

硒化锑薄膜太阳电池的模拟与结构优化研究

曹宇 祝新运 陈翰博 王长刚 张鑫童 侯秉东 申明仁 周静

Simulation and optimal design of antimony selenide thin film solar cells

Cao Yu Zhu Xin-Yun Chen Han-Bo Wang Chang-Gang Zhang Xin-Tong Hou Bing-Dong Shen Ming-Ren Zhou Jing

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 67, 247301 (2018) DOI: 10.7498/aps.67.20181745

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20181745>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2018/V67/I24>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

[基于传递函数的频率选择表面集总参数研究](#)

Study on the lumped parameters of FSS in terms of the transfer function

物理学报.2014, 63(13): 137301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.137301>

[Ku/Ka 波段双通带频率选择表面雷达罩设计研究](#)

Design and study on the dual-band radome with FSS operation at Ku-/Ka-band

物理学报.2013, 62(23): 237302 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.237302>

[利用等效电路模型快速分析加载集总元件的微型化频率选择表面](#)

Quick analysis of miniaturized-element frequency selective surface that loaded with lumped elements by using an equivalent circuit model

物理学报.2013, 62(20): 207301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.207301>

[基于互补屏的极化分离结构设计研究](#)

Design and study of the polarization selective surface based on the complementary screens

物理学报.2013, 62(19): 197303 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.197303>

[GaAs 薄膜的有效量子限制长度及其极化子特性](#)

Effective length of quantum confinement and polaron effect in a GaAs film

物理学报.2013, 62(19): 197302 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.197302>

# 硒化锑薄膜太阳能电池的模拟与结构优化研究\*

曹宇<sup>1)</sup> 祝新运<sup>1)</sup> 陈翰博<sup>2)</sup> 王长刚<sup>1)</sup> 张鑫童<sup>2)</sup> 侯秉东<sup>2)</sup>  
申明仁<sup>1)</sup> 周静<sup>2)†</sup>

1) (现代电力系统仿真控制与绿色电能新技术教育部重点实验室(东北电力大学), 吉林 132012)

2) (东北电力大学化学工程学院, 吉林 132012)

(2018年9月21日收到; 2018年11月1日收到修改稿)

采用 wx-AMPS 模拟软件对硒化锑 ( $\text{Sb}_2\text{Se}_3$ ) 薄膜太阳能电池进行建模仿真, 将 CdS, ZnO 和  $\text{SnO}_2$  的模型应用到  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳能电池的电子传输层中. 结果显示, 应用 CdS 和 ZnO 都能实现较高的器件性能, 并发现电子传输层电子亲和势 ( $\chi_{e\text{-ETL}}$ ) 的变化能够调节  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳能电池内部的电场分布, 是影响器件性能的关键参数之一. 过高或者过低的  $\chi_{e\text{-ETL}}$  都会使电池的填充因子降低, 导致电池性能劣化. 当  $\chi_{e\text{-ETL}}$  为 4.2 eV 时, 厚度为 0.6  $\mu\text{m}$  的  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳能电池取得了最优的 7.87% 的转换效率. 应用优化好的器件模型, 在不考虑  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  层缺陷态的理想情况下, 厚度为 3  $\mu\text{m}$  的  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳能电池的转换效率可以达到 16.55% (短路电流密度  $J_{\text{sc}} = 34.88 \text{ mA/cm}^2$ 、开路电压  $V_{\text{oc}} = 0.59 \text{ V}$ 、填充因子  $FF = 80.40\%$ ). 以上模拟结果表明,  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  薄膜太阳能电池在简单的器件结构下就能够获得优异的光电性能, 具有较高的应用潜力.

**关键词:** 硒化锑, 电子传输层, 薄膜太阳能电池, wx-AMPS

**PACS:** 73.61.-r, 88.40.hj, 82.20.Wt

**DOI:** 10.7498/aps.67.20181745

## 1 引言

薄膜太阳能电池因其原材料消耗少、制备工艺简单、柔性可卷曲等优势, 近年来得到了越来越多的关注<sup>[1]</sup>. 其中, 铜铟镓硒薄膜太阳能电池、碲化镉薄膜太阳能电池已经产业化生产, 钙钛矿薄膜太阳能电池的实验室效率已经可以比肩晶体硅太阳能电池<sup>[2-4]</sup>. 但铜铟镓硒薄膜中铜、镓属于稀有元素, 碲化镉薄膜中镉元素的毒性较大, 而钙钛矿薄膜的稳定性有待提高, 这些都限制了薄膜太阳能电池的进一步发展. 因此, 研发一种原材料丰富无毒、制备方法简单、稳定的吸光层薄膜材料成为了发展薄膜太阳能电池的重点.

