

物理所氧化亚铜新能源材料研究获进展

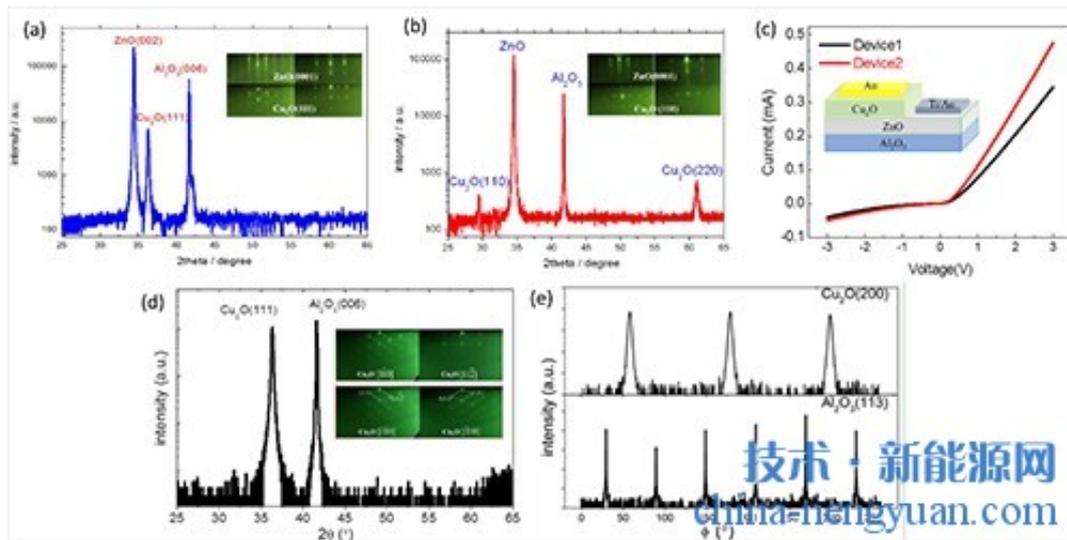


图1. Cu₂O单晶薄膜的制备：ZnO模板上 (a) Cu₂O(111)和 (b) Cu₂O(110)薄膜的XRD θ - 2θ 扫描结果及RHEED监测结果；(c) ZnO/Cu₂O异质结原型器件示意图及I-V测试结果；(d) 蓝宝石上Cu₂O单晶薄膜的XRD θ - 2θ 扫描及RHEED监测结果；(e) 蓝宝石上单晶Cu₂O薄膜的XRD θ - 2θ 扫描结果。

