

单轴应变对 Sb_2Se_3 空穴迁移率的影响*张冷¹⁾²⁾ 沈宇皓²⁾ 汤朝阳³⁾ 吴孔平¹⁾ 张鹏展¹⁾ 刘飞¹⁾ 侯纪伟^{3)†}

1) (金陵科技学院电子信息工程学院, 南京 211169)

2) (南京大学物理学院, 固体微结构国家实验室, 南京 210093)

3) (南京工业大学数理科学学院, 南京 211816)

(2024 年 1 月 26 日收到; 2024 年 2 月 28 日收到修改稿)

硒化锑 (Sb_2Se_3) 是一种物相简单、元素丰富、经济友好的太阳电池吸收层材料, 具有广阔的应用前景. 然而, Sb_2Se_3 较弱的导电性成为了限制电池器件性能的重要因素. 迁移率是材料与器件的重要电学参数, 应变可以改变载流子迁移率, 因此, 研究应变对 Sb_2Se_3 的载流子迁移率特性影响具有实际意义. 本文通过密度泛函理论和形变势理论, 系统研究了单轴应变对 Sb_2Se_3 能带结构、禁带宽度、等能面、有效质量的影响, 分析了沿着 x , y , z 方向的三种单轴应变对载流子沿着 x , y , z 方向的迁移率 μ_x , μ_y , μ_z 的影响. 研究发现, 对于无应变的 Sb_2Se_3 , μ_x 远大于 μ_y 和 μ_z , 实验上应该将 x 方向作为 Sb_2Se_3 的特定生长方向 (即内建电场方向). 综合应变对带隙、等能面、分态密度及迁移率的影响, 本研究认为当应变沿着 y 轴方向, 且压应变为 3% 的时候, 能获得最佳性能的 Sb_2Se_3 太阳电池吸收层材料.

关键词: Sb_2Se_3 , 迁移率, 形变势, 应变工程

PACS: 71.15.Mb, 51.50.+v, 71.70.Fk

DOI: 10.7498/aps.73.20240175

1 引言

薄膜太阳电池吸收层厚度仅 1—2 μm , 可应用于柔性电池移动能源、光伏建筑一体化及可穿戴电子设备等, 具有广阔的应用空间. 目前产业化应用的薄膜电池有碲化镉 (CdTe)、铜钢镓硒 (CIGS) 和钙钛矿^[1] 太阳电池, 但是镉元素有毒, 碲资源丰度很小, 钢和镓是稀有元素, 钙钛矿有性能不稳定的问题, 使得薄膜电池成本居高不下, 故而在规模化生产和应用上受到很大限制. 硒化锑 (Sb_2Se_3) 材料具有吸收系数大、禁带宽度合适、物相简单、原材料丰度高、便宜无毒的优势, 非常有潜力拓宽目前的薄膜太阳电池应用市场^[2-4]. 近十年来, Sb_2Se_3

太阳能电池的最高转换效率逐年攀升, 目前世界纪录效率达到了 10.57%^[5,6]. 然而, 这距离产业化所要求的转换效率仍有较大距离. 限制 Sb_2Se_3 电池性能的关键因素之一是其弱导电性. 导电性主要与载流子浓度和迁移率相关. 迁移率反映了载流子在电场下移动的速率, 是衡量半导体导电能力的重要物理指标, 也决定了太阳电池等电子器件的工作效率. Sb_2Se_3 材料的结构呈带状, 由许多一维的 $(\text{Sb}_4\text{Se}_6)_n$ 纳米带通过范德瓦耳斯力堆叠而成. 因为这样的结构, Sb_2Se_3 的载流子迁移率呈现显著的各向异性. 通过调节工艺条件, 将 pn 结的内建电场方向与载流子传输能力强的方向保持一致, 有望提高载流子的输运效率. 因此, 对 Sb_2Se_3 的迁移率进行系统研究与调控具有重要意义.

* 国家自然科学基金 (批准号: 61904071, 52002170)、江苏省研究生科技与实践创新计划 (批准号: KYCX23_1429) 和江苏省高校青蓝工程资助的课题.

† 通信作者. E-mail: jwhou@njtech.edu.cn

应变工程是调控半导体电学性质的重要方法, 其在提高硅基晶体管的迁移率方面的应用已有数十年^[7-9], 在其他材料的调控上亦有报道. Jia 等^[10]对氮化镓施加 1.5% 的张应变, 发现其电子迁移率增加约 10%. Datye 等^[11]对单层 MoS₂ 晶体管施加 0.7% 的张应变, 使得通态电流与迁移率翻倍. Ge 等^[12]对单层 GeTe 施加单轴应变, 可使电子迁移率提高至弛豫态下的上百倍.

当前对于 Sb₂Se₃ 载流子输运的调控研究还很少, 基于此, 本文系统研究了单轴应变对能带结构、禁带宽度、等能面、有效质量的影响, 分析了沿着 x, y, z 方向的三种单轴应变对载流子沿着 x, y, z 方向的迁移率影响, 相关结论可以为设计高性能的太阳能电池器件提供参考.

