物理学报 Acta Physica Sinica
Chinese Physical Society
Institute of Physics, CAS

基于GaSb/CdS薄膜热光伏电池的器件设计

吴限量 张德贤 蔡宏琨 周严 倪举 张建军

Device design of GaSb/CdS thin film thermal photovoltaic solar cells

Wu Xian-Liang Zhang De-Xian Cai Hong-Kun Zhou Yan Ni Jian Zhang Jian-Jun

引用信息 Citation: Acta Physica Sinica, 64, 096102 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.096102
在线阅读 View online: http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.096102
当期内容 View table of contents: http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I9

您可能感兴趣的其他文章
Articles you may be interested in

液氮冲击中锑化铟焦平面探测器形变研究
Deformation modeling of InSb IRFPAs under liquid nitrogen shock
物理学报.2014, 63(15): 156101 http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.156101

纯铜[0 1 1]倾侧型非共格?$_3$晶界结构稳定性分子动力学模拟研究
Molecular dynamics simulation on the struatural stability of [0 1 1] tilt incoherent ?$_3$ gain boundaries in pure copper
物理学报.2013, 62(15): 156102 http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.156102

金属有机化学气相沉积法生长条件对AlN薄膜面内晶粒尺寸的影响
Influence of growth conditions on the lateral grain size of AlN film grown by metal-organic chemical vapor deposition
物理学报.2013, 62(8): 086102 http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.086102

InSb面阵探测器法线方向力学参数选取研究
Mechanical parameters selection in InSb focal plane array detector normal direction
物理学报.2012, 61(22): 226103 http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.226103

羟基碳纳米管吸附SF_6放电分解组分的DFT计算
DFT calculations on the adsorption of component SF_6 decomposed under partial discharge onto carbon nanotubes modified by -OH
物理学报.2012, 61(15): 156101 http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.156101

基于GaSb/CdS薄膜热光伏电池的器件设计*

吴限量[1)] 张德贤[1)] 蔡宏琨[1)†] 周严[4)] 倪牮[2)3)] 张建军[2)3)]

1) (南开大学电子信息与光学工程学院电子科学与工程系, 天津 300071)

2) (南开大学电子信息与光学工程学院光电子薄膜器件与技术研究所, 天津 300071)

3) (天津市光电子薄膜器件与技术重点实验室, 天津 300071)

4) (天津商业大学理学院, 天津 300134)

(2014 年 10 月 13 日收到; 2014 年 12 月 2 日收到修改稿)

基于 GaSb 薄膜热光伏器件是降低热光伏系统成本的有效途径之一, 本文主要针对 GaSb/CdS 薄膜热光伏器件结构进行理论分析. 采用 AFORS-HET 软件进行模拟仿真, 分析 GaSb 和 CdS 两种材料各自的缺陷态密度、界面态对电池性能的影响. 根据软件模拟可以得知, 吸收层 GaSb 的缺陷态密度以及 GaSb 与 CdS 之间的界面态密度是影响电池性能的重要因素. 当 GaSb 缺陷态增加时, 主要影响电池的填充因子, 电池效率明显下降. 而作为窗口层的 CdS 缺陷态密度对电池性能影响不明显, 当 CdS 缺陷态密度上升 4 个数量级时, 电池效率仅下降 0.11%.

关键词: 锑化镓、硫化镉、热光伏

PACS: 61.43.Bn, 61.72.uj, 61.82.Fk **DOI:** 10.7498/aps.64.096102

1 引 言

一个完整的热光伏系统包括热辐射器、光学滤波器和热光伏电池三个主要部分, 其中热光伏电池是系统的核心部分. 在热光伏 (thermophotovoltaic, TPV) 光电转换系统中, 太阳光不是直接照射到电池表面, 而是照到一个热辐射器上利用其热能使其加热到一定的温度, 再由光电池将其发出的辐射能转化为电能 [1,2]. 热光伏系统中热辐射器和光电池之间还插有一个滤波片, 只允许能量略大于光电池半导体材料带宽的光子通过. 低能量和高能量光子都被反射回热辐射体, 被热辐射体吸收后再利用. 热光伏太阳能电池的优势在于理论上它可以利用全部太阳光辐射, 从而能避免普通单结电池中的能量损失, 因此热光伏被列为第三代光伏技术.

目前 GaSb 热光伏电池主要以晶体 GaSb 为主, 在 n 型 GaSb 圆晶片上进行 Zn 扩散, 就可以得到 GaSb 同质结电池 [1−6]. 这种体电池对 GaSb 衬底要求较高, 并且由于 GaSb 圆晶片本身价格比较昂贵, 无疑会增加电池的成本. 另外一种热光伏电池是通过单晶硅或 III-V 族 (如 InGaAs) 半导体为衬底, 以分子束外延技术生长 GaSb 薄膜. 这是研究 GaSb 薄膜电池的热点之一 [3], 但需要解决衬底材料与 GaSb 的晶格失配度问题.

