

合肥研究院在透明导电氧化物薄膜研究中取得系列进展

近期，中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所功能材料研究室在透明导电氧化物（transparent conducting oxide, TCO）薄膜研究方面取得系列进展，相关成果相继在Advanced Electronic Materials(Adv. Electron. Mater. 4, 1700476 (2018))，Journal of Materials Chemistry C (J. Mater. Chem. C 5, 1885 (2017))，Chemical Communications (Chem. Commun. 50, 9697 (2014))等杂志上发表。

一般而言，材料的透明特性和导电性互不兼容。自然界中透明的物质(如玻璃)往往不导电，导电的物质(如金属)往往不透明。实现透明性和导电性共存的主要措施是选择宽禁带半导体或绝缘体以确保可见光区的高透明性，再通过元素掺杂来引入载流子以实现导电性。按照该方法可实现具有高可见光区透明性和良好导电性共存的一类非常重要的材料体系即TCO。迄今，TCO薄膜已广泛应用于平板显示、太阳能光伏电池、触摸屏和发光二极管等领域。

TCO材料根据导电载流子的类型分为n型即电子导电型和p型即空穴导电型。在n型TCO方面，近来有相关报道表明，宽带隙钙钛矿BaSnO₃基TCO表现出很高的室温载流子迁移率，因而有望取代广泛应用的锡掺杂氧化铟(In₂O₃:Sn, ITO)成为下一代TCO材料。固体所研究人员基于溶液法制备出了钙钛矿BaSnO₃薄膜，经La元素掺杂及薄膜位错密度调控，获得了具有与真空法制备的BaSnO₃薄膜相比拟的室温载流子迁移率(~23 cm²/Vs)，且可见光透过率超过80%，并提出氧空位是决定该体系载流子迁移率的重要调控因素。相关结果发表于Applied Physics Letters (Appl. Phys. Lett. 106, 101906 (2015))。进一步，科研人员通过在Sn位Sb掺杂提高了薄膜的载流子浓度，实现了薄膜电导率的大幅提升，构建了BaSnO₃基薄膜溶液法生长机理与光电性能的关联。相关结果发表于ACS Applied Energy Materials (ACS Appl. Energy Mater. 1, 1585 (2018))。

与n型TCO相比，p型材料的性能和应用远落后于n型材料体系。这源于金属氧化物的电子结构与能带结构：金属氧化物中的金属原子与氧原子以离子键结合，氧的2p能级远低于金属的价带电子能级。由于氧离子具有很强的电负性，对价带顶的空穴具有很强的局域化束缚作用，从而即使在价带顶引入空穴，也将形成深受主能级，导致空穴载流子很难在材料中移动。理论设计已表明在铜铁矿体系中可获得透明和p型导电共存。而Ag基和Cu基铜铁矿相比较而言，具有更宽的光学带隙及更低的光吸收系数。但由于Ag₂O易于分解，导致Ag基铜铁矿无法在开放系统中成功制备。固体所研究人员基于溶液法首次在开放系统中成功制备了Ag基p型铜铁矿AgCrO₂薄膜。该薄膜表现出(001)晶面自组装生长特征，且表现出较高的室温电导率及可见光透过率。相关结果发表于Journal of Materials Chemistry C (J. Mater. Chem. C 5, 1885 (2017))，并被选为封面及2017年度热点文章。

此外，研究人员基于电子-电子关联作用可有效调节材料的能带结构和电子结构，设计并制备了两种新型p型TCO薄膜。采用溶液法制备了强关联Bi₂Sr₂Co₂O_y薄膜，该薄膜表现出优良的p型透明导电特征，室温电导率超过222 S/cm，可见光区透过率超过50%。相关结果发表于Chemical Communications (Chem. Commun. 50, 9697 (2014))。采用脉冲激光沉积制备了一种新型p型透明导电氧化物薄膜材料——钙钛矿结构La_{2/3}Sr_{1/3}VO₃。在该薄膜材料中实现了导电性和光学透过率的良好平衡，获得了截至目前最高的透明导电优值。相关结果发表于Advanced Electronic Materials (Adv. Electron. Mater. 4, 1700476 (2018))，并被选为卷首插页。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/124276.html>