2 计算方法与模型

本研究采用 VASP (Vienna *ab initio* simulation package) 中的第一性原理计算方法进行探究, 通过平面波基组展开电子波函数, 使用广义梯度近似 (GGA) 下的 PBE 交换泛函来描述电子与电子之间的交换关联作用^[13]. 为确保计算的准确性, 进行了收敛性测试. 选择平面波截断能量 400 eV, 使用 $4 \times 3 \times 3$ 的 k 空间取样密度, 能保证总能量的收敛性. 迭代过程中, 收敛精度选择 1×10^{-6} eV/atom. 在布里渊区中, 选取了如下特殊 K 点^[14], 分别是 $G(0, 0, 0)$, $X(0.5, 0, 0)$, $Z(0, 0, 0.5)$, $U(0.5, 0, 0.5)$, $Y(0, 0.5, 0)$, $S(0.5, 0.5, 0)$, $T(0, 0.5, 0.5)$, $R(0.5, 0.5, 0.5)$, 能带结构中的布里渊区路径为 $G-X-Z-U-Y-S-T-R$. 研究的超胞模型结构如图 1 所示, 共 40 个原子, 其中包括 24 个硒原子和 16 个锑原子.

根据形变势理论, 结合玻尔兹曼输运理论下的弛豫时间近似和 DFT 能带结构理论的有效质量近似^[15,16], 可得三维材料体系的迁移率为

$$\mu_{\alpha}^{3D} = \frac{2\sqrt{2}\pi e \hbar^4 C_{\alpha}^{3D}}{3(k_B T)^{3/2} E_a^2 m_{\alpha}^{*5/2}}, \quad (1)$$

其中, e 代表单电荷电量, $\hbar$ 代表约化普朗克常数, C_{α}^{3D} 表示沿载流子输运方向 α 的弹性常数, k_B 代表玻尔兹曼常数, T 代表温度, E_a 是 α 方向的形变势能, m_{α}^* 是 α 方向的载流子有效质量. 为了直观表示, 本文只计算 x, y, z 三个方向上的载流子迁移率.

m^* 的计算方法为

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j}, \quad i, j = x, y, z, \quad (2)$$

其中, i 和 j 分别表示在倒空间的分量, $E(\mathbf{k})$ 是导带底或价带顶附近的能量-波矢关系.

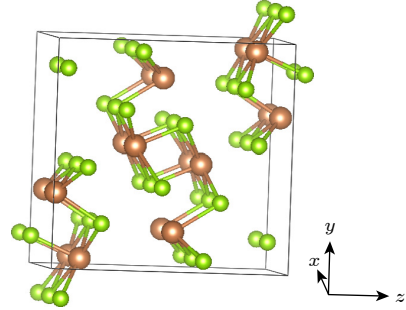


图 1 Sb₂Se₃ 的晶胞, 棕色球体代表阳离子锑, 绿色球体代表阴离子硒

Fig. 1. Crystal structure of Sb₂Se₃ computational model, brown spheres represent cation antimony, and green spheres represent anion selenium.

3 结果与讨论

3.1 晶体结构

在进行能量和性质计算之前, 先对晶体结构进行了优化, 优化过程考虑了范德瓦耳斯修正. 所计算出的晶格常数为 3.99, 11.34, 11.64 Å, 与实验测量值 3.98, 11.65, 11.80 Å^[17] 接近, 确保了晶体结构计算上的可靠性.

3.2 应变对价带结构的影响

采用密度泛函理论 (DFT) PBE 交换关联泛函算出的无应变 Sb₂Se₃ 带隙为 0.83 eV, 低于实验值 1.20 eV, 因为 PBE 会低估半导体的带隙. 本文重点关注应变对价带顶 (VBM) 和导带底 (CBM) 的位置及能带形状的影响. 此前的研究表明, PBE 也可以正确预测不同应变下能带的变化趋势^[18,19]. 为保证计算效率, 本文采用 PBE 泛函来计算应变对 Sb₂Se₃ 能带结构的影响.

图 2 展示了施加在 x 方向上的不同应变 (ε_x) 下能带结构的变化, 其中, 费米能级设置在了 0 eV. 可以发现, 无应变的 Sb₂Se₃ 是间接带隙半导体, 以波矢 (k_x, k_y, k_z) 标记, 其 VBM 和 CBM 分别位于 $(0.111, 0, 0.389)$ 和 $(0.278, 0, 0)$. 对于施加了张应变的结构, 其 VBM 和 CBM 位置保持不变; 对于施

