中国科学院物理研究所  
北京凝聚态物理国家研究中心 E02组供稿

第30期

2023年04月23日

## 铜锌锡硫硒薄膜太阳能电池研究新进展

铜锌锡硫硒太阳能电池 (CZTSSe) 是一种新型薄膜太阳能电池, 因其吸光系数高、弱光响应好、稳定性高、组成元素储量丰富、环境友好且价格低廉, 具有很大的发展潜力, 受到越来越多的关注。中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心孟庆波团队多年来在该类薄膜太阳能电池方面开展了系统研究, 在高质量铜锌锡硫硒薄膜制备、界面调控、器件载流子动力学分析和电池效率提升等方面取得了系列研究成果。例如, 基于二甲亚砜 (DMSO) 体系, 发展了一种可以同时调控背界面和吸收层体相缺陷的Ge掺杂策略, 所制备的CZTSSe电池认证效率为12.8%; 在界面研究方面, 引入有机电子传输层 (PCBM) 增强电荷抽取与传输, 实现了12.9%的电池效率; 在溶剂工程方面, 发展了一种环境友好的水溶液体系, 探索了小分子配体与金属离子相互作用对前驱膜、硒化膜晶体生长、薄膜微结构及器件性能的影响, 获得了12.8%的电池认证效率 (Adv. Mater. 2022, 34, 2202858; J. Energy Chem. 2022, 70, 154; J. Mater. Chem. A 2022, 2, 779; Adv. Energy Mater. 2021, 11, 2102298; Nano Energy 2021, 89, 106405; Nano Energy 2020, 76, 105042; Sci. Bull. 2020, 65, 738; Joule, 2020, 4, 472)。该团队已经在CZTSSe电池材料及器件方面申请国家发明及实用新型专利13项。

最近, 该团队与南京邮电大学辛颖教授合作, 从硒化动力学角度出发, 通过调节腔室压强来改变半封闭石墨盒中的硒化反应速率, 进而调节铜锌锡硫硒薄膜的相演变过程。增加腔室压强后, 通过原位实时硒分压监测发现, 在硒化早期, 硒分压被抑制, 从而降低了硒化升温阶段 (200-400 °C) 中前驱膜与气态硒蒸汽的碰撞几率; 同时, 正压条件下硒化能够抑制元素的非均匀扩散。在以上两点共同影响下, 相演变过程在相对更高的温度下开始 (> 400 °C), 前驱膜表面经常出现的Cu<sub>x</sub>Se、Cu<sub>2</sub>SnSe<sub>3</sub>等中间相被抑制, 因此, 实际相演变过程一步完成。由此获得的银替位CZTSSe (ACZTSSe) 吸收层晶体质量高、内部孔洞少、表面缺陷浓度显著降低。所制备电池体相缺陷浓度降低了约一个数量级, 电学性能也得到明显改善, 并且实现了全面积14.1%效率 (认证全面积13.8%) 的太阳能电池, 是目前报道的最高效率。这项工作为进一步理解和调控铜锌锡硫硒相演变过程提供了一种动力学调控思路, 也为其他类型多晶薄膜生长制备提供借鉴意义。

该研究成果以“Control of the Phase Evolution of Kesterite by Tuning of the Selenium Partial Pressure for Solar Cells with 13.8% Certified Efficiency”为题发表在Nature Energy (DOI: 10.1038/s41560-023-01251-6)。中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心清洁能源实验室E02组博士研究生周家正和徐啸为该论文的共同第一作者, 物理所李冬梅研究员、南京邮电大学辛颖教授、物理所孟庆波研究员为该论文的通讯作者。本研究得到了国家自然科学基金委 (U2002216, 52222212, 51972332, 52172261) 支持。

