

科研进展

固体薄膜太阳能电池材料理论研究取得新进展

文章来源：张小丽 发布时间：2018-05-25

近期，固体物质计算科学研究所曾雄研究员课题组在薄膜太阳能电池材料的研究方面取得新进展。通过模拟计算，从理论上筛选出了Cu₂ZnSnS₄ (CZTS)中阻碍电池效率的本征缺陷类型并提出了调控方法。相关结果在线发表在Solar Energy Materials and Solar Cells 180, 118-122(2018)杂志上。

组成CZTS的所有元素在地球中储量丰富且无毒，是公认的环境友好的低成本高效率电池候选材料。然而，目前基于CZTS的太阳能电池的最高效率约为12.7%，远低于它的同类化合物Cu(In,Ga)Se₂的最高效率(20.3%)，其中一个重要原因就是CZTS中存在许多阻碍载流子自由运输的电荷局域型缺陷。目前的实验技术还不能从原子尺度判断缺陷的类型，而理论上可以通过研究缺陷的形成能和电荷转移能级精确判断主要的电荷局域型缺陷的类型。

曾雄研究员课题组基于杂化泛函理论的研究发现Cu_{Sn}和Cu_{Zn}是CZTS中主要的电荷局域型缺陷，且它们对载流子的影响不尽相同。Cu_{Sn}在带隙中形成一个深杂质能级，电子空穴对通过该深能级复合，因此Cu_{Sn}是一个深能级复合中心。Cu_{Zn}杂质能级位置相对低，容易电离、贡献载流子，但是电离后的Cu_{Zn}⁻倾向于与Zn_{Cu}⁺形成电荷互相补偿的受主-施主缺陷对，其中电性相反的Cu_{Zn}⁻与Zn_{Cu}⁺互相吸引在材料中引入大的势波动，该波动能够捕获载流子，因此降低了材料中载流子浓度。而且课题组通过进一步研究，提出了抑制这两种电荷局域型缺陷的办法：(1)富Sn生长环境抑制Cu_{Sn}，因为CZTS中Sn的化学式变化范围非常大，通过营造富Sn的生长环境，可抑制Cu_{Sn}；(2)Cd掺杂抑制Cu_{Zn}，因为掺杂的Cd会占据Zn的位置，降低Cu_{Zn}形成的可能。两种方案都已获得实验支持。

上述工作得到国家973项目以及国家自然科学基金的支持，计算工作中科院超算中心合肥分中心完成。

文章链接：<https://doi.org/10.1016/j.solmat.2018.02.025>

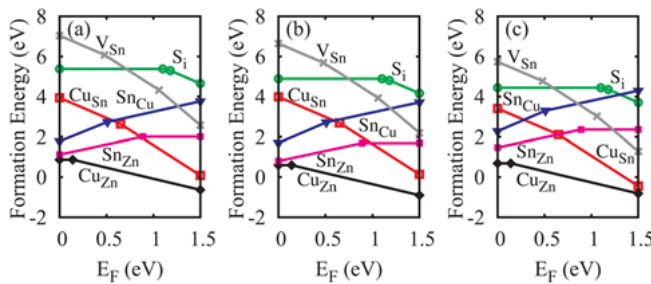
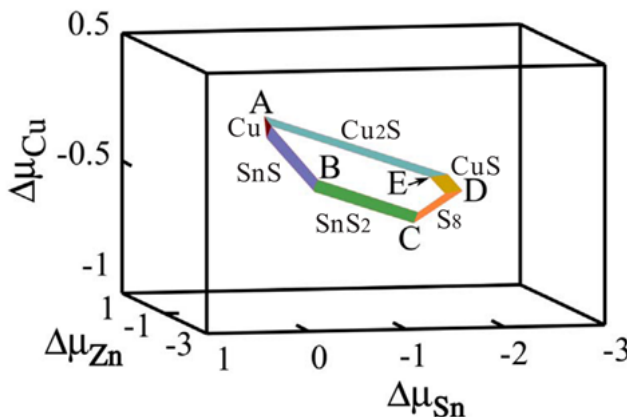


图1. 六种电荷局域型缺陷在化学势稳定区间的不同点的形成能随费米能级的变化关系。形成能小于1.5eV的主要是Cu_{Zn}和Cu_{Sn}



科学岛报



科学岛视讯



图2. CZTS化学势稳定区间，即多边形围起来的区域。

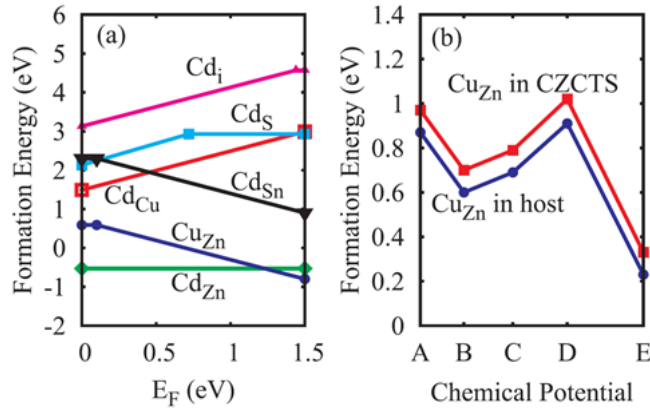


图3. Cd掺杂引入的杂质的形成能随 (a) 费米能级 (b) 化学势的变化关系。 Cd_{Zn} 形成能最低，说明Cd杂质倾向于占据Zn的位置，抑制 Cu_{Zn} 形成。

子站

[内部信息](#) | [院长办公室](#) | [监督与审计处](#) | [人事处](#) | [财务处](#) | [资产处](#) | [科研处](#) | [高技术处](#) | [国际合作处](#) | [科发处](#) | [科学中心处](#) | [研究生处](#) | [安全保密处](#) | [离退休](#) | [基建管理](#) | [质量管理](#) | [后勤服务](#) | [信息中心](#) | [河南中心](#) | [健康管理中心](#) | [科院附中](#) | [供应商竞价平台](#) | [职能部门](#) |

友情链接



[版权保护](#) | [隐私与安全](#) | [网站地图](#) | [常见问题](#) | [联系我们](#)

Copyright © 2016 hfcas.ac.cn All Rights Reserved 中国科学院合肥物质科学研究院 版权所有 皖ICP备 050001008

地址: 安徽省合肥市蜀山湖路350号 邮编: 230031 电话: 0551-65591245 电邮: yzxx@hfcas.ac.cn

