研究揭示硅基光电极中界面特征对性能的影响

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/20222.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

研究揭示硅基光电极中界面特征对性能的影响。近日，中国科学院大连化学物理研究所李灿院士、副研究员姚婷婷等在光电催化分解水研究方面取得重要进展，以单晶硅光电极为模型，识别了金属—氧化物—半导体（MOS）结构光阳极中制约其性能的关键界面因素，并针对性地引入相关界面调控策略，有效地促进了光生电荷分离提取和利用效率，实现了对光电转化器件的理性设计和优化。相关成果发表在《美国化学会会志》。

通过太阳能驱动水分解制氢是解决能源与可持续发展问题的途径之一。光阳极上水氧化产氧半反应动力学缓慢，是太阳能光电催化分解水的决速步骤。其中，光生电荷的产生、分离提取以及传输利用是实现高效光（电）至化学能转化的几个关键步骤。在界面能带调控研究方面，团队前期以硅基光电极为研究模型，发现了n-Si/ITO肖特基光电器件的界面类施主态缺陷抑制光生电荷的分离和传输，揭示了界面能带结构与光电器件特性的关系。基于前期探索，发现获得高性能Schottky硅基光电极的关键是通过降低缺陷位点浓度，从而减小提取电荷过程中的损失，因此，需要进一步明确电极界面性质和光—电—化学能转化之间的关联，从而可以采取有针对性的优化策略。

在前期工作基础上，本工作以n-Si/oxide(MOx)/Ni光阳极体系为模型，研究了不同特点异质结界面对电荷分离传输性能、光电/光电化学性能的影响。研究人员通过原子层沉积可控制备氧化铝（AlOx）薄层，有效地消除n-Si/Ni中的界面钉扎，形成具有较高势垒和内建电场的MOS异质结，显著提高光电转化效率；引入AlOx薄层的同时，在n-Si导带下0.59eV处产生类施主态深缺陷，其能够在反向偏压下发生离子化；通过AlOx与薄层Au的相互作用可消除这种深缺陷，从而使得光生电荷的分离提取达到最大化。最终，研究人员获得的n-Si/SiOx/AlOx/Au/Ni/NiFeOx光阳极的填充因子达到0.75。

该工作证明了界面电子结构在太阳能光电转换领域的重要性，为光电极的理性设计提供了科学依据。（来源：中国科学报孙丹宁）

相关论文信息：https://doi.org/10.1021/jacs.2c06748

作者：李灿等 来源：《美国化学会会志》

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发