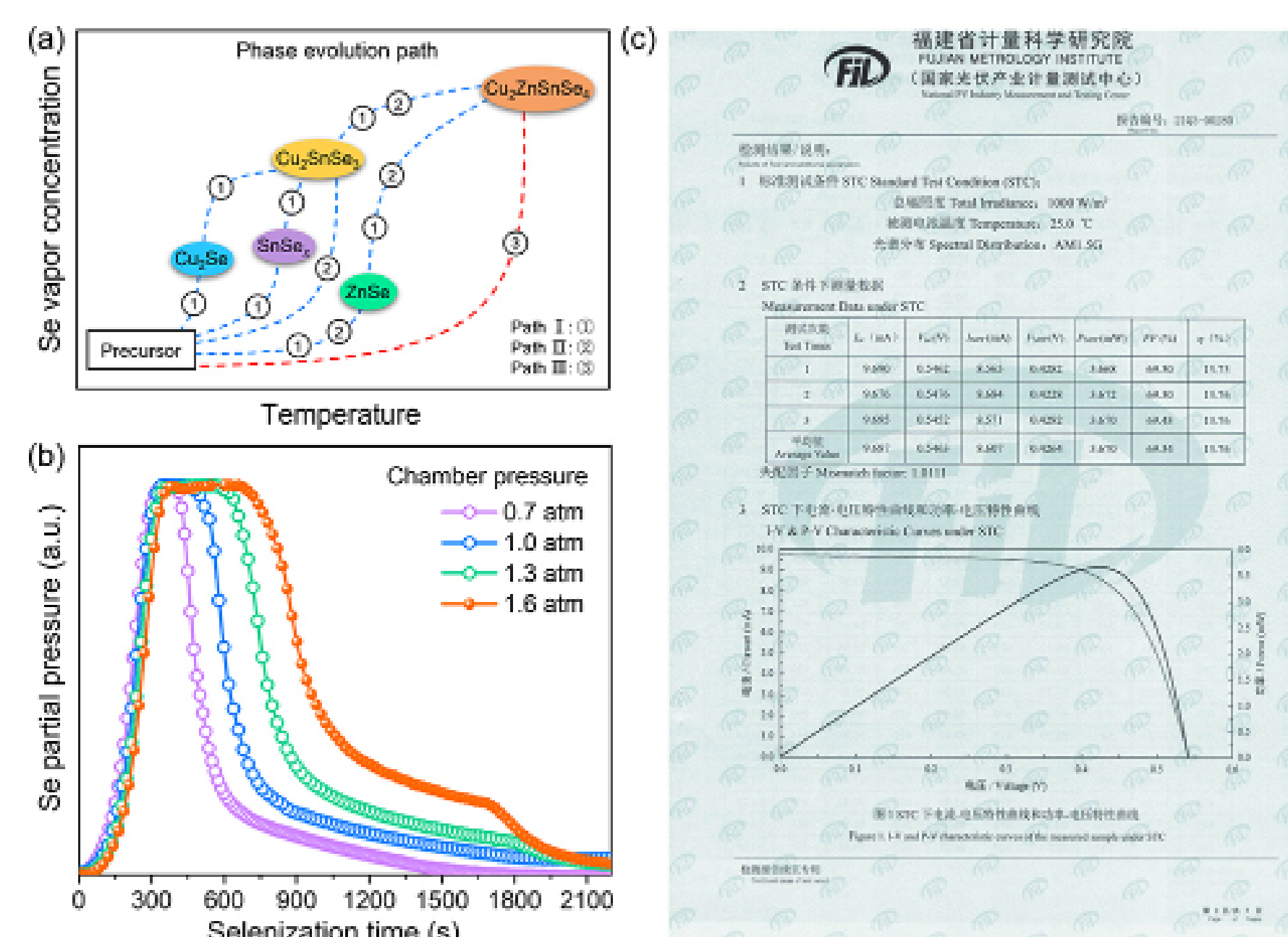


图1 (a) 铜锌锡硫硒的相演变路径示意图; (b) 原位监测获得的不同腔压下反应过程中的硒分压曲线; (c) 铜锌锡硫硒太阳能电池认证报告 (国家光伏产业计量测试中心)

