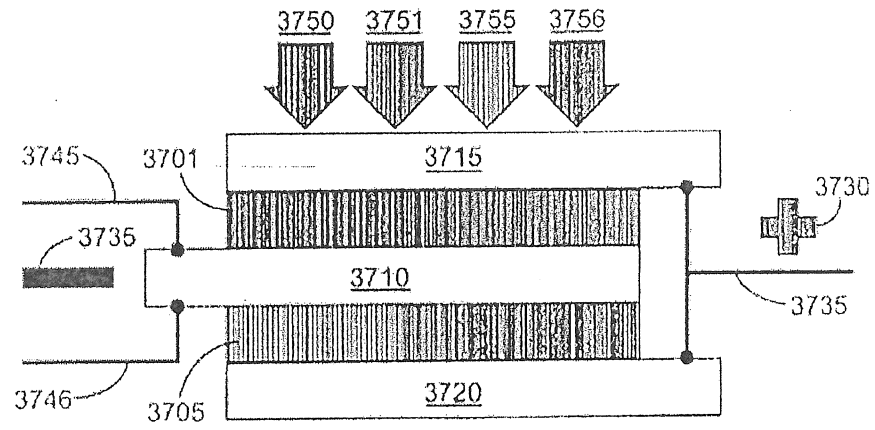


Fig. 6

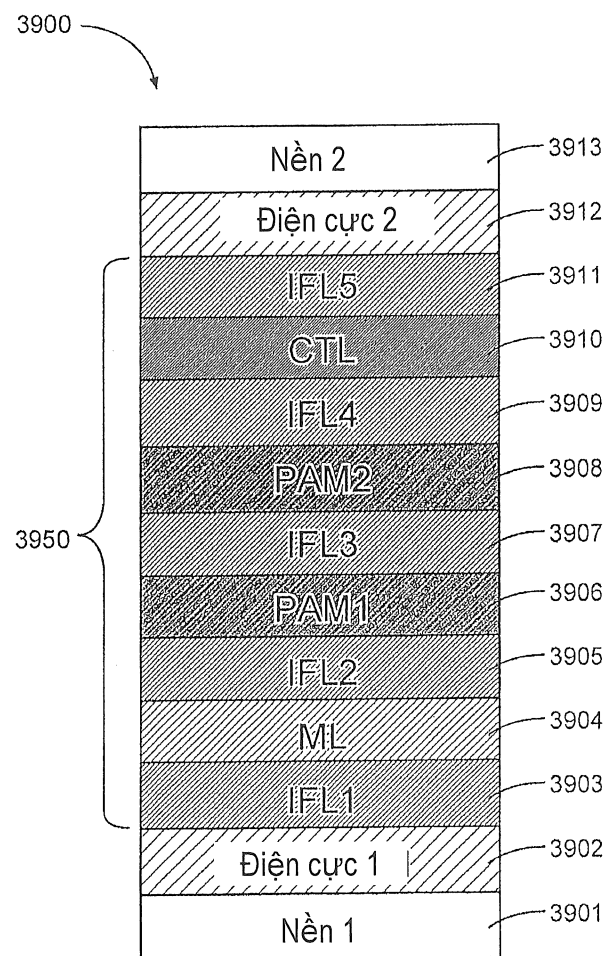


Fig. 7

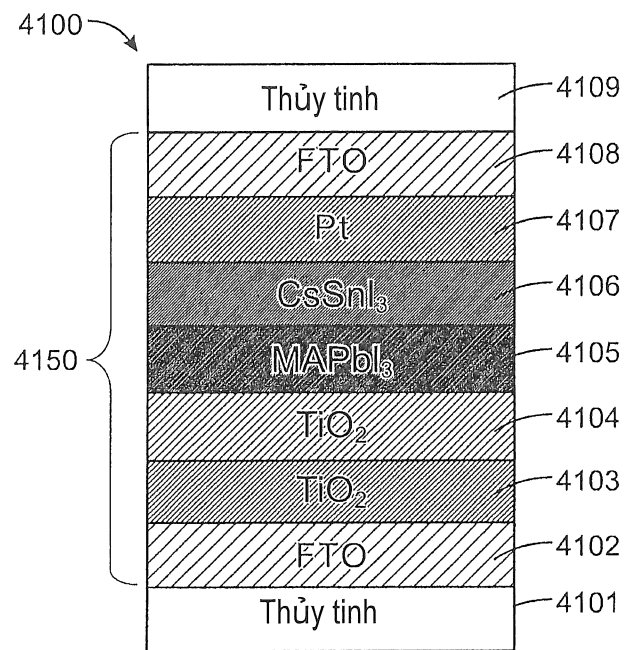


Fig. 8

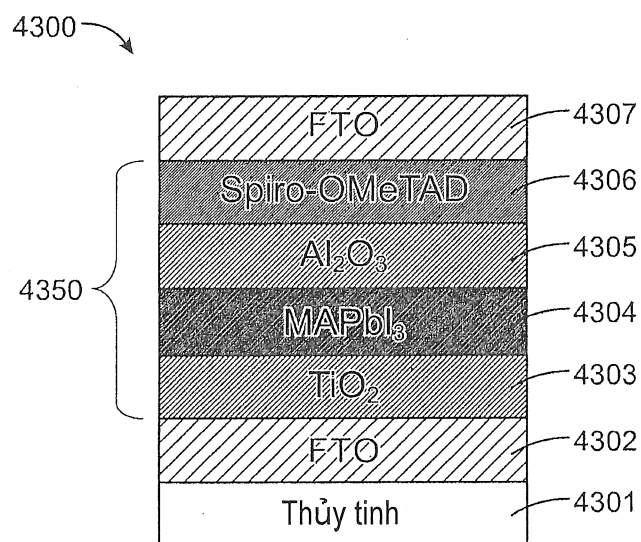