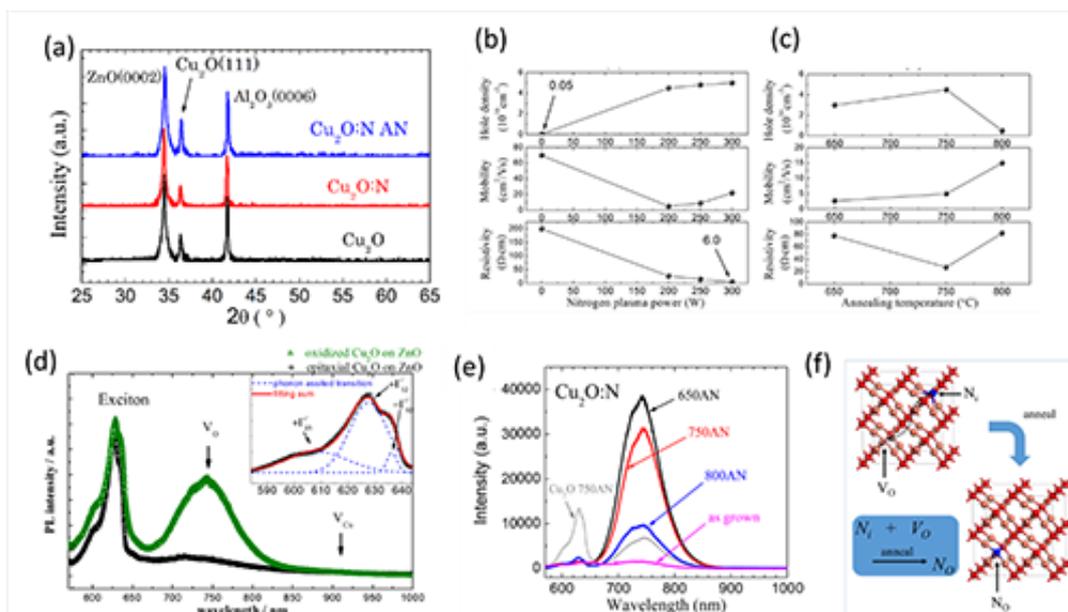


图2. Cu₂O光电性能调控及缺陷研究：(a) 掺氮样品的XRD θ - 2θ 扫描结果；霍尔测试得出的 (b) 电性随掺杂浓度变化及 (c) 电性随退火温度变化的结果；(d) 室温下PL测试结果以及用声子辅助的模型对激子发光峰的拟合；(e) 掺氮样品的室温PL谱；(f) 氮掺杂样品中杂质缺陷作用机理示意图。

氧化亚铜 (Cu₂O) 是一种性能优异的半导体材料，它具有2.1eV (590nm) 的直接带隙以及很高的可见光吸收系数，再加上它具有无毒、低价、原料丰富等优点，已成为太阳能转化与利用研究领域的重要材料。理论预计基于Cu₂O的太阳能电池效率可达20%，通过掺杂引入合适的中间带 (intermediate band) 后，其光电转换效率的理论极限可进一步提高到~60%。同时，Cu₂O具有光催化活性，可以直接利用可见光来催化水的裂解产生氢气。

中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家实验室 (筹) 清洁能源前沿研究重点实验室杜小龙研究组持续开展了Cu₂O单晶薄膜的可控生长、掺杂及缺陷调控等一系列研究工作，获得了一些重要进展。Cu₂O中Cu处于中间价态，这为单一价态Cu₂O的制备带来了困难，梅增霞副研究员、李俊强博士、杜小龙研究员等通过对Cu膜氧化动力学过程的系统研究，实现了氧化过程的精确控制，抑制了欠氧化或过氧化所造成的金属Cu或二价CuO团簇的形成，并进一

步发展了Cu₂O的外延生长工艺，利用分子束外延法在ZnO、MgO、SrTiO₃等多种衬底上制备出高质量Cu₂O单晶薄膜。通过调节富铜/富氧生长条件，实现了薄膜中本征缺陷种类及浓度的调控，在室温下观察到了强烈的激子发光，并证实了铜空位（VCu）是影响激子特性的主要原因，而氧空位（VO）含量对激子发光的影响较小。

掺杂是调控Cu₂O光电特性以满足器件应用需要的必要手段，最近该团队和E02组孟庆波研究员、SF3组纪爱玲副研究员以及挪威奥斯陆大学的Andrej Kuznetsov教授等合作，通过氮掺杂技术实现了对Cu₂O的电性调控，并系统研究了杂质和缺陷在Cu₂O晶格中的动力学行为。N原子掺入会占据O原子位形成替位原子，还会导致薄膜中VO含量增加，并有部分N原子会形成填隙原子（Ni）。Ni是一种在研究中被长期忽视的缺陷，然而该团队的研究结果证明：它与其他缺陷的相互作用对Cu₂O薄膜的光电性能产生了重要影响。在适当的退火条件下，Ni能够迁移到VO的位置填补这一空位，导致VO和Ni减少以及NO增加，从而使薄膜性质发生相应的改变。这一工作发表在Scientific Reports 4, 7240 (2014)。基于对氮掺杂机理的理解，通过对掺杂及退火条件的设计，可以大幅提高Cu₂O薄膜光电性能，为其在能源器件中的应用打下坚实的材料基础。

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/70647.html>