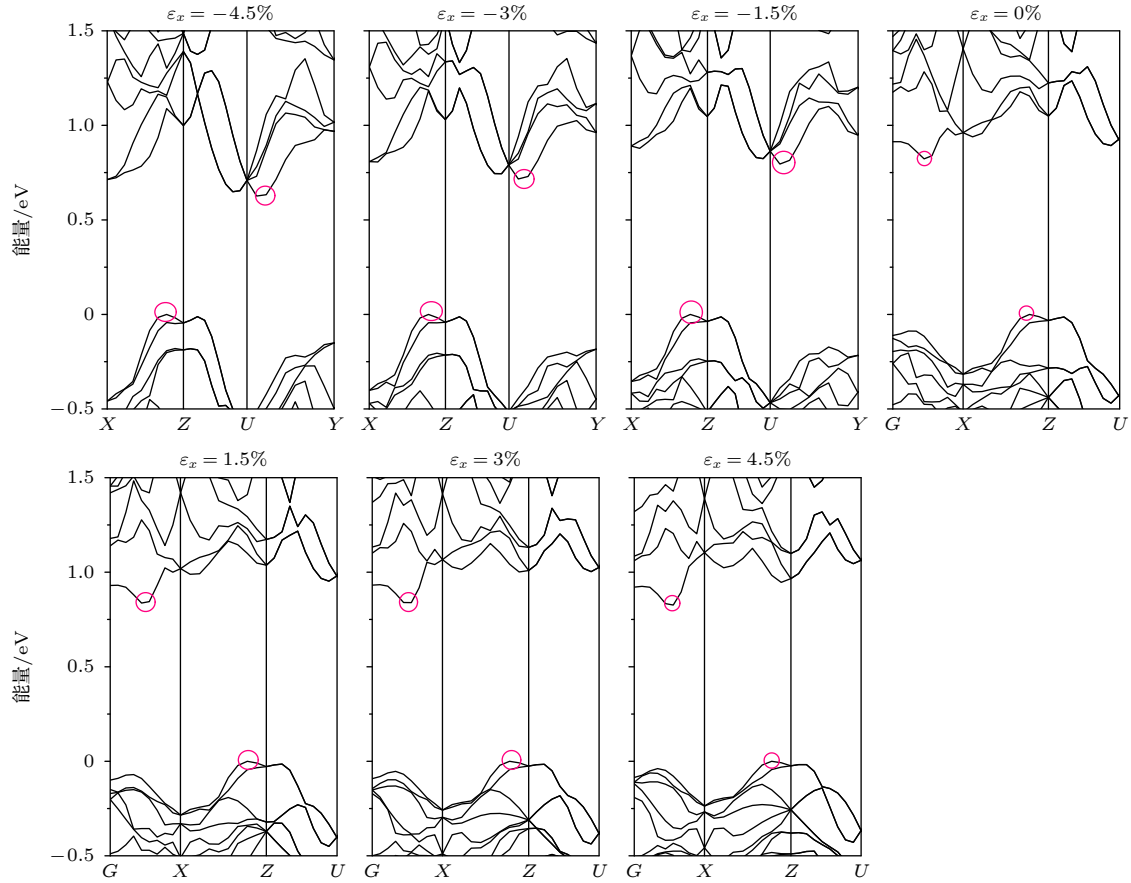


图 2 不同能带结构随 ε_x 的变化, 正号表示拉应变, 负号表示压应变, VBM 与 CBM 均用红圈标注

Fig. 2. The variation of energy band structure under different ε_x strains. Positive sign indicates tensile strain, and negative sign indicates compressive strain. The VBM and the CBM are marked with red circles.

加了压应变下的结构, CBM 位置到了 (0.444, 0.056, 0.444), VBM 位置依然保持不变. 因为 Sb_2Se_3 应用在光伏领域, 主要是 p 型导电为主, 因此本文重点研究 VBM 附近的空穴特性. 对于施加在 y, z 方向上的不同应变 ($\varepsilon_y, \varepsilon_z$) 下, 其 VBM 位置也稳定在 (0.111, 0, 0.389), 其图片不再列出.

3.3 应变对带隙的影响

带隙是 CBM 与 VBM 之间的能量差, 从图 2 可以看出, 应变对带隙有一定的影响. 图 3 绘制了费米能级、VBM、CBM 与带隙随应变 $\varepsilon_x, \varepsilon_y$ 和 ε_z 的变化曲线. 对于沿着 x 方向施加的应变, 随着应变变量增大, 带隙从 0.63 eV (−4.5%) 增至 0.84 eV (+3.0%), 随后下降至 0.83 eV (+4.5%); 对于沿着 y 方向施加的应变, 随着应变变量增大, 带隙从 0.80 eV (−4.5%) 增至 0.83 eV (−1.5%), 随后下降至 0.79 eV (+4.5%); 对于沿着 z 方向施加的应变, 随着应变变量增大, 带隙从 0.90 eV (−4.5%) 下降至 0.71 eV (+4.5%). 实验测到的 Sb_2Se_3 带隙为

1.20 eV 左右, 低于理想的太阳电池带隙为 1.4 eV^[4]. 可以看出, 沿着 x 方向的张应变、 y 方向的部分压应变、 z 方向的压应变 (如紫框所示) 应该对提高带隙有利. 施加在 y 方向的应变对禁带宽度影响较小, 施加在 x, z 方向的应变对禁带宽度影响较大. 对 x 方向施加张应变, 对应地, y, z 方向的晶格常数会减小, 相当于这两方向施加了压应变; 同理, 对 z 方向施加张应变, 对应地, x, y 方向的晶格常数会减小, 相当于这两方向施加了压应变. 因此, $E_g - \varepsilon_x$ 的变化趋势与 $E_g - \varepsilon_z$ 的变化趋势相反. 此外, 施加应变会使得体系变得更加稳定或不稳定, 因此费米能级发生改变, 相应地, VBM 和 CBM 的能量也发生改变. 从图 3 可以看出, VBM 的改变幅度与费米能级的改变幅度接近, 因此 E_g 的变化基本是由 CBM 的变化所致. 结合后面的态密度图, CBM 主要由 Sb-5p 与 Se-4p 轨道所贡献, 应变导致的键长、键角变化, 可能影响了 Sb-5p 与 Se-4p 轨道的耦合强度, 进而影响了 CBM 能量与带隙.

