

## 背电极材料、结构以及厚度等影响钙钛矿太阳能电池性能的研究

王剑涛 肖文波 夏情感 吴华明 李璠 黄乐

### Influence of back electrode material, structure and thickness on performance of perovskite solar cells

Wang Jian-Tao Xiao Wen-Bo Xia Qing-Gan Wu Hua-Ming Li Fan Huang Le

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 198404 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20211037

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211037>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

---

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

#### 高效无空穴传输层碳基钙钛矿太阳能电池的制备与性能研究

Preparation and performance of high-efficient hole-transport-material-free carbon based perovskite solar cells

物理学报. 2018, 67(22): 228801 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181457>

#### n-i-p结构钙钛矿太阳能电池界面钝化的研究进展

Research progress of interface passivation of n-i-p perovskite solar cells

物理学报. 2019, 68(15): 158803 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190468>

#### 界面修饰对有机-无机杂化钙钛矿太阳能电池性能的影响

Effect of interface modification on performances of organic-inorganic hybrid perovskite solar cells

物理学报. 2021, 70(2): 028402 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201222>

#### 湿度环境下钙钛矿太阳能电池薄膜微结构演化的同步辐射原位实时研究

An in-situ real time study of the perovskite film micro-structural evolution in a humid environment by using synchrotron based characterization technique

物理学报. 2017, 66(1): 018401 <https://doi.org/10.7498/aps.66.018401>

#### 钙钛矿太阳能电池研究进展: 空间电势与光电转换机制

Recent advances in perovskite solar cells: Space potential and optoelectronic conversion mechanism

物理学报. 2019, 68(15): 158401 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190569>

#### 氧化镍在倒置平面钙钛矿太阳能电池中的应用进展

Research progress of inverted planar perovskite solar cells based on nickel oxide as hole transport layer

物理学报. 2021, 70(11): 118801 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201896>

# 背电极材料、结构以及厚度等影响钙钛矿太阳能电池性能的研究\*

王剑涛<sup>1)2)</sup> 肖文波<sup>1)2)†</sup> 夏情感<sup>1)2)</sup> 吴华明<sup>1)2)</sup> 李璠<sup>3)</sup> 黄乐<sup>4)</sup>

1) (南昌航空大学, 无损检测技术教育部重点实验室, 南昌 330063)

2) (江西省光电检测技术工程实验室, 南昌 330063)

3) (南昌大学材料科学与工程学院, 南昌 330031)

4) (广东工业大学材料与能源学院, 广州 450001)

(2021年5月31日收到; 2021年8月9日收到修改稿)

背电极是影响钙钛矿太阳能电池性能的一个重要因素. 本文采用 COMSOL 软件仿真研究了背电极材料、结构、厚度对电池性能的影响规律. 发现相对于背电极金属的功函数, 其阻值对电池性能影响小. 背电极结构除了阻值会影响电池性能, 还存在影响电池性能的其他因素. 蜂窝结构背电极中, 考虑制作难易程度的情况下, 圆形半径约等于边缘间距时性价比最高. 预测背电极中每增加 10% 的孔隙, 电池性能大约提升 5%. 背电极阻值随着厚度的增加而减小, 考虑工艺、成本等因素的前提下, 最佳的厚度应在 100—150 nm 之间.

