

合肥研究院铜基薄膜太阳能电池材料缺陷研究获进展

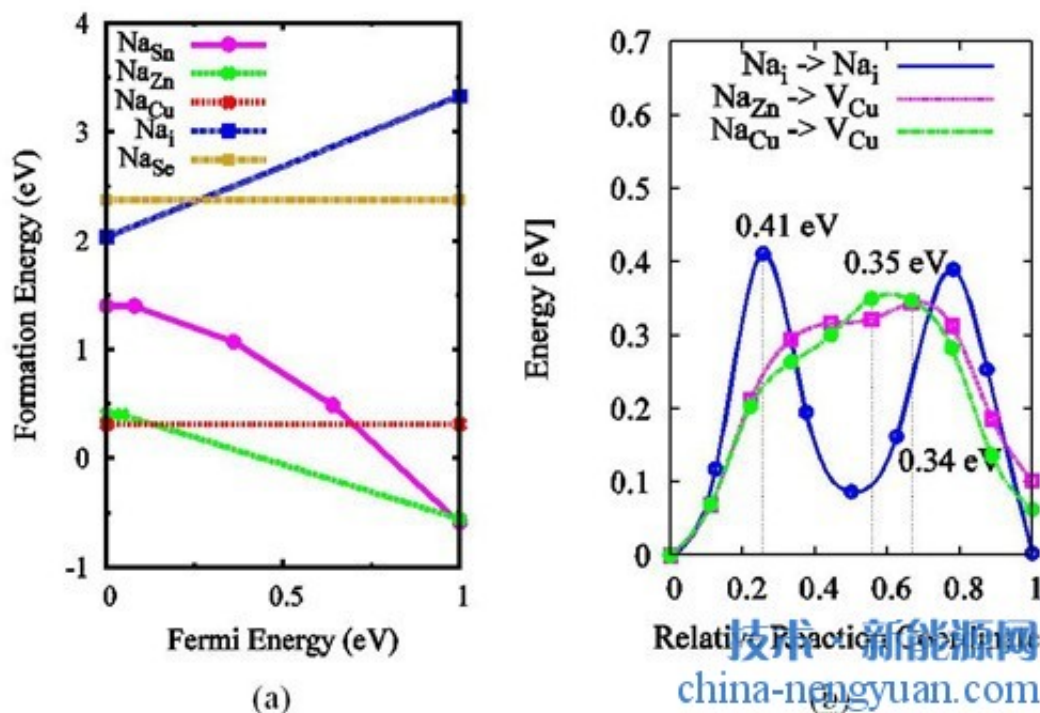


图1. CZTSe中与Na相关缺陷的形成能随费米能级的变化(a)；Na的迁移路径(b)。

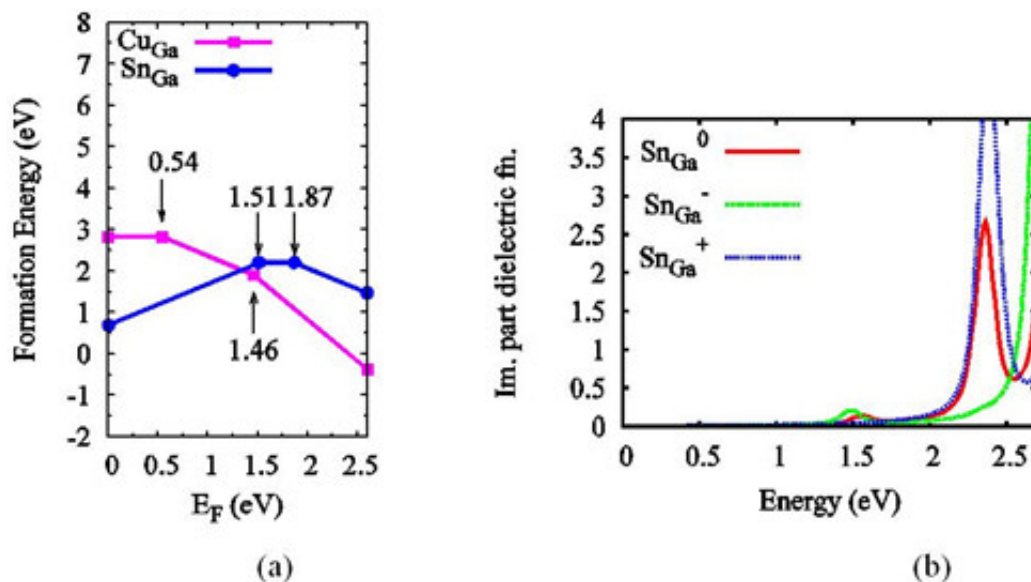


图2. CuGaS_2 中 Sn_{Ga} 和 Cu_{Ga} 的形成能随费米能级的变化曲线。箭头指示绝热电转移能级所在位置(a)； CuGaS_2 中 Sn_{Ga}^0 、 Sn_{Ga}^- 和 Sn_{Ga}^+ 在子带隙能量区间的介电函数的虚部(b)。

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维课题组对CZTSe材料中杂质和缺陷的性质进行了深入的

研究。研究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。研究表明，在CZTSe中除了NaSn外，其它与Na相关的缺陷均为浅施主或受主。其中，NaZn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SnZn竞争，减少电子空穴对的复合，增强电池的效率；同时，NaZn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NaCu的形式进行迁移，有助于VCu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CuGaS₂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CuGaS₂进行研究，但结果并不清晰。例如，对于Fe掺杂CuGaS₂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CuGaS₂中的缺陷问题研究。研究发现，CuGaS₂中的SnGa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，SnGa施主会诱导CuGa受主的自发形成，两者电荷补偿，将费米能级钉扎在EV +1.4 eV处。此时，离化的SnGa⁺和CuGa⁻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。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/117386.html>