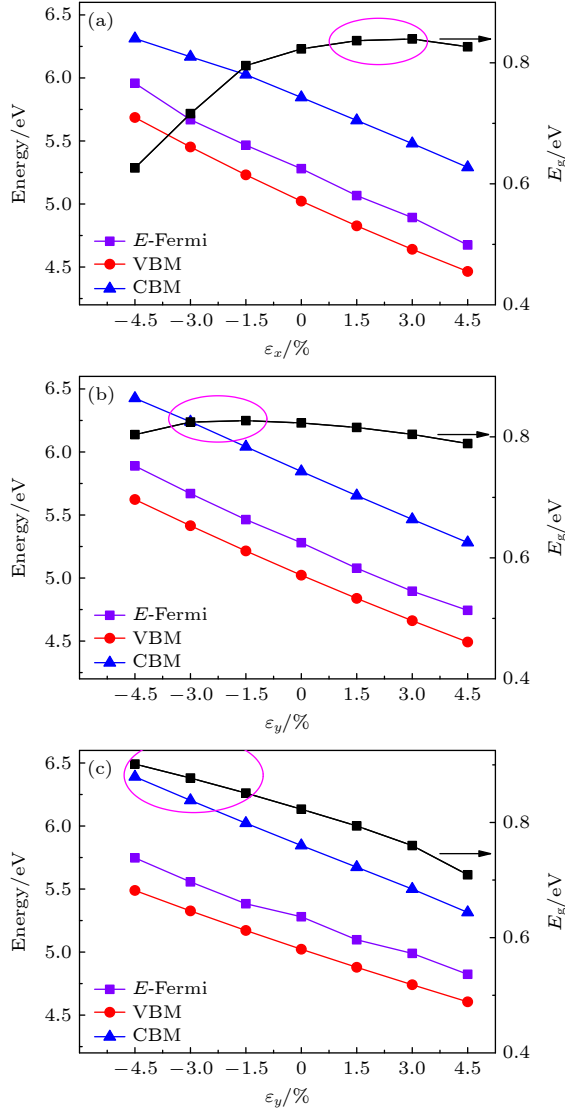


图3 费米能级、VBM、CBM及带隙随应变的变化 (a) 应变沿 x 方向; (b) 应变沿 y 方向; (c) 应变沿 z 方向

Fig. 3. Variation of Fermi level, VBM, CBM and band gap with strain: (a) Strain along x direction; (b) strain along y direction; (c) strain along z direction.

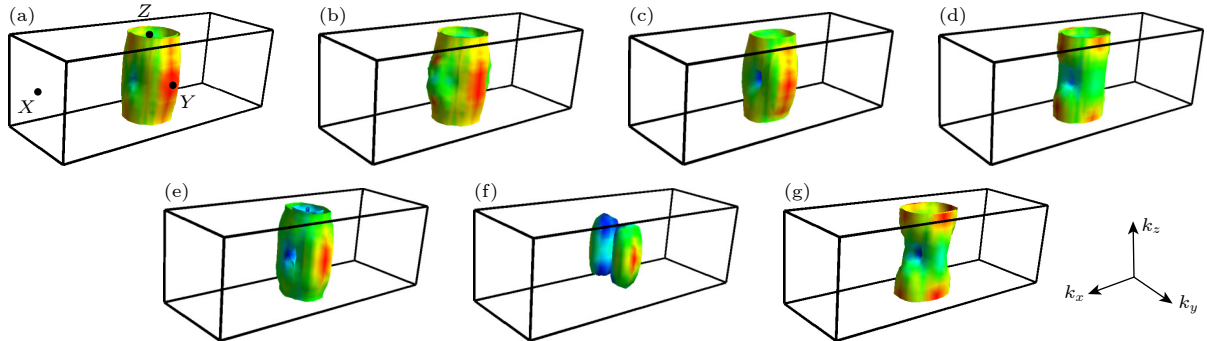


图4 Sb_2Se_3 价带顶下 100 meV 处的等能面的变化. 应变沿着 x 方向上 (a) $\varepsilon_x = 0$, (b) $\varepsilon_x = -4.5\%$, (c) $\varepsilon_x = +4.5\%$; 应变沿 y 方向上 (d) $\varepsilon_y = -4.5\%$, (e) $\varepsilon_y = +4.5\%$; 应变沿 z 方向上 (f) $\varepsilon_z = -4.5\%$, (g) $\varepsilon_z = +4.5\%$

Fig. 4. Variation of the isosurface at 100 meV below VBM. The strain is applied along x direction: (a) $\varepsilon_x = 0$, (b) $\varepsilon_x = -4.5\%$, and (c) $\varepsilon_x = +4.5\%$. The strain is applied along y direction: (d) $\varepsilon_y = -4.5\%$ and (e) $\varepsilon_y = +4.5\%$. The strain is applied along z direction: (f) $\varepsilon_z = -4.5\%$ and (g) $\varepsilon_z = +4.5\%$.

3.4 应变对等能面的影响

为了直观展示空穴传输的方向性, 本研究采用 vaspkit 计算等能面数据^[20], 结合 Fermisurfer 软件进行等能面的可视化^[21]. 图 4 分别为无应变以及当应变沿 x , y , z 方向上时, Sb_2Se_3 价带带边 100 meV 的三维等能图. 根据费米-狄拉克分布函数, 室温下载流子会占据此能量范围, 因此, 等能面可以反映载流子传输的各向异性. 图中黑线围成的区域是第一布里渊区, 六面体的正中心是 VBM, k_x 波矢和 k_y 波矢分别向左前和右前, k_z 波矢向上. 无应变的 Sb_2Se_3 等能面图 (图 4(a)) 呈现翘曲圆柱体形状, 其在 z 轴方向具有较小的色散, 在 x , y 轴方向具有较大的色散, 与 Wang 等^[22] 计算的 Sb_2Se_3 等能面相似, 这种特性比较像准二维材料. 相较于图 4(a), 图 4(c), (d), (g) 在 x 方向上更向内凹, 色散更大; 同时, 图 4(b), (e), (f) 在 x 方向更向外凸, 色散减小. 这些是对 Sb_2Se_3 输运性质的定性探讨, 下面对输运性质进行定量探讨.