**关键词:** 钙钛矿太阳能电池, 背电极, 材料, 结构, 厚度

**PACS:** 84.60.Jt, 88.40.H-, 88.40.hj

**DOI:** 10.7498/aps.70.20211037

## 1 引言

影响钙钛矿太阳能电池效率的因素有很多, 如器件结构<sup>[1]</sup>、界面属性<sup>[2,3]</sup>等. 这些因素无一例外都会反映电池的光电转换效率 (photoelectric conversion efficiency, PCE)<sup>[4]</sup>、串联电阻 (series resistance,  $R_s$ )<sup>[5]</sup>、填充因子 (fill factor, FF)<sup>[6]</sup> 等变化. 电池背电极<sup>[7,8]</sup> 作为钙钛矿太阳能电池的重要部分, 其阻值在串联电阻中占据了很大的比例. 背电极阻值由材料的种类 (例如铂 Pt<sup>[9]</sup>、金 Au<sup>[10]</sup>、炭基的复合材料<sup>[11]</sup>)、结构<sup>[12]</sup> (例如仿生蛾眼纳米结构背电极<sup>[13]</sup>、准交指式背电极<sup>[14]</sup>) 等耦合在一起决定, 其反映了电池的性能, 目前仍然有较大的优化空间<sup>[15,16]</sup>.

为此, 本文从背电极材料选取、结构设计及厚

度优化出发, 采用 COMSOL 软件仿真研究了钙钛矿太阳能电池背电极电阻的变化, 并与实验结果对比, 分析得出优化的背电极属性.

## 2 模型构建与验证

COMSOL 软件广泛用于钙钛矿太阳能电池的理论研究<sup>[17–19]</sup>. 上海大学车俐佳等<sup>[20]</sup> 仿真与实验研究了钙钛矿太阳能电池的背电极特征. 为此, 本文采用 COMSOL 中 AC /DC 模块重复文献中八边形结构的银 (Ag) 背电极, 并将得到的仿真电阻数据与文献结果进行对比, 验证仿真结果.

图 1(a) 和图 1(b) 是文献<sup>[20]</sup> (图 1(a)) 及本文 (图 1(b)) 构建的背电极结构在 COMSOL 中的网格剖分图, 图 1(c) 是文献与本文计算的背电极电

\* 国家自然科学基金 (批准号: 12064027, 62065014, 62064007)、无损检测技术教育部重点实验室开放基金 (批准号: EW201908442, EW201980090) 和江西省主要学科学术和技术带头人培养计划-领军人才项目 (批准号: 20204BCJ22002) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: xiaowenbo1570@163.com

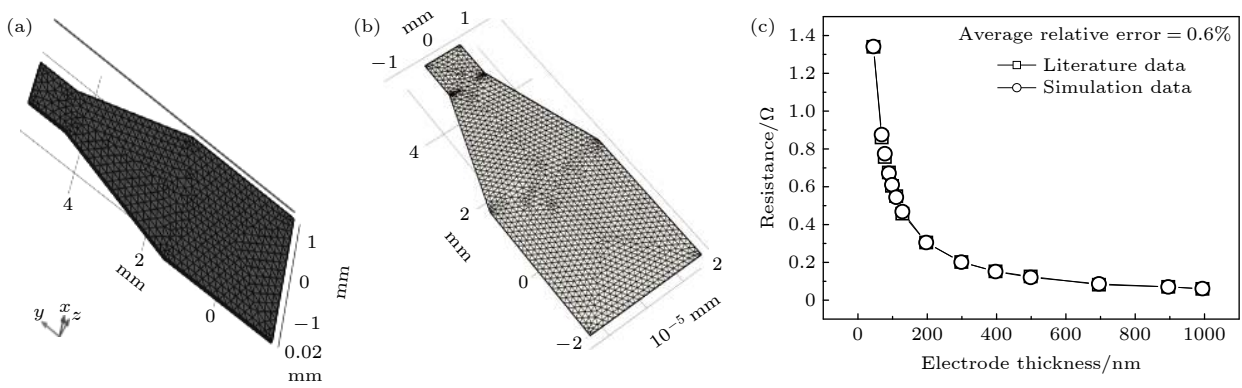


图 1 文献 (a) 及本文 (b) 构建的背电极结构在 COMSOL 中的网格剖分图; (c) 文献与本文计算的背电极电阻-厚度变化趋势图  
 Fig. 1. The grid diagram of the back electrode structure constructed in literature (a) and this paper (b) in COMSOL; (c) back electrode resistance changing with its thickness.

