



面向世界科技前沿, 面向国家重大需求, 面向国民经济主战场, 率先实现科学技术跨越发展, 率先建成国家创新人才高地, 率先建成国家高水平科技智库, 率先建设国际一流科研机构。

——中国科学院办院方针



首页 组织机构 科学研究 人才教育 学部与院士 资源条件 科学普及 党建与创新文化 信息公开 专题

搜索

首页 > 科研进展

合肥研究院铜基薄膜太阳能电池材料缺陷研究获进展

文章来源: 合肥物质科学研究院 发布时间: 2017-11-27 【字号: 小 中 大】

我要分享

铜锌锡硒(CZTSe)的组成元素在地球中储量丰富且无毒, 通过少量硫取代硒, 其带隙可以实现在1.0-1.5 eV之间调节, 是具有优势的低成本薄膜太阳能电池材料。目前, CZTSe最高效率只有12.6%, 远低于其姊妹化合物铜铟镓硒(CIGS)的22.6%。实验研究表明, Na掺杂可以提高CZTSe材料中的载流子(空穴)浓度, 增强p型电导, 进而提高电池效率。但目前掺杂对其影响机理尚不明确。

据此, 中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所曾雄课题组对CZTSe材料中杂质和缺陷的性质进行了深入的研究。课题组利用第一性原理计算出Na相关缺陷的形成能、电荷转移能级和迁移路径。研究结果表明, 在CZTSe中除了 Na_{Sn} 外, 其它与Na相关的缺陷均为浅施主或受主。其中, Na_{Zn} 形成能很低, 可以在材料中大量存在, 因此会和本征的深能级缺陷 Sn_{Zn} 竞争, 减少电子空穴对的复合, 增强电池的效率; 同时, Na_{Zn} 具有非常浅的电荷转移能级, 可以为材料贡献空穴, 增强材料的p型电导; Na容易在CZTSe材料中以间隙Na原子和 Na_{Cu} 的形式进行迁移, 有助于 V_{Cu} 浅受主的产生。相关研究结果发表在*Physical Chemistry Chemical Physics*上。

铜基化合物 CuGaS_2 室温带隙为2.43eV, 接近最佳的中间带母体材料带隙, 是理想的中间带太阳能电池材料。近年来, 中间带太阳能电池能够实现三光子吸收过程, 理论极限效率高达46%, 因此而受到研究人员广泛关注。实验和理论均已对多种掺杂元素(Sn、Fe、Ti、Cr等)的 CuGaS_2 进行研究, 但结果并不清晰。例如, 对于F掺杂 CuGaS_2 材料, 实验研究发现随掺杂量增大光吸收增强, 但光电流和电压却在减小。为此, 课题组利用优化的杂化密度泛函从缺陷物理的角度进行Sn掺杂 CuGaS_2 中的缺陷问题研究。研究发现, CuGaS_2 中的 Sn_{Ga} 是一个双极的陷阱, 辐射性复合与激发的可能性相等, 因此会限制载流子的寿命, 亦即光电流大小。另外, Sn_{Ga} 施主会诱导 Cu_{Ga} 受主的自发形成, 两者电荷补偿, 将费米能级钉扎在 $E_{\text{V}}+1.4$ eV处。此时, 离化的 Sn_{Ga}^+ 和 $\text{Cu}_{\text{Ga}}^{2-}$ 缺陷限制了可利用光的范围。该研究从理论上解释了目前实验上观测到的现象, 为未来研究并理解杂质中间带材料的性质提供了新思路。相关研究工作发表在*Physical Review B*上。

研究工作得到了国家重点基础研究发展计划(973计划)、国家留学基金委及合肥超算中心的资助与支持。

论文链接: [1](#) [2](#)

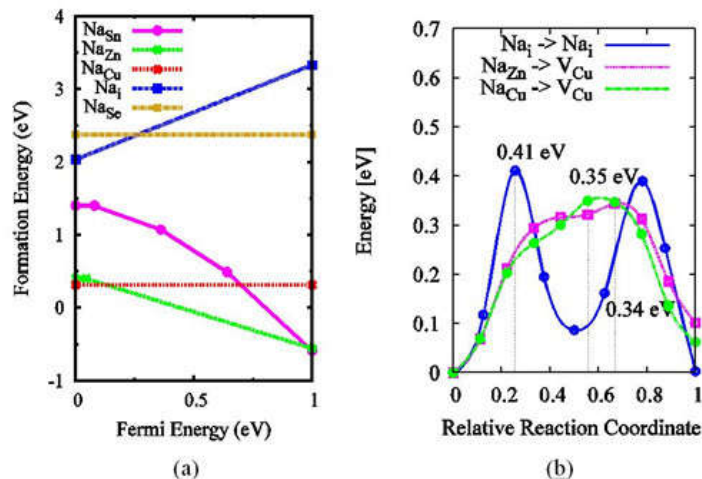


图1. CZTSe中与Na相关缺陷的形成能随费米能级的变化(a); Na的迁移路径(b)。

热点新闻

国科大举行2018级新生开学典礼

中科院党组学习贯彻习近平总书记在全国...
中科院党组学习研讨药物研发和集成电路...
中国科大举行2018级本科生开学典礼
中科院“百人计划”“千人计划”青年项...
中国散裂中子源通过国家验收

视频推荐

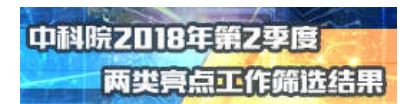


【新闻联播】“率先行动”计划 领跑科技体制改革



【朝闻天下】13年第2例 人工繁育江豚满百日

专题推荐



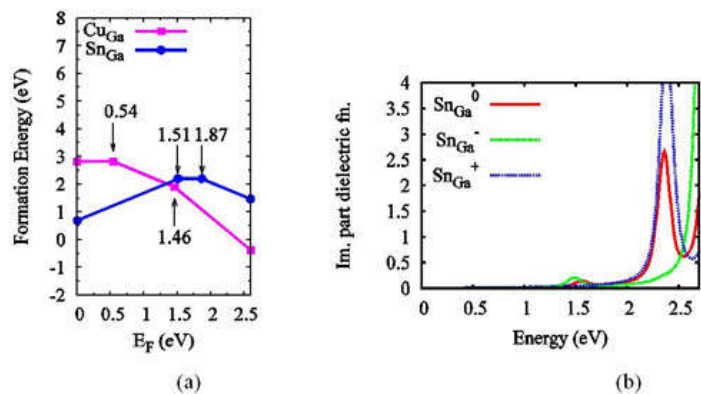


图2. CuGaS_2 中 Sn_{Ga} 和 Cu_{Ga} 的形成能随费米能级的变化曲线。箭头指示绝热电荷载转移能级所在位置(a); CuGaS_2 中 Sn_{Ga}^0 、 Sn_{Ga}^- 和 Sn_{Ga}^+ 在子带隙能量区间的介电函数的虚部(b)。

(责任编辑: 侯茜)



© 1996 - 2018 中国科学院 版权所有 京ICP备05002857号 京公网安备110402500047号 联系我们
地址: 北京市三里河路52号 邮编: 100864