3.5 应变对分态密度的影响

为了深入探讨 Sb_2Se_3 的电子结构与有效质量的关系, 对 Sb_2Se_3 进行分态密度计算, 计算结果如图 5 所示. 由无应变的 Sb_2Se_3 可以看出, VBM 主要是由 Se 4p 态和 Sb 5s 态所贡献, 且 Se 4p, Sb 5s 态在 VBM 附近出现局域化. 当应变沿 x 方向, ε_x 为 -4.5% 时 (图 5(b)) 局域化最大, 价带最平坦, 色散最小, 有效质量最大; 其次是 ε_x 为 0 (图 5(a)), 局域化最小的是 ε_x 为 $+4.5\%$ 时 (图 5(c)), 色散最大, 有效质量较小. 当应变沿着 y 方向, 如图 5(d), (e)

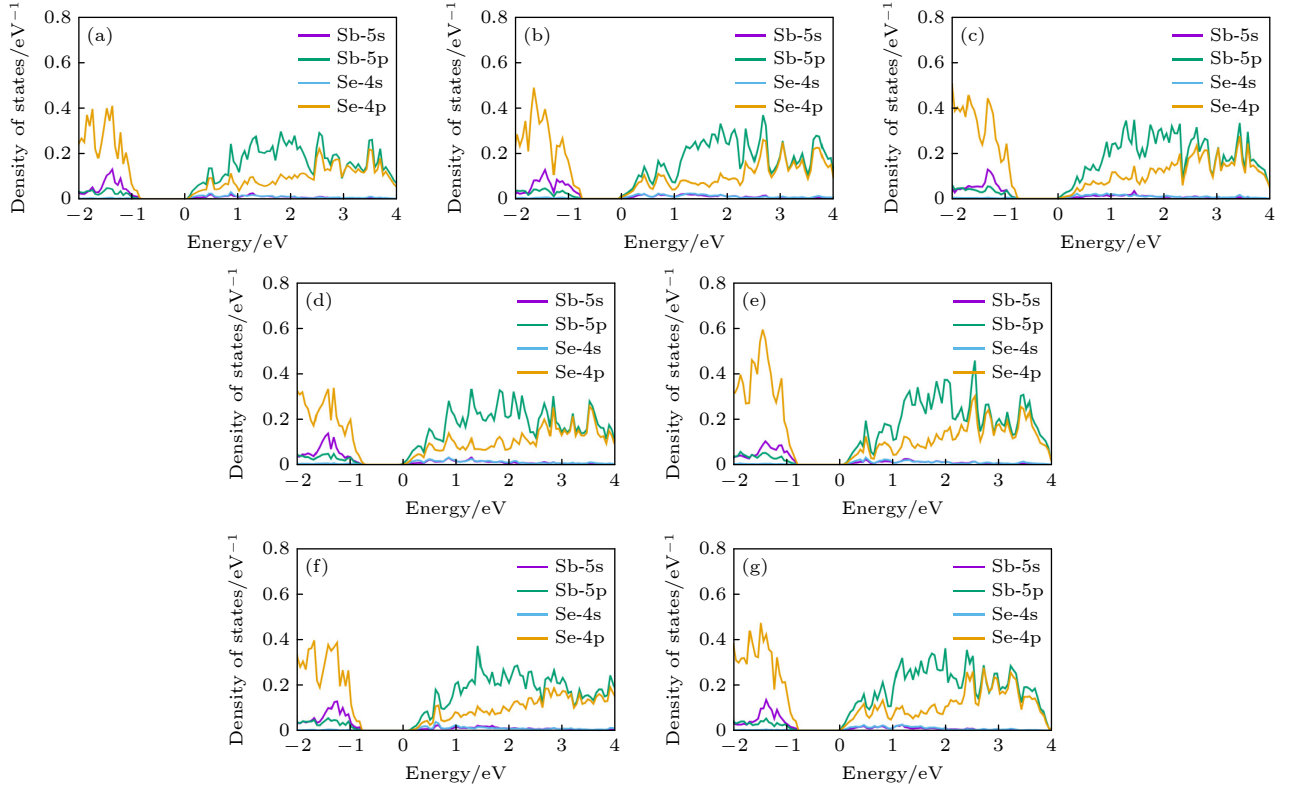


图 5 Sb_2Se_3 分态密度图. 应变沿着 x 方向上 (a) $\varepsilon_x = 0$, (b) $\varepsilon_x = -4.5\%$, (c) $\varepsilon_x = +4.5\%$; 应变沿 y 方向上 (d) $\varepsilon_y = -4.5\%$, (e) $\varepsilon_y = +4.5\%$; 应变沿 z 方向上 (f) $\varepsilon_z = -4.5\%$, (g) $\varepsilon_z = +4.5\%$

Fig. 5. Partial density of states of Sb_2Se_3 . The strain is applied along x direction: (a) $\varepsilon_x = 0$, (b) $\varepsilon_x = -4.5\%$, and (c) $\varepsilon_x = +4.5\%$. The strain is applied along y direction: (d) $\varepsilon_y = -4.5\%$ and (e) $\varepsilon_y = +4.5\%$. The strain is applied along z direction: (f) $\varepsilon_z = -4.5\%$ and (g) $\varepsilon_z = +4.5\%$.

所示, Se 4p, Sb 5s 态在 ε_y 为 +4.5% 时候的局域程度远大于 ε_y 为 -4.5% 时, 所以, ε_y 为 -4.5% 时色散较大, 有效质量较小. 同理, 当应变沿着 z 方向, 如图 5(f), (g) 所示, ε_z 为 -4.5% 时局域化程度大于 ε_z 为 4.5% 时, 因此, 后者有效质量更小.