异质结 GaSb 体电池成本较高, 因此只处于实验室研究阶段. 本文提出的 GaSb 薄膜器件是降低热光伏器件成本的有效途径之一. 和体材料相比, GaSb 薄膜质量较差, 必然会对电池性能造成不良影响. 本文以模拟电池各个组件的缺陷态密度为主, 并联系实际工艺情况, 为实际制备热光伏器件提供理论指导.

* 国家高技术研究发展计划 (863 计划)(批准号: 2011AA050513)、教育部留学回国人员科研启动基金和天津市教委项目 (批准号: 20100314) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: caihongkun@nankai.edu.cn

© 2015 中国物理学会 Chinese Physical Society

2 器件结构设计

GaSb的禁带宽度为0.72 eV, 具有较高的吸收系数、高的电导率和晶化率, 是制备热光伏电池的重要材料之一[4]. 但GaSb晶片用于热光伏技术中成本较高. 一种简单的降低成本的方法就是采用真空共蒸发技术制备GaSb薄膜[5−7]. GaSb薄膜为p型材料, 形成器件需要另外选择n型材料. n型材料作为窗口层需要宽带隙、高透过率, 同时与GaSb薄膜接触需要晶格、能带等方面匹配, 同时还要考虑制备工艺的可行性. 我们可以选择CdS薄膜作为GaSb电池的n型半导体材料. CdS的禁带宽度为2.4 eV, 有较高的光透过率和较低的光吸收率, 适合作为热光伏电池的n型窗口层[8−11], 同时CdS的功函数与GaSb接近, 这意味着两者组成pn结时导带带阶不会太大, 由于GaSb这种热光伏材料禁带宽度低, 因此制成的电池器件开路电压较小, 选择与GaSb功函数接近的材料可以尽量减小这一方面的缺点. 从工艺角度上说, CdS采用低温化学水浴法制备, 反应温度在80 °C左右, 不会影响已经沉积的GaSb薄膜性质, 而且该方法有较高的表面覆盖率, 有利于减薄CdS的厚度, 进一步增加光透过率[12].

如果选择其他n型材料, 无论从工艺还是从理论角度都不如CdS显得合适: 1) n型非晶硅, 非晶硅最大的缺点就是功函数与GaSb匹配度较差, 这直接导致输出开路电压很低, 从工艺角度上说, 非晶硅多用PECVD方法制备, 腔室中的辉光放电容易导致GaSb薄膜部分分解, 从而破坏吸收层性能. 2) n型Ge, 锗的禁带宽度太低, 甚至小于GaSb的禁带宽度, 窗口层放置低带隙材料容易导致表面复合. 3) GaInAs等III-V族化合物, 种类有很多, 其中不乏很好的n型窗口层材料, 不过大多数采用MOCVD或者MBE方法, 对于体材料GaSb来说, 其生长方式更合适, 而从降低成本的角度出发不适宜采用更复杂的工艺.

基于以上理论和实际制备工艺, 设计GaSb/CdS热光伏薄膜电池器件结构如图1所示, 此结构采用最简单的pn结结构. 在刚性或柔性(PI和不锈钢箔)衬底上生长金属银作为电池的下电极, 在其上继续生长GaSb作为吸收层, 然后以CdS作为窗口层, 采用ITO点作为接触上电极(见图1 (a)). 同时, GaSb/CdS可采用倒结构方式, 衬底采用ITO玻璃, 光从ITO玻璃背面射入(见图1 (b)).

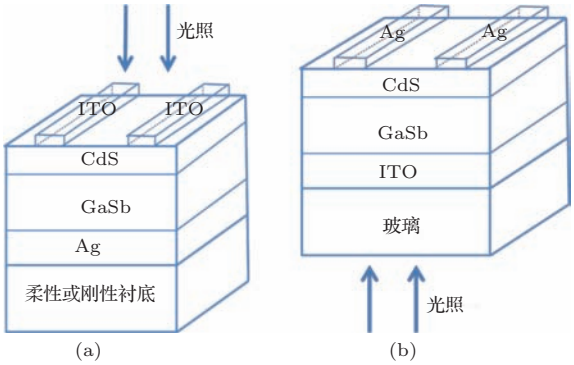

图1 GaSb/CdS电池器件结构(光从上面照射) (a) 正结构; (b) 倒结构

Fig. 1. Structure of GaSb/CdS thermo photovoltaic cell. (a) Structure with light shining on front; (b) structure with light on back.

3 模拟参数

AFORS-HET软件由德国亥姆霍兹柏林材料与能源研究中心(HZB)开发, 专门应用于模拟计算异质结太阳电池, 可自由建立异质结模型, 任意定义半导体材料特性以及结构中层与层之间的界面态, 具有很高的精确度.

表1 GaSb/CdS电池模拟材料特性参数

Table 1. Parameter of GaSb and CdS materials.