阻-厚度变化趋势. 从图 1(c) 可以看出, 文献中提取获得的阻值与本文仿真所得阻值虽然在部分厚度上有所区别, 但是总体符合很好. 它们平均相对误差小于 0.6%, 误差基本可以忽略不记, 并且变化趋势两者一致, 由此验证本文模型构建及计算是对的.

### 3 背电极材料、结构、厚度的研究

#### 3.1 背电极材料的影响

研究文献 [21] 中厚度为 150 nm 的铝 (Al)、锡 (Sn)、Ag、铁 (Fe)、铜 (Cu)、Au 6 种八边形结构金属背电极的阻值. 图 2(a) 和图 2(b) 分别是 6 种金属背电极功函数、PCE 及其电阻.

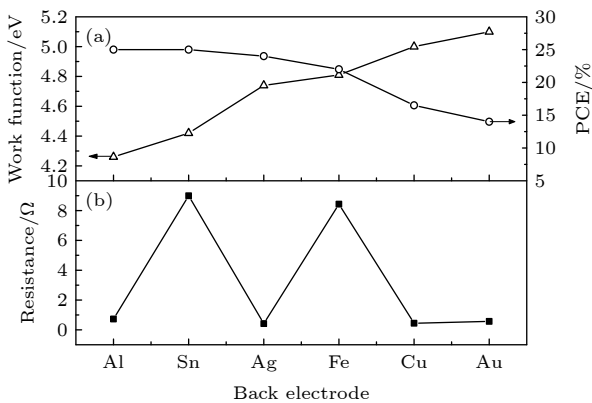


图 2 6 种金属的背电极功函数、电池转换效率 (a) 及其电阻 (b)  
 Fig. 2. Back electrode work function, cell conversion efficiency (a) and electrode resistance (b) of six metals.

由图 2 可知, 上述 6 种材料中 Ag 的阻值是最小的, 只有 0.41881Ω, Au 和 Al 则次之; 而 Sn 和 Fe 的电阻阻值最大, 远大于其他材料的阻值. 因

此, 若只考虑金属材料自身电阻对钙钛矿太阳能电池的影响时, 使用 Ag 作为背电极材料制备的钙钛矿太阳能电池性能最好, 而使用 Sn 作为背电极材料制备的钙钛矿太阳能电池性能最差. 将上面金属电阻值分别和金属材料功函数以及文献中的 PCE 对比, 发现金属电阻小的其功函数和 PCE 不一定大, 而电阻大的其功函数和 PCE 也不一定小. 但可以看出金属功函数与电池 PCE 的大小成反比. 由此可知, 金属材料的阻值对电池性能影响没有功函数大. 采用上述方法进一步研究了八边形结构碳基背电极, 电阻值为 8596 Ω. 尽管碳基背电极的阻值是 Au 电极的数千倍, 但其 PCE 仍然可以超过 10%[11]. 因此, 背电极电阻值对电池效率的影响相对其他因素来说较小. 此外, 与文献 [21] 中三种空穴传输层 NiO, Cu<sub>2</sub>O, P3HT 下的钙钛矿电池 PCE 对比研究, 发现三种空穴传输层下, 金属性质对电池 PCE 影响规律一样, 即与金属电阻值相比, 金属功函数对电池 PCE 的影响更大.

#### 3.2 背电极结构影响

##### 3.2.1 蜂窝结构 S-HQIDE 和 L-HQIDE 背电极的比较

文献 [22] 分别设计了两种暴露面积的背电极结构: 一种是暴露面积较小的蜂窝结构 (S-HQIDE), 它的背电极圆形直径约为 2.7 μm, 边缘间距约为 1.3 μm. 另一种是暴露面积较大的蜂窝结构 (L-HQIDE), 它的圆形直径约为 8.0 μm, 边缘间距约为 1.5 μm. 图 3 是厚度 2.5 μm 的 S-HQIDE(图 3(a) 和图 3(c)) 和 L-HQIDE(图 3(b) 和图 3(d)) 的结构以及仿真图.

