[Highlight]

doi: 10.3866/PKU.WHXB201612271

www.whxb.pku.edu.cn

新型硒化亚锗薄膜太阳能电池

刘忠范

(北京大学化学与分子工程学院, 北京 100871)

无机化合物薄膜太阳能电池如碲化镉(CdTe)和铜铟镓硒(CIGS)等电池, 因具有材料用量少、产品轻质可柔性、制备能耗低、弱光和高温发电性能好等优势, 从而成为太阳能电池中的热点研究领域之一。然而, 因为Cd是剧毒元素, 且Te、In资源非常稀缺, 这些电池的大范围应用具有一定的局限性。近年来, 为了降低成本和解决材料丰度问题, 铜锌锡硫硒(CZTSSe)太阳能电池受到了极大的关注。该材料中各元素均属于高丰度低成本元素, 同时具有优异的光学和电学性能, 非常适合作为太阳能电池吸收层材料, 已取得了12.6%的光电转换效率记录¹。然而CZTSSe为五元体系, 热力学稳定区间小, 生产工艺复杂, 产品良率低, 同时薄膜组分和晶格缺陷难于精确控制, 使得效率的提升空间有限。

为了寻求新的绿色无毒、储量丰富、光电性能优异的光伏吸收层材料, 中国科学院化学研究所胡劲松研究员、万立骏院士课题组进行了积极尝试, 在国际上率先报道了基于快速升华法制备的高质量硒化亚锗(GeSe)多晶薄膜, 并将其作为吸收层构筑了顶衬结构的GeSe薄膜太阳能电池, 取得了1.48%的光电转换效率, 为该材料光伏性能的首次报道。同时, 所制备的GeSe薄膜电池器件在未封装条件下, 空气中放置近两个月性能基本无任何衰减, 表现出良好的器件稳定性。相关研究成果于2016年12月20日发表在*Journal of the American Chemical Society*杂志²上, 题目为: GeSe Thin-Film Solar Cells Fabricated by Self-Regulated Rapid Thermal Sublimation。

GeSe是一种简单的二元化合物, 原料储量大, 毒性低, 同时禁带宽度(1.14 eV)合适, 吸光系数($> 10^4 \text{ cm}^{-1}$)大, 迁移率($128 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$)高, 非常适合于制作新型薄膜太阳能电池, 理论光电转

换效率可到30%以上³⁻⁵。针对制备GeSe过程中易存在Ge和GeSe₂杂相问题, 该课题组研究人员基于GeSe极易升华的特性, 设计了具有自调节功能的快速升华薄膜制备方法(rapid thermal sublimation, 简称RTS), 成功获得了高质量的GeSe薄膜。与传统的薄膜制备方法如磁控溅射等相比, 该工作提出的RTS薄膜制备方法具备以下优势: (1) 通过对比目标产物GeSe和杂相的饱和蒸气压曲线可知, GeSe薄膜的制备过程即为提纯过程, 从而表现出自提纯特性; (2) 通过深入研究GeSe的升华机理, 发现GeSe(s)通过双原子分子GeSe(g)升华, 可大大减少互占位、间位等点缺陷, 因此可以获得缺陷良性的薄膜; (3) 基于GeSe易升华、饱和蒸气压大的特点, 成膜速率可高达 $4.8 \mu\text{m} \cdot \text{min}^{-1}$, 进而可以大大降低能耗, 提高生产效率。

以上研究充分表明, GeSe是非常有潜力的太阳能电池吸收层新材料。研究人员相信随着进一步对薄膜质量、器件结构和功能层界面的系统研究和协同优化, GeSe电池的光电转换效率势将会得到大幅度提升, 从而有望成为一个新的光伏研究热点。

References

- (1) Wang, W.; Winkler, M. T.; Gunawan, O.; Gokmen, T.; Todorov, T. K.; Zhu, Y.; Mitzi, D. B. *Adv. Energy Mater.* **2014**, *4*, 1301465. doi: 10.1002/aenm.201301465
- (2) Xue, D. J.; Liu, S.; Dai, C. M.; Chen, S.; He, C.; Zhao, L.; Hu, J. S.; Wan, L. J. *J. Am. Chem. Soc.* **2016**, doi: 10.1021/jacs.6b11705
- (3) Yoon, S. M.; Song, H. J.; Choi, H. C. *Adv. Mater.* **2010**, *22*, 2164. doi: 10.1002/adma.200903719
- (4) Xue, D. J.; Tan, J.; Hu, J. S.; Hu, W.; Guo, Y. G.; Wan, L. J. *Adv. Mater.* **2012**, *24*, 4528. doi: 10.1002/adma.201201855
- (5) Vaughn, D. D., II.; Patel, R. J.; Hickner, M. A.; Schaak, R. E. *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, *132*, 15170. doi: 10.1021/ja107520b