Fig. 9

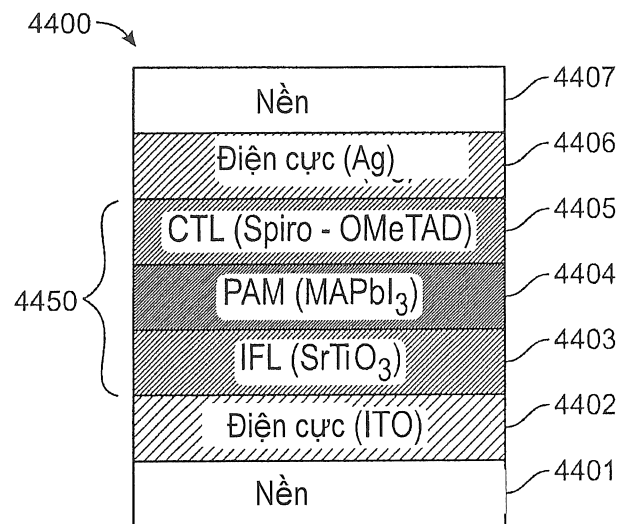


Fig. 10

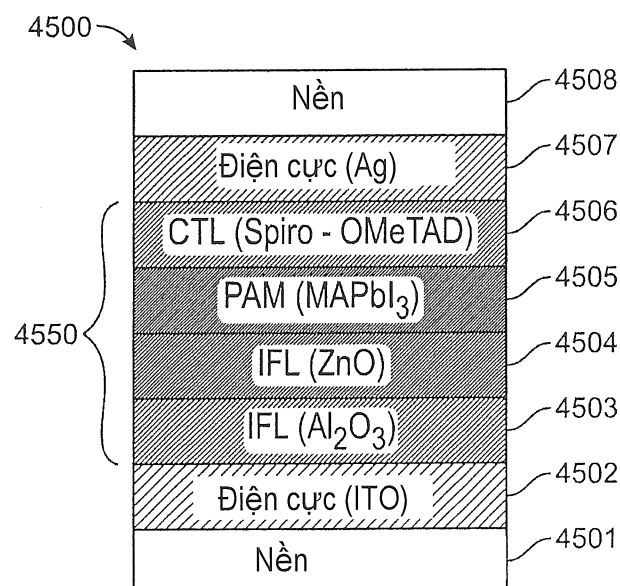


Fig. 11

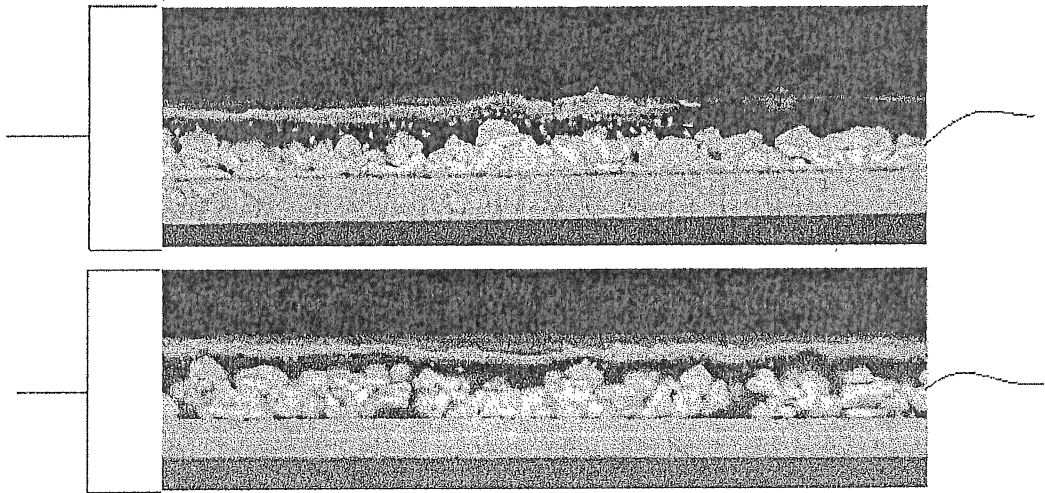


Fig. 12

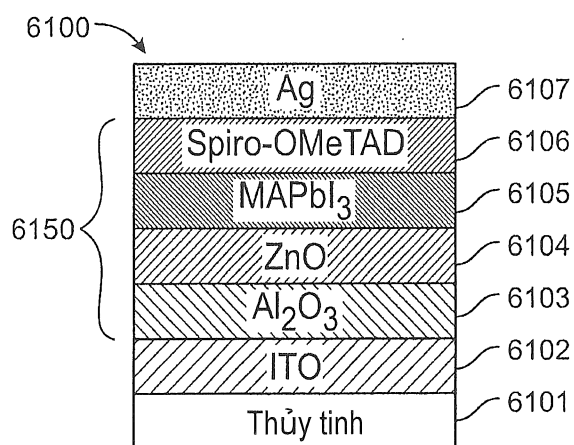