3.6 应变对空穴迁移率的影响

结合有效质量计算器 (EMC)^[23], 采用有限差分法 (而不是能带抛物线拟合法), 我们计算了价带顶处的有效质量, 表 1 展示了不同应变方向及应变下沿着 x, y, z 方向的有效质量. 可以看出, 无应变条件下, 空穴沿着 x, y, z 方向的有效质量分别为 $0.44m_0, 0.94m_0, 1.12m_0$, 与 Zhang 等^[24] 所计算的 $0.53m_0, 0.42m_0, 0.83m_0$ 及 Wang 等^[22] 所计算的 $0.85m_0, 0.55m_0, 3m_0$ 对比可以看出, 3 组数据均在 z 方向上有效质量较大, 传输性能最弱; 此外, 本文计算的 m_x^* 最小, 而这两篇文献所计算的 m_y^* 最小, 这可能与采用的计算方法不同有关. 从图 6 迁移率的数据可得, 无应变下, μ_x 为 $228.7 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$,

μ_y 为 $27.4 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$, μ_z 为 $18.4 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$. 这印证了文献中 [122] 择优取向 (以共价键结合的 $(\text{Sb}_4\text{Se}_6)_n$ 带为主) 的电池, 性能好于 [012] 择优取向 (以范德瓦耳斯力结合为主) 的电池^[25], 也与实验测量值^[26] 的 μ_x 为 $2.59 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$, μ_y 为 $1.17 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$, μ_z 为 $0.6 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ 趋势相似. 本研究的计算结果大于实验值, 可能因为测试样品中存在杂质和缺陷, 测试值低估了 Sb_2Se_3 的迁移率; 还可能因为, 形变势理论只考虑了声学形变势散射, 没有考虑电离杂质散射、极性光学声子散射、压电散射等因素. 基于 μ_x 最大, 要高效分离 pn 结的光生载流子及提高载流子的传输, 实验上应该将 x 方向作为 Sb_2Se_3 的特定生长方向, 且此方向沿着内建电场的方向.

结合表 1 及图 6, 可以发现当应变方向沿 x 方向, 随着应变量的增大, m_x^* 逐渐减小, μ_x 逐渐增大; m_y^* 和 m_z^* 逐渐增大, μ_y 和 μ_z 逐渐减小; 当应变方向沿 y 方向, 随着应变量的增大, m_x^* 逐渐增大, μ_x 逐渐减小; m_y^* 和 m_z^* 逐渐减小, 而 μ_y 和 μ_z 逐渐增大; 当应变方向沿 z 方向, 随着应变量的增大, m_x^* 逐

渐减小, μ_x 逐渐增大; m_y^* 先基本维持不变, 再逐渐增大, m_z^* 先逐渐减小, 再基本维持不变. 这部分应变对 m^* 的影响与上部分等能面提供的信息基本一致, 表明本计算方法基本可靠.

表 1 不同应变方向及应变变量下, 沿 x, y, z 方向的有效质量

Table 1. Effective mass along x, y, z directions under different strain directions and strain amounts.

应变方向	$\varepsilon/\%$	m_x^*/m_0	m_y^*/m_0	m_z^*/m_0
x 方向	-4.5	0.58	0.73	0.77
	-3.0	0.51	0.78	0.86
	-1.5	0.46	0.85	0.96
	0	0.44	0.94	1.12
	1.5	0.42	1.08	1.32
	3.0	0.41	1.32	1.59
	4.5	0.40	1.82	1.97
y 方向	-4.5	0.35	5.28	1.37
	-3.0	0.37	4.24	1.29
	-1.5	0.40	1.51	1.20
	0	0.44	0.94	1.12
	1.5	0.48	0.70	1.03
	3.0	0.53	0.59	0.95
	4.5	0.60	0.53	0.88
z 方向	-4.5	0.55	0.94	1.62
	-3.0	0.50	0.94	1.27
	-1.5	0.46	0.93	1.15
	0	0.44	0.94	1.12
	1.5	0.42	1.02	1.11
	3.0	0.40	1.35	1.12
	4.5	0.40	3.83	1.13

从图 6 还可以看出, 当应变沿着 x, z 方向的时候, 拉应变可以获得更高的 μ_x (如紫框所示). 当应变方向沿着 y 方向的时候, 压应变可以获得更高的 μ_x . 结合应变对带隙的影响, z 方向的拉应力会使带隙变小, 不利于最大限度地吸收光子, 不宜于提升太阳电池的光电转化性能. 对比应变沿着 x, y 方向上迁移率的具体数值, 考虑应变对带隙的影响, 发现当应变为 $\varepsilon_y = -3.0\%$ 时, μ_x 达到本计算的最大值 $333.6 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$.