	GaSb	CdS
介电常数	14.4	10
电子亲和势/eV	4.06	4.45
禁带宽度/eV	0.726	2.4
导带有效态密度/cm^{-3}	2.1×10^{17}	2.2×10^{18}
价带有效态密度/cm^{-3}	1.8×10^{19}	1.8×10^{19}
电子迁移率/(cm^2/V·s)	50	34
空穴迁移率/(cm^2/V·s)	16	10
受主掺杂浓度/cm^{-3}	1×10^{17}	0
施主掺杂浓度/cm^{-3}	0	1×10^{18}
电子热扩散速率/(cm/s)	5.8×10^{5}	1×10^{7}
空穴热扩散速率/(cm/s)	2.1×10^{5}	1×10^{7}
密度/(g/cm^3)	5.61	4.82

表1列出了模拟计算所需的薄膜材料参数, 其中禁带宽度、迁移率和薄膜厚度由实验室制备GaSb和CdS薄膜测试获得, 其他参数由文献[7]获

得, 具体如表1所示. 因实际制备过程中各层薄膜光电特性和接触特性是决定器件性能的主要因素, 而这些特性都受材料和界面缺陷的直接影响, 因此本文主要讨论了材料和界面缺陷特性对GaSb/CdS电池的影响.

4 结果与分析

4.1 GaSb薄膜缺陷态对GaSb/CdS薄膜电池性能的影响

添加GaSb缺陷态, 设置为高斯分布, 缺陷态平均能量为0.35 eV, GaSb缺陷态密度变化范围为10^{16}—10^{20} cm^{-3}, 绘制各个缺陷态密度下器件内部的载流子复合率分布曲线如图2所示. 可以看到, 随着缺陷态密度的上升, GaSb材料在接近于界面的位置复合率明显增大. 当缺陷态密度数量级为10^{15}—10^{16} cm^{-3}范围时, 复合速率很低, 接近于零; 但当缺陷态密度数量级为10^{19}—10^{20} cm^{-3}范围时, 复合速率急剧上升, 此时甚至已经高于载流子的产生速率(产生率约为10^{23} cm^{-3}·s^{-1}). 这种变化趋势可以用器件的能带图来解释, 图3为GaSb缺陷态密度分别为10^{16} cm^{-3}和10^{19} cm^{-3}时, 光照条件下器件能带图. 由两幅图比较可以得出, 当GaSb缺陷态密度增大时, 电子准费米能级逐渐下降, 甚至与空穴准费米能级发生重合, 这说明大部分电子已经从导带跃迁回价带, 即电子空穴发生复合, 这无疑增大了GaSb/CdS界面复合速率.

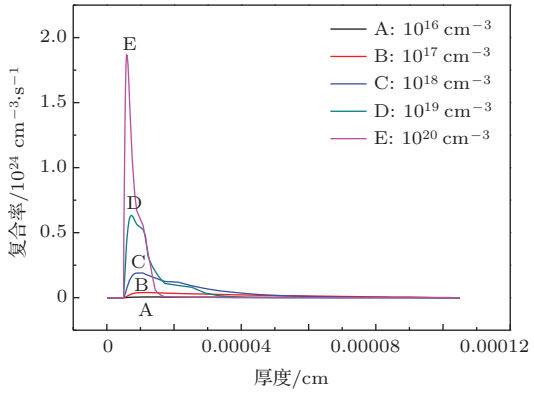

图2 (网刊彩色) GaSb缺陷态密度与载流子复合速率的关系

Fig. 2. (color online) Carrier recombination rate as a function of GaSb defect density.

计算GaSb/CdS电池参数, 绘制各个参数与缺陷态密度的关系曲线, 得到结果如图4所示. 当GaSb缺陷态密度为10^{15}—10^{16} cm^{-3}时, 由于远小于表1设定的导带有效态密度, 对电池效率影响较小. 而当缺陷态密度在10^{17} cm^{-3}以上, 甚至大于导带有效态密度时, 效率会有明显下降, 主要影响因素体现在开路电压和填充因子. 载流子复合率的增加, 导致扩散长度减小, pn结空间电荷区密度下降, 内建电场减弱, 因此开路电压减小. 同时缺陷态增加, 导致载流子引出的概率下降, 输出功率降低, 因此填充因子也下降. 随着缺陷态密度进一步增大, 甚至高于价带有效态密度时, 短路电流也会急剧下降, 此时会严重影响电池性能.