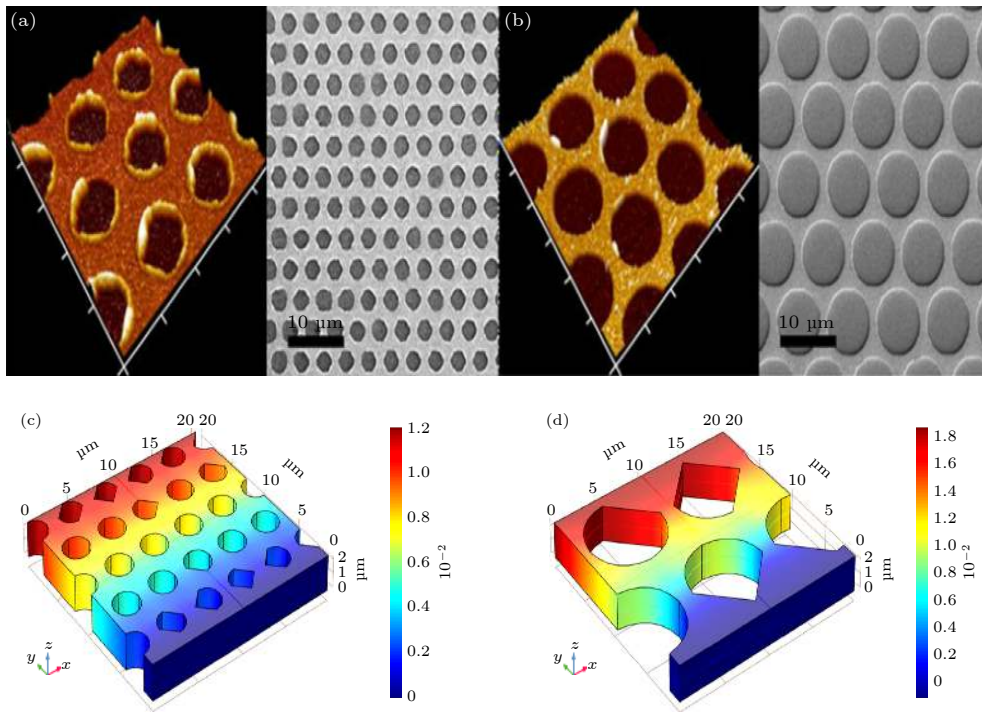


图 3 S-HQIDE (a、c) 和 L-HQIDE(b、d) 的背电极结构以及仿真图

Fig. 3. Back electrode structure and simulation diagram of S-HQIDE ((a), (c)) and L-HQIDE ((b), (d)).

由图 3 知 S-HQIDE 结构的电阻为  $0.012249 \Omega$ , 而 L-HQIDE 结构的电阻为  $0.017534 \Omega$ . 两种结构电势相似, 都在水平方向上相等, 在竖直方向上均匀下降直至为零. 比较可知, L-HQIDE 结构的阻值约为 S-HQIDE 结构的 1.4 倍. 若只考虑电阻的影响, 则使用 S-HQIDE 结构作为背电极的太阳能电池效率约为 L-HQIDE 结构背电极效率的 1.4 倍. 实验结果证明它们的 PCE 之比约为 4 倍. 因此, 蜂窝型结构背电极除了在阻值方面上影响效率外, 还在其他方面, 例如接触面积上影响了电池的效率.

### 3.2.2 蜂窝结构中圆形半径对背电极的影响

研究厚度为  $150 \text{ nm}$  Ag 薄膜蜂窝结构, 边缘间距分别为  $1$  和  $2 \mu\text{m}$  时, 圆形半径依次为  $0.5, 1, 1.5, 2, 2.5$  和  $3 \mu\text{m}$  的背电极电阻, 结果如图 4 所示.