4 结 论

通过密度泛函理论和形变势理论, 本文系统研究了沿着 x, y, z 方向的 3 种单轴应变对 Sb_2Se_3 的

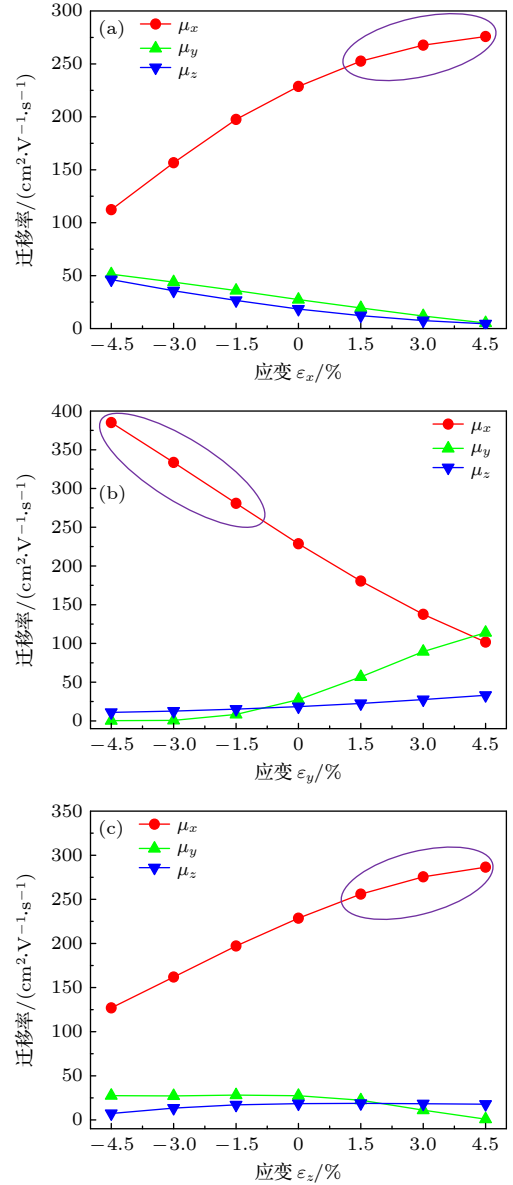


图 6 迁移率随应变的变化 (a) 应变沿 x 方向; (b) 应变沿 y 方向; (c) 应变沿 z 方向

Fig. 6. Mobility variation with strain: (a) Strain along the x direction; (b) strain along the y direction; (c) strain along the z direction.

能带结构、禁带宽度、等能面、有效质量影响. 研究发现在这些应变下, Sb_2Se_3 的 VBM 位置维持不变, 沿着 y, z 方向应变时, 随着应变变量增大, 其带隙整体降低; 沿着 x 方向应变时, 随着应变变量增大, 其带隙增大. 带隙的变化可能由 CBM 的 Sb-5p 与 Se-4p 轨道的耦合强度变化有关. 对于充分弛豫的 Sb_2Se_3 , 其等能面呈现翘曲圆柱体形状, 在 z 轴方向色散小, x, y 轴方向色散大, μ_x 大于 μ_y 和 μ_z , 实验上应该将 x 方向作为 Sb_2Se_3 的特定生长方向. 当应变沿着 x, z 方向, 随着应变变量的增大, m_x^* 逐

渐变小, μ_x 逐渐增大; 当应变沿着 y 方向, 随着应变量的增大, m_x^* 逐渐变大, μ_x 减小. 综合应变对带隙和迁移率的影响, 我们认为当应变沿着 y 方向, 且压应变为 3% 的时候, 能获得最佳的 Sb_2Se_3 太阳能电池吸收层材料.

参考文献

- [1] Green M A, Dunlop E D, Yoshita M 2023 *Prog. Photovolt. Res. Appl.* **31** 651
- [2] Chen C, Li K H, Tang J 2022 *Sol. RRL* **6** 2200094
- [3] Zhang X, Li C, Sun K, Zhou J, Zhang Z 2021 *Adv. Energy Mater.* **11** 2002614
- [4] Xue D J, Shi H J, Tang J 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 038406 (in Chinese) [薛丁江, 石杭杰, 唐江 2015 物理学报 **64** 038406]
- [5] Zhao Y Q, Wang S Y, Li C, Che B, Chen X L, Chen H Y, Tang R F, Wang X M, Chen G L, Wang T, Gong J B, Chen T, Xiao X D, Li J M 2022 *Energy Environ. Sci.* **15** 5118
- [6] Li Z Q, Liang X Y, Li G, Liu H X, Zhang H Y, Guo J X, Chen J W, Shen K, San X Y, Yu W Y, Schropp R, Mai Y H 2019 *Nat. Commun.* **10** 125
- [7] Takagi S, Hoyt J L, Welser J J, Gibbons J F 1996 *J. Appl. Phys.* **80** 1567
- [8] Welser J, Hoyt J L, Gibbons J F 1992 *International Technical Digest on Electron Devices Meeting*, San Francisco, CA, USA 1992, December 13–16, 1992 p1000
- [9] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Xuan R X, Dai X Y 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 579 (in Chinese) [宋建军, 张鹤鸣, 胡辉勇, 宣荣喜, 戴显英 2010 物理学报 **59** 579]
- [10] Jia W L, He Y, Cao Y L, Wang X M, Lin Z, Li W T, Xu M, Li E L 2022 *Micro Nanostructures* **168** 207300
- [11] Datye I M, Daus A, Grady R W, Brenner K, Vaziri S, Pop E 2022 *Nano Lett.* **22** 8052
- [12] Ge G X, Zhang Y W, Yan H X, Yang J M, Zhou L, Sui X J 2021 *Appl. Surf. Sci.* **538** 148009
- [13] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [14] Vadapoo R, Krishnan S, Yilmaz H, Marin C 2011 *Phys. Status Solidi B* **248** 700
- [15] Bardeen J, Shockley W 1950 *Phys. Rev.* **80** 72
- [16] Xi J Y, Long M Q, Tang L, Wang D, Shuai Z G 2012 *Nanoscale* **4** 4348
- [17] El-Sayad E A, Moustafa A M, Marzouk S Y 2009 *Physica B* **404** 1119
- [18] Kumar A, Ahluwalia P K 2013 *Physica B* **419** 66
- [19] Peng X H, Ganti S, Alizadeh A, Sharma P, Kumar S K, and Nayak S K 2006 *Phys. Rev. B* **74** 035339
- [20] Wang V, Xu N, Liu J C, Tang G, Geng W T 2021 *Comput. Phys. Commun.* **267** 108033
- [21] Kawamura M 2019 *Comput. Phys. Commun.* **239** 197
- [22] Wang X W, Li Z Z, Kavanagh S R, Ganose A M, Walsh A 2022 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **24** 7195
- [23] Effective Mass Calculator for Semiconductors, Fonari A, Sutton C <https://github.com/afonari/emc> [2013-3-18]
- [24] Zhang B Y, Qian X F 2022 *ACS Appl. Energy Mater.* **5** 492
- [25] Zhou Y, Wang L, Chen S Y, Qin S K, Liu X S, Chen Jie, Xue D J, Luo M, Cao Y Z, Cheng Y B, Sargent E H, Tang J 2015 *Nat. Photonics* **9** 409
- [26] Chen C, Bobela D C, Yang Ye, Lu S C, Zeng K, Ge C, Yang B, Gao L, Zhao Y, Beard M C, Tang J 2017 *Front. Optoelectron.* **10** 18