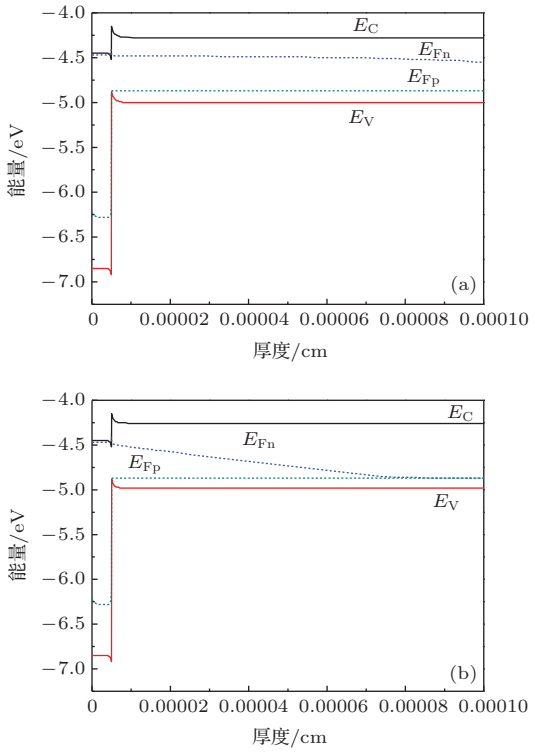

图3 光照条件下具有不同GaSb缺陷态密度的器件结构的能带图 (a) GaSb缺陷态密度为10^{16} cm^{-3}; (b) GaSb缺陷态密度为10^{19} cm^{-3}

Fig. 3. Energy band of structure with different GaSb defect density in lighting conditions. (a) GaSb defect density is 10^{16} cm^{-3}; (b) GaSb defect density is 10^{19} cm^{-3}.

半导体材料中不仅有禁带中呈现高斯分布的缺陷态, 其导带与禁带能量边界还存在带尾态. 在GaSb薄膜材料缺陷态的高斯分布的基础上添加态密度为同一数量级的导带带尾态和价带带尾态, 则GaSb材料的缺陷态密度可以表示成如图5所示, 其中两条直线为带尾态密度函数, 左边直线表示价带带尾态, 右边表示导带带尾态, 禁带内高斯分布的平均缺陷态密度仍设置为10^{16} cm^{-3}. 图6为改变带尾态密度后对应的电池性能, 可以看到添加带尾态后, 电池参数变化规律与高斯分布型缺陷态基

本类似, 随着带尾态密度的增加, 开路电压和填充因子均有一定的下降, 只是下降的幅度小于高斯缺陷态对电池的影响. 当带尾态密度为10^{19} cm^{-3}数量级时, 带尾态密度接近于GaSb导带有效态密度, 短路电流也会有一定程度的下降. 这种现象可以用图7的能带图来解释, 可以看到当带尾态密度处在10^{19} cm^{-3}数量级时, GaSb边缘处导带准费米能级和价带准费米能级已经重合, 电子空穴的复合速率很大, 使得短路电流降低.

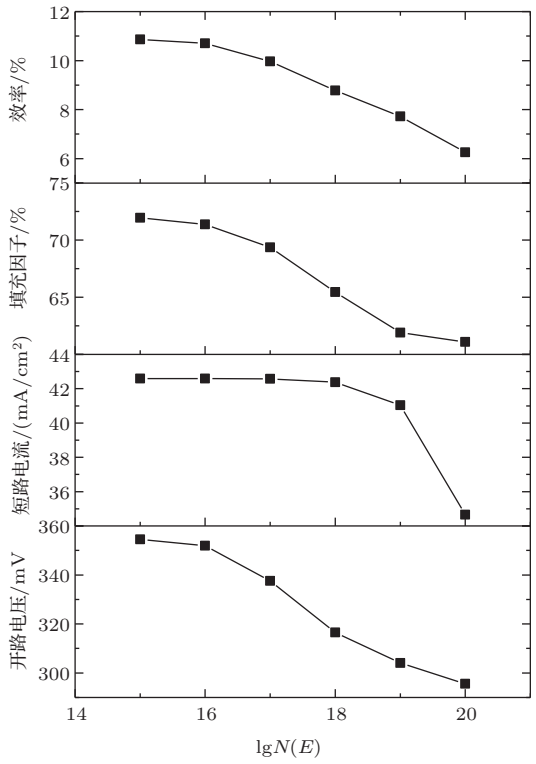

图4 缺陷态密度与电池性能的关系, 横坐标取常用对数

Fig. 4. GaSb/CdS Cell performance as a function of GaSb defect density.

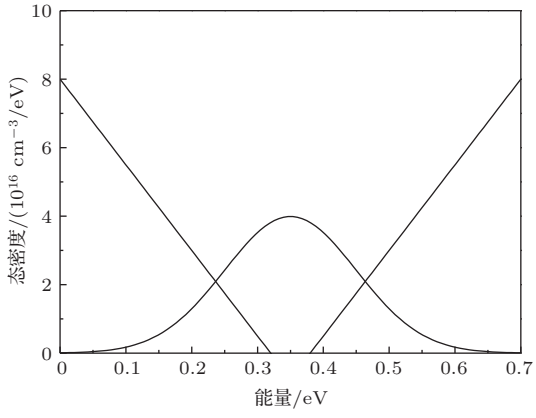

图5 具有高斯缺陷态和带尾态的GaSb薄膜材料的缺陷态密度

Fig. 5. Defect density of GaSb adding to band tail state.