由图 4 可知, 圆形半径为  $0.5 \mu\text{m}$  时, 边缘间距分别为  $1$  和  $2 \mu\text{m}$  的背电极阻值都最小, 半径为  $3 \mu\text{m}$  时电极阻值最大. 并且随着圆形半径的增加, 电阻是在逐渐增加的, 但是增大的趋势不是线性的. 同时发现, 在半径相同时, 边缘间距为  $2 \mu\text{m}$  的背电极阻值更小, 这可能是由于当边缘间距为  $2 \mu\text{m}$  时, 在相同的面积上, 该结构的圆形间隙个数更少, 占比面积较小, 因此使得它的电阻比边缘间距为  $1 \mu\text{m}$  时的小.

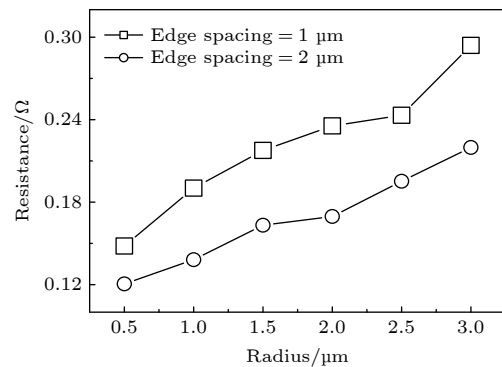


图 4 蜂窝结构背电极电阻随圆形半径的变化

Fig. 4. The resistance of the back electrode with honeycomb structure varies with the radius of the circle.

由此, 理论上来说蜂窝结构背电极的圆形半径是越小越好, 边缘间距越大越好. 但是圆形半径越小其制作就越复杂, 制作时间也要越长, 且边缘间距越大可能会使得整个电极的面积越大, 性价比低. 因此认为蜂窝结构的圆形半径约等于边缘间距时性价比最高.

### 3.2.3 多孔孔隙的占比对背电极的影响

最近基于多孔隙金背电极的钙钛矿太阳能电池研究中, 发现孔隙中  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  填充效果是影响器件性能的重要因素 [23,24]. 为此, 研究了厚度为  $150 \text{ nm}$  正方形 Ag 背电极 (面积  $100 \mu\text{m} \times 100 \mu\text{m}$ )

中, 1—10  $\mu\text{m}$  孔隙占比对其电阻影响的规律. 图 5 是无孔隙及 10% 随机孔隙时背电极仿真图及其电阻 (图 5(a)), 以及占比变化对其电阻值的影响 (图 5(b)).

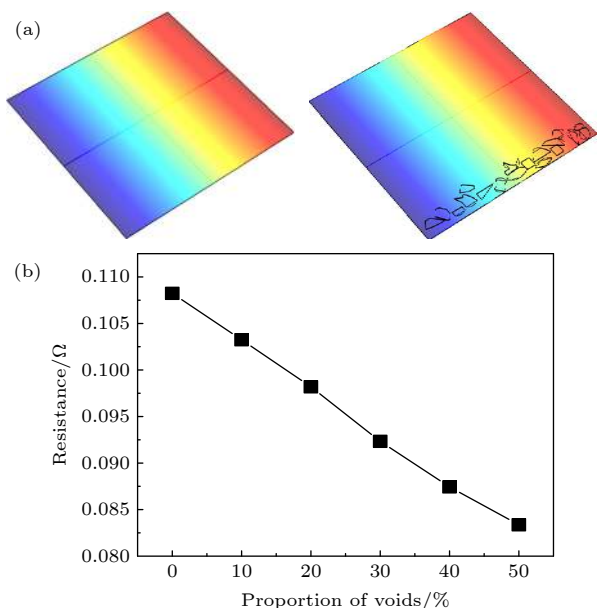


图 5 无孔隙及 10% 随机孔隙时背电极仿真图及其电阻 (a), 以及占比变化对其电阻值影响 (b)

Fig. 5. Simulation diagram of back electrode without and with 10% random pores and its resistance (a), and the influence of proportion change on its resistance (b).

