

---

# 影响锌黄锡矿太阳能电池性能的关键因素找到了

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/30481.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！*

影响锌黄锡矿太阳能电池性能的关键因素找到了。太阳能是目前可再生能源种类中最易普及和推广使用的清洁能源之一。光伏发电作为太阳能利用的主要形式，在现代农业种植、灌溉、病虫害防治及农业机械动力等领域有着重要的应用。

锌黄锡矿基（CZTS）材料因其丰富的组成元素、无毒性和高吸收系数等优点，已成为太阳能光伏领域的研究热点。CZTS太阳能电池的光电转换效率在2024年已达到14.9%，但仍低于硅和其他薄膜太阳能电池技术。

开路电压损失是限制CZTS太阳能电池性能的关键因素之一。提升开路电压的关键在于抑制带尾态和非辐射电荷复合。目前，带尾态的来源及其对CZTS太阳能电池光电性能的影响机制仍不清楚。

对此，湖南农业大学化学与材料科学学院教授李位课题组与南加州大学、中国科学院福建物质结构研究所的研究者合作，采用从头算非绝热分子动力学模拟方法，揭示了CZTS带尾态和电荷损失的根源，并提出了相应的消除策略。研究成果近日在线发表于《美国化学会志》（JACS）。



李位向记者介绍研究成果。受访者供图

?

研究表明，铜锌无序是CZTS中带尾态的重要来源，其原因在于无序体系的厄尔巴赫能量远高于有序体系。铜锌无序导致了新的硫中心配位多面体的形成，增加了结构的非均匀性，增强了硫阴离子与周围阳离子的振动，电子-声子相互作用增强，从而降低了载流子的寿命，限制了CZTS太阳能电池的效率。

较强的电子-声子相互作用降低了载流子寿命，并限制了锌黄锡矿太阳能电池的效率。研究人员用镉部分替代锌有助于结构有序化，并显著抑制带尾效应，特别是在无序体系中。这种改善可归因于镉原子半径和质量的增大，从而削弱了阴离子周围的键合。

据介绍，该研究明确了阳离子无序性对CZTS带尾态和载流子寿命的重要影响，为通过调控阳离子无序性实现高效CZTS太阳能电池、促进光伏农业领域的发展提供了一种有效途径。

研究得到了国家自然科学基金面上项目、湖南省湖湘青年英才项目的支持。（来源：中国科学报王昊昊）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1021/jacs.4c14416>

---

作者：李位等 来源：《美国化学会志》

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](http://www.iikx.com)转发