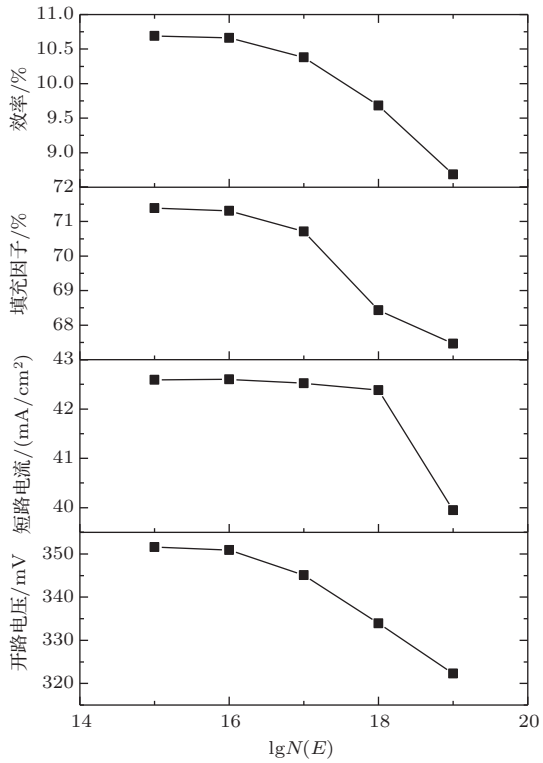

图6 带尾态密度对GaSb/CdS电池性能的影响

Fig. 6. GaSb/CdS cell performance as a function of band tail density.

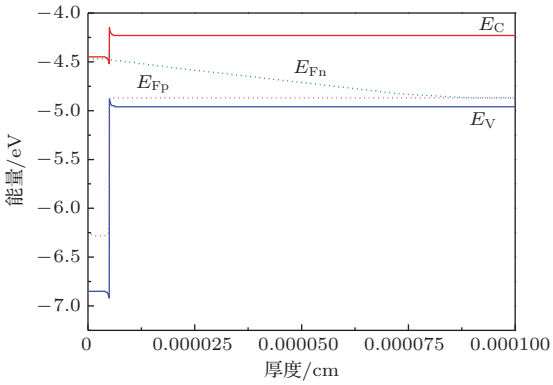

图7 带尾态密度为10^{19} cm^{-3}数量级时GaSb/CdS结构的光照能带图

Fig. 7. Energy band of GaSb/CdS structure when band tail density is 10^{19} cm^{-3}.

在GaSb缺陷态密度较低的情况下, 作为主要吸收层的GaSb应该尽量增加厚度, 增加电池对光的吸收率. 然而在高缺陷态下, GaSb厚度增大会进一步影响界面复合率. 图8给出了在GaSb缺陷态密度为10^{19} cm^{-3}数量级时, GaSb/CdS电池性能随GaSb厚度的变化关系. 由图中可以看到, 当GaSb厚度大于1000 nm时, 填充因子有少许下降, 这是在大缺陷态密度下, 厚度增大导致复合率增高所致. 厚度小于1000 nm时, 电池参数基本不

变, 因此实际工艺中, GaSb 厚度应维持在 1000 nm 左右.

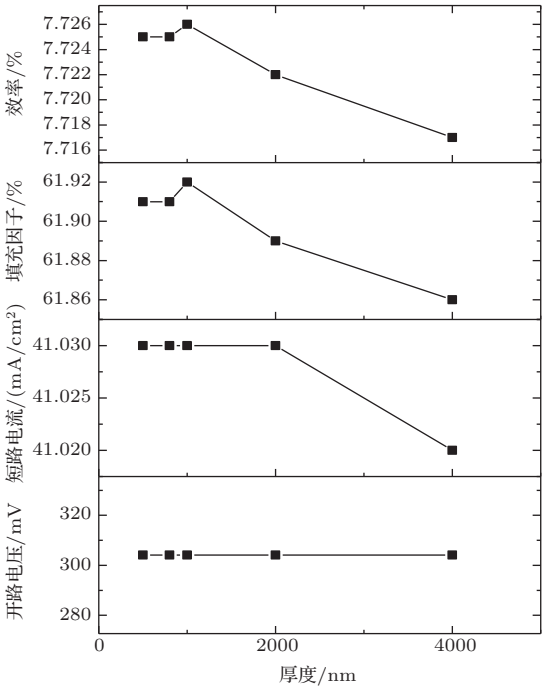

图 8 GaSb/CdS 电池性能随具有高缺陷态密度的 GaSb 厚度的变化

Fig. 8. GaSb/CdS cell performance as a function of GaSb thickness.