由图 5(a) 可知, 添加孔隙后的背电极电阻比无孔隙时要小. 原因是孔隙的加入导致电流通过的横截面积增加. 由图 5(b) 可知, 随着孔隙占比的增加, 其阻值几乎线性减小, 且每增加 10% 的孔隙, 其阻值大约减少 0.005  $\Omega$  左右, 减少比例大约为 5%. 因此, 预测每增加 10% 的孔隙, 提升电池 PCE 大约 5%.

进一步分析上述最优结构的相对性能. 由于多孔孔隙结构背电极中占空比的差别, 导致不能通过阻值大小比较来直接判断结构的优劣. 为此, 需要计算出上述结构补充为矩形时的电阻, 然后通过各个结构阻值与该矩形结构的比值来判断结构的相对性能. 得出边缘间距为 1  $\mu\text{m}$ 、圆形半径为 0.5  $\mu\text{m}$  的蜂窝结构的比值为 1.3157, 边缘间距为 2  $\mu\text{m}$ 、圆形半径为 0.5  $\mu\text{m}$  蜂窝结构的比值为 1.1141, 50% 多孔隙结构的比值为 1.5440, 八边形结构的比值为 1.5871. 由此可知, 边缘间距为 2  $\mu\text{m}$ 、圆形间隙半径为 0.5  $\mu\text{m}$  的蜂窝结构比值最小, 性能最好.

### 3.3 厚度对背电极影响

研究边缘间距为 2  $\mu\text{m}$  圆形半径为 0.5  $\mu\text{m}$  的 Ag 薄膜蜂窝结构背电极. 图 6 是仿真蜂窝结构 (图 6(a)) 及背电极电阻-厚度变化趋势图 (图 6(b)).

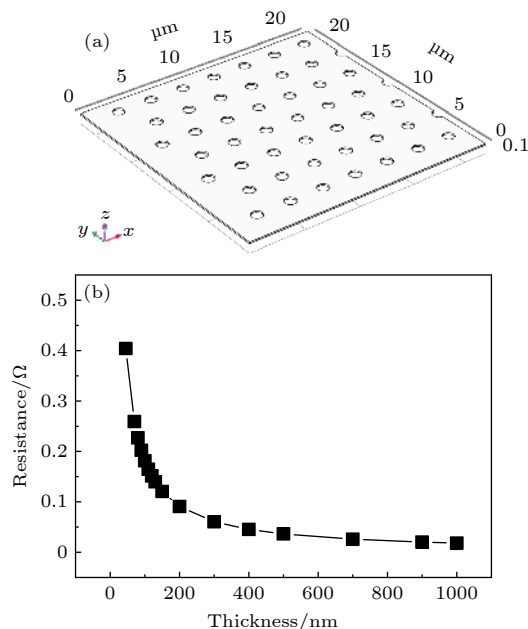


图 6 仿真蜂窝结构 (a) 及背电极电阻-厚度变化趋势图 (b)

Fig. 6. Simulated honeycomb structure (a) and back electrode resistance changing with its thickness (b).

由图 6 可知, 背电极厚度为 45 nm 时电阻最大, 1000 nm 厚度的背电极电阻最小; 且随着背电极厚度的增加, 电极电阻是在逐渐减小的. 在厚度为 45—200 nm 之间的电阻变化趋势最大, 下降得最为迅速, 而在 500—1000 nm 之间的电阻变化趋势最小, 下降得不明显.

实际上, 对于钙钛矿太阳能电池来说背电极的电阻越小越好, 因此理论上来说背电极的厚度是越大越好. 但在考虑制作成本及制作效率的条件下, 当背电极厚度达到 200 nm 以上时, 电阻的变化程度不明显, 性价比低; 而背电极厚度低于 100 nm 时, 电阻的变化幅度比较大, 很难精确地控制. 因此蜂窝结构的背电极厚度在为 100—150 nm 时其性能最优, 效果最佳, 此时电极的制备成本等较合适.