Fig. 13

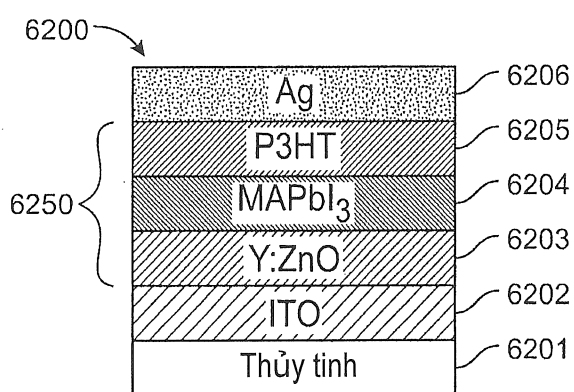


Fig. 14

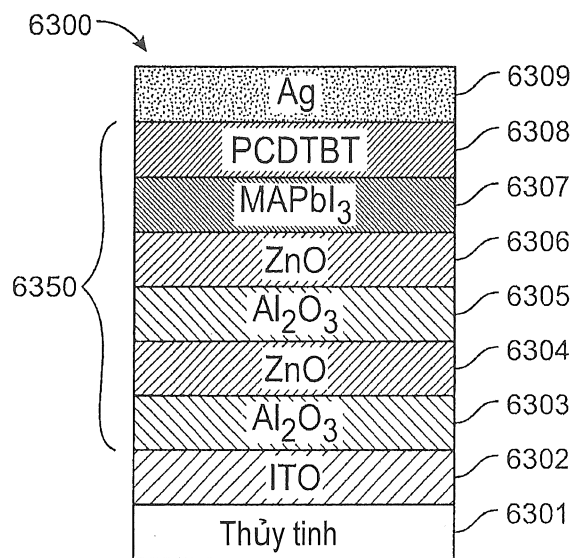


Fig. 15

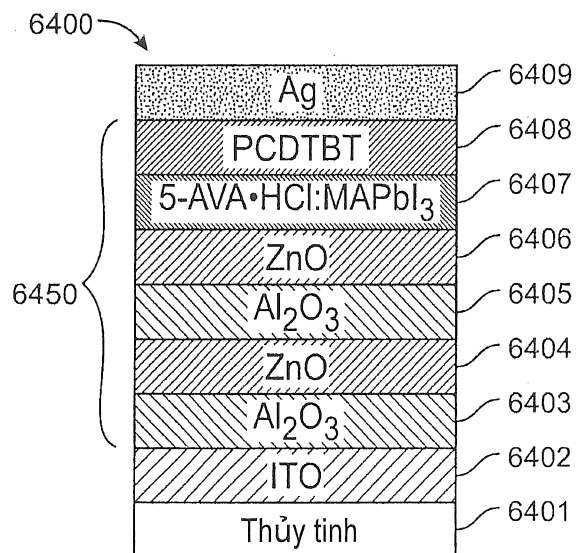


Fig. 16