4.2 CdS 薄膜缺陷态对 GaSb/CdS 薄膜电池的性能影响

在考察 CdS 缺陷态对电池性能的影响之前, 将 GaSb 中的缺陷态密度仍然设置为 10^{16} cm^{-3}. 设置 CdS 中缺陷态分布 (包括带尾态), 得到 CdS 材料中缺陷态密度与电池效率的关系如图 9 所示. 由图中可以看出, CdS 缺陷态密度增大, 电池各个参数变化很小, 当 CdS 缺陷态密度提高 4 个数量级的情况下, 电池效率仅仅下降 0.11%. CdS 作为窗口层, 厚度很薄, 光学透过率高, 吸收率低, 因此即使在缺陷态密度很高的情况下, CdS 内部仍有较低的载流子复合速率, 使得电池最大输出功率变化量很小. 我们可以看到, 在 CdS 缺陷态密度升高时, 填充因子反而有少许上升, 这是因为此时短路电流和开路电压的降低显著, 导致直观上填充因子改善. 总体来说, CdS 薄膜材料中的缺陷态对电池效率影响很小.

4.3 界面缺陷态对 GaSb/CdS 薄膜电池的性能影响

使用共蒸发法技术制备 GaSb 薄膜存在大量的的表面缺陷态 [13], 而在化学水浴过程中 S^{2-} 离子能有效地饱和 GaSb 表面的悬键, 形成 Ga—S 键和 Sb—S 键, 起到钝化表面的作用. 由于 GaSb 表面形成一定的 S 掺杂, 导致在界面处形成一层 GaSb 的反型过渡带, 即存在一层 n 型 GaSb. 因此可以将 GaSb 与 CdS 的界面分为三部分: GaSb 界面区, GaSb 反型区和 CdS 界面区. 重新设计电池结构, 将电池改为 p-GaSb/n-GaSb/CdS 结构, 其中反型层 n-GaSb 厚度设置为 10 nm. 该结构的能带如图 10 所示, 与图 1 (a) 作比较, CdS 与 GaSb 之间的价带边失调值明显增大, 量子隧穿效应减弱, 能有效地减少界面复合, 经计算得到该结构开路电压 $V_{\rm OC}$ = 352.6 mV, 短路电流 $J_{\rm SC}$ = 42.12 mA/cm^2, 填充因子 FF = 74.81%, 电池效率为 11.11%, 虽然开路电压和短路电流有少许下降, 但填充因子有较明显提升, 使得电池效率增大.

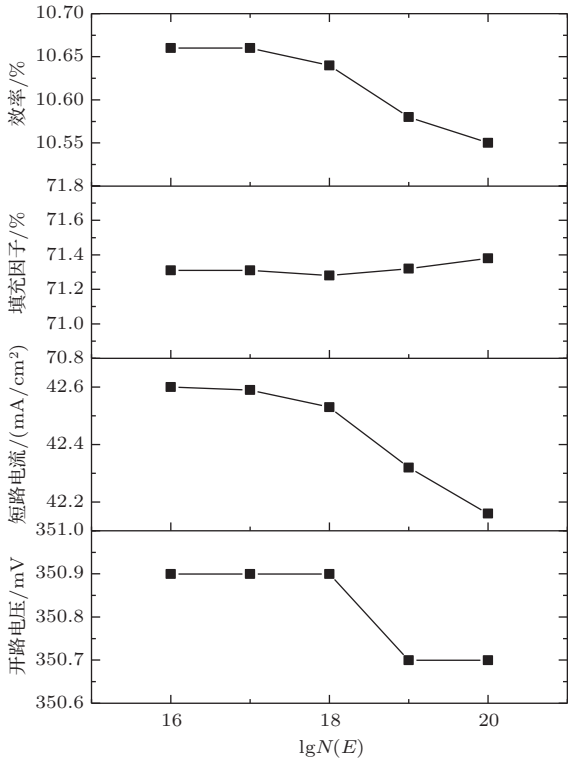

图 9 CdS 材料含有缺陷态时 GaSb/CdS 电池的性能参数

Fig. 9. GaSb/CdS cell performance as a function of CdS defect density.

忽略 p-GaSb 和 CdS 材料内部的缺陷态, 改变界面 n-GaSb 的缺陷态密度得到电池性能如图 11 所示.

由图 11 中可以很明显的看出, GaSb/CdS 的界面态会严重影响电池性能, 当反型层缺陷态密度增大时, 主要表现为开路电压和填充因子降低, 但随着界面态密度进一步提高, 短路电流也会下

降, 此时电池效率急剧下降. 当界面态密度增加到10^{20} cm^{-3}时, 效率下降到几乎为0, 这意味着p-GaSb/n-GaSb/CdS已经表现为一定的电阻特性.