## 4 总结

本文从背电极材料、结构、厚度等三个方面进行了仿真研究, 并讨论了电极阻值对钙钛矿太阳能

电池性能的影响规律. 由结果可知, 相对于金属的电阻值, 金属的功函数对电池性能的影响更大. 不同的背电极结构除了其阻值会影响电池性能外, 还存在影响电池性能的其他因素; 蜂窝结构背电极中, 考虑制作难易程度的情况下, 得出圆形半径约等于边缘间距时性价比最高; 预测每增加 10% 的孔隙, 电池效率大约提升 5%; 背电极的阻值随着厚度的增加而减小, 考虑工艺、成本等因素的前提下, 得出最佳的厚度应在 100—150 nm 之间.

## 参考文献

- [1] Jeong M, Choi I W, Go E M, Cho Y, Kim M, Lee B, Jeong S, Jo Y, Choi H W, Lee J, Bae J H, Kwak S K, Kim D S, Yang C 2020 *Science* **369** 1615
- [2] Jiang Q, Zhao Y, Zhang X, Yang X, Chen X, Chu Z, Ye Q, Li X, Yin Z, You J 2019 *Nat. Photonics* **13** 460
- [3] Ji C, Liang C J, You T F, He Z Q 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 028402 (in Chinese) [姬超, 梁春军, 由芳田, 何志群 2021 物理学报 **70** 028402]
- [4] Zhao Y, Wei J, Li, Y Yan, Zhou W, Yu D, Zhao Q 2016 *Nat. Commun.* **7** 10228
- [5] Walter D, Wu Y, Duong T, Peng J, Jiang L, Fong K C, Weber K 2018 *Adv. Energy Mater.* **8** 1701522
- [6] Zhu Y, Du C, Wang S, Ma R X, Wang C Y 2020 *Chin. J. Eng.* **42** 16 (in Chinese) [朱彧, 杜晨, 王硕, 马瑞新, 王成彦 2020 工程科学学报 **42** 16]
- [7] Peng Y C, Fu G S 2014 *New Concept Solar Cell* (Beijing: Science Press) pp38–39 (in Chinese) [彭英才, 傅广生 2014 新概念太阳能电池 (北京: 科学出版社) 第38—39页]
- [8] Wenham S R, Green M A, Watt M E, Corkish R 2007 *Applied Photovoltaics* (UK: Stylus Pub Llc) pp64–67
- [9] Lin C Y, Wan C C, Wei T C 2011 *Electrochim. Acta* **56** 1941
- [10] Fan Z J, Yi F S, Guo S, Bi Y G 2019 *Opt. Eng.* **58** 017103
- [11] Zhang H, Song K, Zhu L, Meng Q 2020 *Carbon* **168** 372
- [12] Hu Y, Adhyaksa G W P, DeLuca G, Simonov A N, Duffy N W, Reichmanis E, Bach U, Docampo P, Bein T, Garnett E C, Chesman A S R, Jumabekov A N 2019 *AIP Adv.* **9** 125037
- [13] Jian W, Xu R P, Li Y Q, Chi L, Chen J D, Zhao X D, Xie Z Z, Lee C S, Zhang W J, Tang J X 2017 *Adv. Energy Mater.* **7** 1700492
- [14] Yang W, Yang Z, Shou C, Sheng J, Yan B, Ye J 2020 *Sol. Energy* **201** 84
- [15] Behrouznejad F, Tsai C M, Narra S, Diau E, Taghavinia N 2017 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **9** 25204
- [16] Lin X, Chesman A S R, Raga S R, Scully A D, Jiang L, Tan B, Lu J, Cheng Y B, Bach U 2018 *Adv. Funct. Mater.* **28** 1805098
- [17] Jahantigh F, Ghorashi S M B 2019 *Nano* **14** 1950127
- [18] Saxena P, Gorji N E 2019 *IEEE J. Photovoltaics* **9** 1693
- [19] Wang Y, Cui Y, Wu Y Z 2019 *J. Synth. Cryst.* **48** 2075 (in Chinese) [王媛, 崔艳, 吴以治 2019 人工晶体学报 **48** 2075]
- [20] Che L J, Guo Y Q, Zou T Y, Sheng X, Lai W Z, Cai C B 2020 *J. Funct. Mater. Devices* **25** 43 (in Chinese) [车俐佳, 郭艳群, 邹谭圆, 盛鑫, 赖文志, 蔡传兵 2020 功能材料与器件学报 **25** 43]
- [21] Gan Y J, Mo P, Yang R Z, Rao J H, Li Q L, Bi X G 2021 *Prog. Solid State Electron.* **41** 53 (in Chinese) [甘永进, 莫沛, 杨瑞兆, 饶俊慧, 李清流, 毕雪光 2021 固体电子学研究进展 **41** 53]
- [22] Hou Q, Dorota B, Jumabekov A N, Wei L, Wang Z, Lin X, Hock N S, Tan B, Bao Q, Chesman A S R, Bing C, Bach U 2018 *Nano Energy* **50** 710
- [23] Zhou X, Bao C, Li F M, Gao H, Yu T, Yang J, Zhu W, Zou Z 2015 *RSC Adv.* **5** 58543
- [24] Mesquita I, Andrade L, Mendes A 2018 *Renewable Sustainable Energy Rev.* **82** 2471