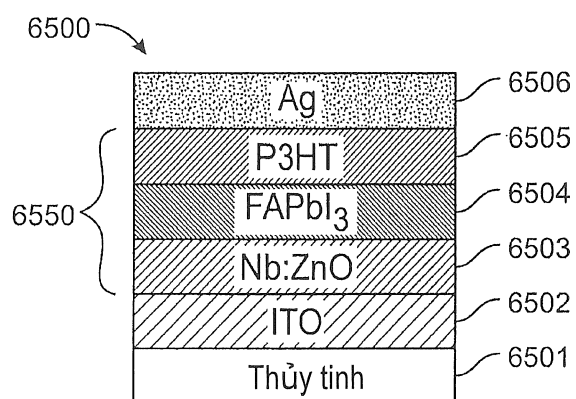


Fig. 17

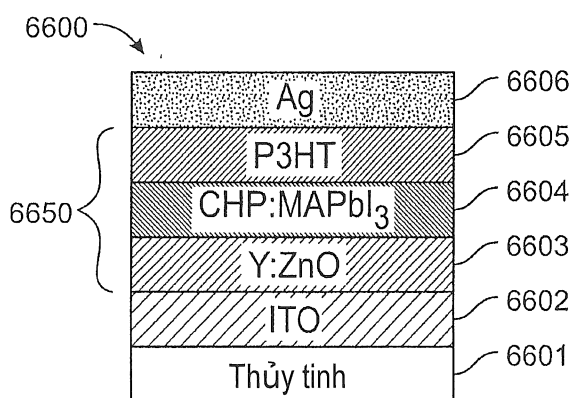


Fig. 18

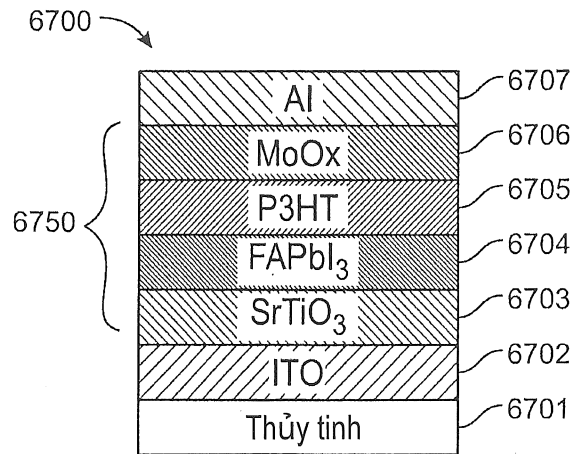


Fig. 19

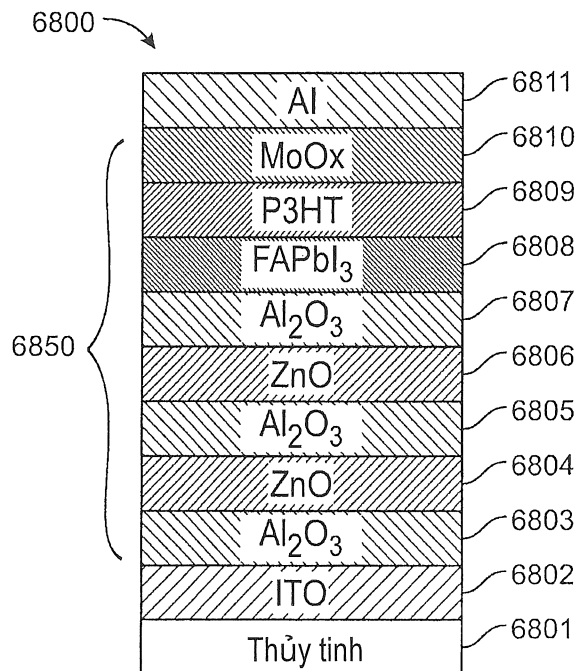


Fig. 20