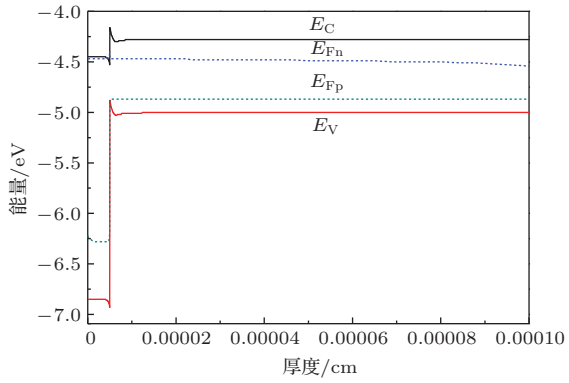

图10 p-GaSb/n-GaSb/CdS结构能带图

Fig. 10. PN junction of p-GaSb/n-GaSb/CdS structure.

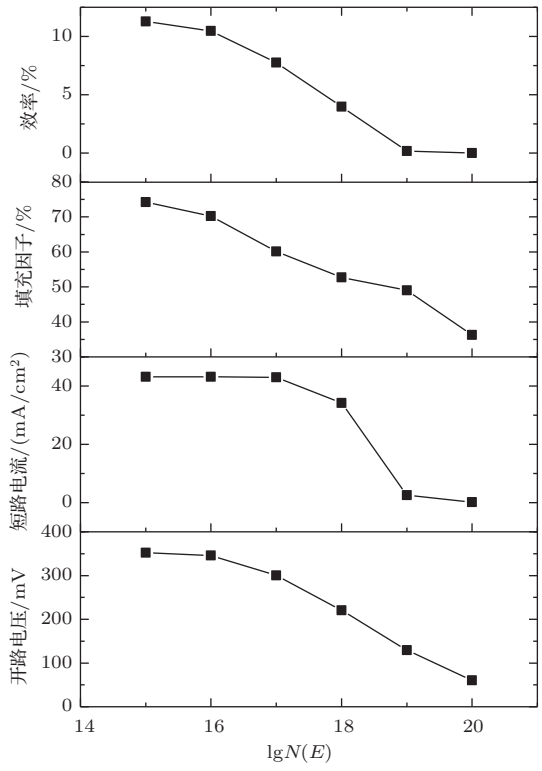

图11 界面n-GaSb的缺陷态密度对p-GaSb/n-GaSb/CdS结构的影响

Fig. 11. p-GaSb/n-GaSb/CdS cell performance as a function of defect density of n-GaSb interface.

4.4 倒结构GaSb/CdS器件

采用图1 (b)中的倒结构模型, 即在ITO玻璃上生长GaSb和CdS, 其中GaSb和CdS的界面仍采用上文提到的p-GaSb/n-GaSb/CdS的反型层结构经计算得到该结构开路电压V_{OC} = 352.3 mV, 短路电流J_{SC} = 42.28 mA/cm^2, 填充因子FF = 76.19%, 电池效率为11.35%. 与正结构GaSb/CdS器件最高效率相比, 倒结构GaSb/CdS器件效率有少许增大. 这种倒结构对光的利用率更大, 主要是因为CdS表面光反射率较高, 而玻璃反射率低, 因此倒结构能减少光损失. 实际上, 在玻璃薄膜可沉积光学滤波材料, 将波长较长不能被GaSb吸收的光反射到热辐射器中, 重新加以应用, 效率还可以进一步提高.

5 结 论

在GaSb/CdS电池结构中, 缺陷态影响其电池效率的主要分为两个方面, 一个是吸收层GaSb的缺陷态密度, 当GaSb中缺陷态密度远小于导带有效态密度时, 电池效率基本不受影响, 当GaSb中缺陷态密度与导带有效态密度处在同一数量级甚至高于导带有效态密度时, 电池效率才会有明显下降. 由于薄膜材料缺陷态本来就和体材料存在较大的差异, 所以应尽可能提高GaSb的质量, 制备时应以高电导率, 高迁移率, 和大晶粒尺寸为主. 另外一个影响因素是两种材料的反型层密度, 界面态密度升高, 会使电池效率急剧下降, 当界面态密度为10^{20} cm^{-3}时, 界面复合过大, 直接导致效率接近于零, 因此, 在电池器件完成后, 后续退火工艺显得十分重要. 而窗口层CdS的缺陷态对电池性能影响很小, 当CdS缺陷态密度提高4个数量级时, 电池效率仅仅下降0.11%. 如果采用倒结构, 能进一步增加光利用率, 从而提高效率.