# Influence of back electrode material, structure and thickness on performance of perovskite solar cells\*

Wang Jian-Tao<sup>1)2)</sup> Xiao Wen-Bo<sup>1)2)†</sup> Xia Qing-Gan<sup>1)2)</sup>  
Wu Hua-Ming<sup>1)2)</sup> Li Fan<sup>3)</sup> Huang Le<sup>4)</sup>

1) (*Key Laboratory of Nondestructive Testing, Ministry of Education, Nanchang Hangkong University, Nanchang 330063, China*)

2) (*Jiangxi Engineering Laboratory for Optoelectronics Testing Technology, Nanchang Hangkong University, Nanchang 330063, China*)

3) (*School of materials science and engineering, Nanchang University, Nanchang 330031, China*)

4) (*School of materials and energy, Guangdong University of technology, Guangzhou 450001, China*)

( Received 31 May 2021; revised manuscript received 9 August 2021 )

## Abstract

The back electrode is an important factor affecting the performance of perovskite solar cells. In this paper, the effects of back electrode material, structure and thickness on the performance of perovskite solar cells are studied by using COMSOL software. It is found that compared with the work function of the back electrode metal, its resistance has small effect on solar cell performance. Besides the back electrode structures affecting cell performance, there are other factors affecting cell performance. In terms of the back electrodes with honeycomb structure, considering the difficulty in fabricating, the best cost performance occurs when the radius of the circle is approximately equal to the edge spacing. It is predicted that the cell performance will be improved by about 5% in porosity with increasing 10% in the back electrode. The resistance of the back electrode decreases with its thickness increasing. Considering the process and cost, the optimal thickness should be between 100 nm and 150 nm.

**Keywords:** perovskite solar cell, back electrode, materials, structure, thickness

**PACS:** 84.60.Jt, 88.40.H-, 88.40.hj

**DOI:** 10.7498/aps.70.20211037

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12064027, 62065014, 62064007), the Open Fund of the Key Laboratory of Nondestructive Testing of Ministry of Education, China (Grant Nos. EW201908442, EW201980090), and the Training Plan for Academic and Technical Leaders of Major Disciplines in Jiangxi Province - Leading Talent Project, China (Grant No. 20204BCJ22002).

† Corresponding author. E-mail: [xiaowenbo1570@163.com](mailto:xiaowenbo1570@163.com)