Effect of uniaxial strain on Hole mobility of Sb_2Se_3 *

Zhang Leng¹⁾²⁾ Shen Yu-Hao²⁾ Tang Chao-Yang³⁾ Wu Kong-Ping¹⁾

Zhang Peng-Zhan¹⁾ Liu Fei¹⁾ Hou Ji-Wei^{3)†}

¹⁾ (School of Electronics and Information Engineering, Jinling Institute of Technology, Nanjing 211169, China)

²⁾ (National Laboratory of Solid State Microstructures, School of Physics, Nanjing University, Nanjing 210093, China)

³⁾ (Department of Physics, School of Physical and Mathematical Sciences, Nanjing Tech University, Nanjing 211816, China)

(Received 26 January 2024; revised manuscript received 28 February 2024)

Abstract

Antimony selenide (Sb_2Se_3) is a simple-phase, element-rich, and economically friendly material for solar cell absorption layers, with broad application prospects. However, the weak conductivity of Sb_2Se_3 has become a significant factor limiting the performance of solar cell devices. Carrier mobility is an important electrical parameter for both materials and devices, and strain can change carrier mobility. Therefore, studying the effect of strain on the carrier mobility of Sb_2Se_3 is of practical significance. In this work, using density functional theory and deformation potential theory, we systematically investigate the influence of uniaxial strain on the band structure, bandgap width, iso-surface, and effective mass of Sb_2Se_3 . We analyze the effects of three types of uniaxial strains along the x -, y -, and z -direction on the carrier mobilities along the x -, y -, and z -direction, which are denoted by μ_x , μ_y , and μ_z , respectively. It is found that under these strains, the valence band maximum (VBM) position of Sb_2Se_3 remains unchanged, and the bandgap decreases with the increase of strain along the y - and z -direction, while it increases along the x -direction. The variation in bandgap may be related to the coupling strength between the Sb-5p orbital and Se-4p orbital of the conduction band minimum (CBM). For fully relaxed Sb_2Se_3 , its iso-surface exhibits a distorted cylindrical shape, with low dispersion along the z -axis and high dispersion along the x - and y -axis, where μ_x is greater than μ_y and μ_z , suggesting that the x -direction should be considered as the specific growth direction for Sb_2Se_3 experimentally. When the strain is applied along the x - and z -direction, μ_x gradually increases with strain increasing, while it decreases when the strain is applied along the y -direction. Taking into account the combined effects of strain on bandgap, iso-surface, density of states, and mobility, this study suggests that the optimal performance of Sb_2Se_3 solar cell absorber layer material can be realized when the strain is applied along the y -axis, with a compressive strain of 3%.

Keywords: Sb_2Se_3 , mobility, deformation potential, strain engineering

PACS: 71.15.Mb, 51.50.+v, 71.70.Fk

DOI: [10.7498/aps.73.20240175](https://doi.org/10.7498/aps.73.20240175)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61904071, 52002170), the Postgraduate Research & Practice Innovation Program of Jiangsu Province, China (Grant No. KYCX23_1429), and the Qing Lan Project of Jiangsu Provincial University, China.

† Corresponding author. E-mail: jwhou@njtech.edu.cn

单轴应变对 Sb_2Se_3 空穴迁移率的影响

张冷 沈宇皓 汤朝阳 吴孔平 张鹏展 刘飞 侯纪伟

Effect of uniaxial strain on Hole mobility of Sb_2Se_3

Zhang Leng Shen Yu-Hao Tang Chao-Yang Wu Kong-Ping Zhang Peng-Zhan Liu Fei Hou Ji-Wei

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 117101 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20240175

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240175>

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

基于形变势理论的掺杂计算 Sb_2Se_3 空穴迁移率

Carrier mobility in doped Sb_2Se_3 based on deformation potential theory

物理学报. 2024, 73(4): 047101 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231406>

Sb_2Se_3 薄膜表面和界面超快载流子动力学的瞬态反射光谱分析

Ultrafast carrier kinetics at surface and interface of Sb_2Se_3 film by transient reflectance

物理学报. 2022, 71(6): 066402 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211714>

新型硒化锑薄膜太阳能电池背接触优化

Back contact optimization for Sb_2Se_3 solar cells

物理学报. 2023, 72(3): 036401 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221929>

$\text{AlN}/\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ 异质结电子输运机制

Electron transport mechanism in $\text{AlN}/\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ heterostructures

物理学报. 2023, 72(2): 028501 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221545>

应变和电场对 $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$ 异质结电子结构和光学性质的影响

Effect of strain and electric field on electronic structure and optical properties of $\text{Ga}_2\text{SeTe}/\text{In}_2\text{Se}_3$ heterojunction

物理学报. 2023, 72(7): 076301 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222250>

$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 插入层对双沟道 $n\text{-Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}/i\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ HEMT器件性能的影响

Effect of inserted $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ layer on characteristic of double-channel $n\text{-Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}/i\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ HEMT

物理学报. 2022, 71(16): 167301 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220403>