参考文献

[1] Cody G D 1980 *Conference in the 4th NREL on the Thermo photovoltaic Generation of Electricity* New York, America, August 17–20 1980 p58

[2] Chen X, Han Y G, Li Q, Xuan Y M 2007 *Study on characteristics of thermo photo voltaic system Advanced Technology of Electrical Engineering and Energy* **26** 41 (in Chinese) [陈雪, 韩玉阁, 李强, 宣益民 2007 热光伏系统基本特性研究电工电能新技术 **26** 41]

[3] Toyota H, Okabe A, Endoh T, Jinbo Y, Uchitomi N 2013 *Journal of Crystal Growth* **378** 129

[4] Stollwerck G, Sulima O V, Bett A W 2000 *IEEE Trans Electron Devices* **47** 448

[5] Bett A W, Sulima O V 2003 *Semiconductor Science and Technology* **18** 184

[6] Kunitsyna E V, L'vova T V 2010 *Applied Surface Science* **256** 5644

[7] Yang X D 2008 *Ph. D. Dissertation* (Nanjing: Nanjing University of Science and Technology) (in Chinese) [杨兴典 2008 博士学位论文 (南京: 南京理工大学)]

[8] Oladeji I O, Chow L, Liu J R 2000 *Thin Solid Films* **359** 154

[9] Li B, Feng L H, Zhang J G 2003 *Journal of Semiconductors* **24** 837

[10] Vigil G O, Ximello J N, Aguilar H J 2006 *Semicond. Sci. Tchnol.* **21** 76

[11] Fraas L M, Gee.J M, Emery K A 1990 *IEEE Photovoltaic Specialist Conference* New York, America, June 7–9 1990 p190

[12] Chavan A, Chandola A, Sridaran 2006 *Appl. Phys.* **100** 1

[13] Hu H G, Wang Z, Sua B F 2004 *Appl. Phys.* **332** 286

Device design of GaSb/CdS thin film thermal photovoltaic solar cells*

Wu Xian-Liang[1)] Zhang De-Xian[1)] Cai Hong-Kun[1)†] Zhou Yan[4)]
Ni Jian[2)3)] Zhang Jian-Jun[2)3)]

1) (*Department of Electronic Science and Technology, Electronic Information and Optical Engineering, Nankai University, Tianjin 300071, China*)

2) (*Institute of Photoelectronic Thin Film Devices and Technology, Nankai University, Tianjin 300071, China*)

3) (*The Key Laboratory of Photoelectronic Thin Film Devices and Technology, Tianjin 300071, China*)

4) (*School of Science, Tianjin University of Commerce, Tianjin 300134, China*)

(Received 13 October 2014; revised manuscript received 2 December 2014)

Abstract

Enthusiasm in the research of thermo-photovoltaic (TPV) cells has been aroused because the low bandwidth semiconductors of III-V family are coming into use. GaSb, as a member of III-V family, has many merits such as high absorption coefficient, and low band gap of 0.725 eV at 300 K etc.. At present thermo-photovoltaic cells are usually based on GaSb wafer, and it can be manufactured by the vertical Bridgeman method. Thermo-photovoltaic cell based on GaSb films is one of the effective ways to reduce the cost of the thermo-photovoltaic system. GaSb polycrystalline films can be grown by physical vapor deposition (PVD) which has advantages in using fewer materials and energy, and also in doing little harm to the environment. Because of residual acceptor defects $V_{\mathrm{Ga}}\mathrm{Ga}_{\mathrm{Sb}}$, GaSb thin film is usually of p-type semiconductor. So we should find n-type semiconductor material to form pn junction. We choose CdS as the emission layer of a cell structure. CdS belongs to n-type semiconductor with a narrow band gap of 2.4 eV and high light transmissivity. CdS thin film grown by chemical bath deposition (CBD) has passivation properties for GaSb. CdS layers can remove native oxides from GaSb surface and reduce the surface recombination velocity of GaSb. This paper focuses on theoretical analysis of GaSb/CdS thin film photovoltaic structure. By way of AFORS-HET simulation, we analyze the defect state density and interface density in GaSb and CdS, and their effects on cell performance. According to the simulation, the defect density in GaSb absorption layer is the very important factors that affect cell performance. When GaSb defect increases, the major factor to affect the cell is the fill factor that leads to low efficiency. On condition that there exists high GaSb defect density, the thickness of GaSb should be kept at 1000 nm. GaSb with a thickness above 1000 nm can bring about a high recombination rate, which reduces the efficiency of the cell. As an emission layer, the defect density in CdS should not affect the cell performance obviously. When the increase of CdS defect density is of four orders of magnitude, the cell efficiency is only decreased by 0.11%. In order to demonstrate the interface between GaSb and CdS, we use an inversion layer n-GaSb according to the passivation properties of CdS thin film grown on GaSb. When the defect density of inversion layer increases, the efficiency of the cell will decrease rapidly. And the GaSb/CdS structure will act as a resistance when the defect density in the inversion layer reaches 10^{20} cm^{-3}. So the defect density in GaSb layer and the interface is the very factor to affect thermo-photovoltaic performance.

Keywords: GaSb, CdS, thermo-photovoltaic

PACS: 61.43.Bn, 61.72.uj, 61.82.Fk **DOI:** 10.7498/aps.64.096102

* Project supported by the National High Technology Research and Development Program of China (Grant No. 2011AA050513), the Ministry of Education Scientific Research Foundation for Returned Overseas Students, and the Tianjin Municipal Education Commission of China (Grant No. 20100314).

† Corresponding author. E-mail: caihongkun@nankai.edu.cn