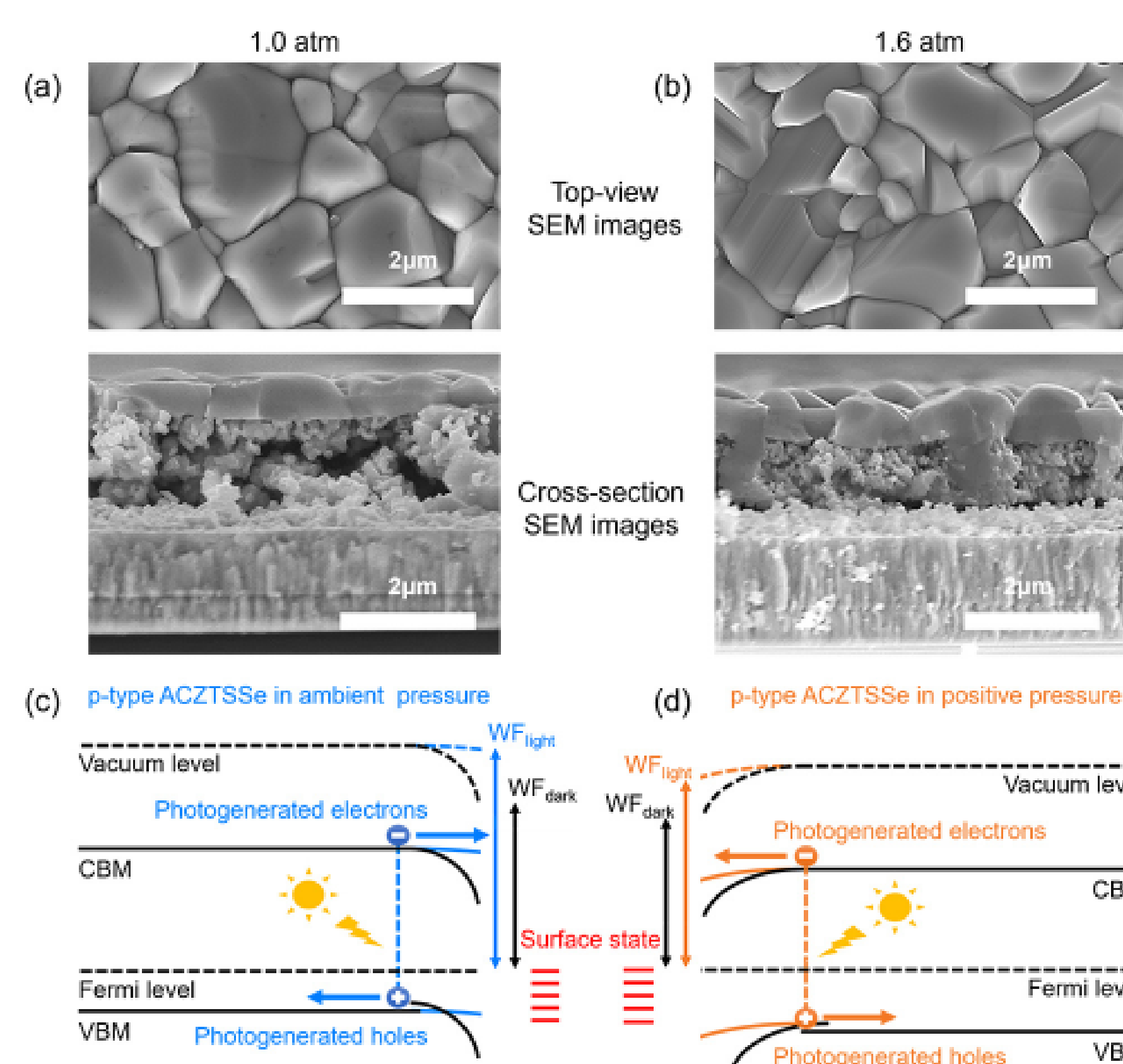


图2 (a) 对比组吸收层的SEM正面和截面图像; (b) 实验组吸收层的SEM正面和截面图像; (c) 对比组吸收层的能带结构; (d) 实验组吸收层的能带结构