硒化锑 ( $\text{Sb}_2\text{Se}_3$ ) 薄膜是一种光电性能优异的吸光层材料, 材料当中的锑元素和硒元素地壳储备丰富、绿色低毒.  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  为一维带状结构的直

接带隙半导体材料, 光学带隙约为 1.1 eV<sup>[5,6]</sup>. 目前,  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  薄膜已采用旋涂技术<sup>[7,8]</sup>、磁控溅射技术<sup>[9,10]</sup>、连续离子层吸附与反应技术<sup>[11]</sup>、高真空蒸发技术<sup>[12]</sup>、快速热蒸发技术<sup>[13-17]</sup>等方法制备, 将其应用于太阳能电池吸光层可以获得高于 20% 的理论转换效率, 极具发展潜力<sup>[18]</sup>. 在  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  电池的结构优化中, 多种薄膜材料被应用到电子传输层中. 2017年, Tang 课题组<sup>[15]</sup>将氧化锌 (ZnO) 电子传输层引入到  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳能电池中, 发现 ZnO 电子传输层的生长取向对器件性能会产生很大影响, 并以透明导电薄膜/ $\text{ZnO}/\text{Sb}_2\text{Se}_3/\text{Au}$  的器件结构获得了 6% 的转换效率. Chen 等<sup>[16]</sup>以同样的器件结构, 将二氧化钛作为电子传输层, 获得了转换效率为 5.6% 的  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳能电池. 2018年, Lu 等<sup>[17]</sup>将二氧化锡 ( $\text{SnO}_2$ ) 电子传输层也应用到了  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳能电池中, 但所得的开路电压 ( $V_{\text{oc}}$ ) 和填充因子

\* 国家自然科学基金 (批准号: 51772049)、吉林省科技发展计划 (批准号: 20170520159JH) 和吉林省教育厅“十三五”科学技术研究项目 (批准号: JJKH20190705KJ) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhoujing@neepu.edu.cn

(FF)均较小, 只获得了3.05%的转换效率; 同年, Wen等<sup>[19]</sup>在改进Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>薄膜制备工艺的基础上, 采用硫化镉(CdS)作为电子传输层, 获得了7.6%的认证效率, 为迄今认证的最高转换效率. 从上述研究结果中可以看出, Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>薄膜太阳电池电子传输层有很多选择, 哪种电子传输层更适合于Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>电池还有待考量. 此外, 目前对Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>薄膜太阳电池的研究多集中在实验方面, 在建模仿真方面的研究还较少. 基于此, 本文采用太阳电池模拟软件wx-AMPS对Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>薄膜太阳电池进行建模仿真, 分析了不同电子传输层Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>太阳电池的器件性能, 重点研究了电子传输层的电子亲和势( $\chi_{e-ETL}$ )对电池的影响, 最后提出了进一步提高Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>太阳电池转换效率的技术路线.

## 2 器件结构与模拟参数

本文采用的wx-AMPS模拟软件是一维微电与光电器件模拟软件AMPS-1D的升级版, 该软件通过求解泊松方程和电子空穴连续性方程获得太阳电池的特性参数. 运行软件计算所建立的器件模型后, 不仅能够获得太阳电池的电流-电压( $J-V$ )曲线和量子效率曲线, 还可以得到能带、电场、空穴浓度、电子浓度、载流子产生率和载流子复合率等在电池内部的分布情况, 是从理论上深入研究太阳电池光电特性的有力工具<sup>[20,21]</sup>. 本文采用Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>太阳电池结构为透明导电薄膜/电子传输层/Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>吸光层/金属电极. 如图1所示, 透明导电薄膜选用FTO薄膜、电子传输层选用CdS薄膜、ZnO薄膜和SnO<sub>2</sub>薄膜三种, 厚度固定在20 nm. 电

极采用金(Au)电极. Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>太阳电池各功能层的能带图如图2所示. 根据Wen等<sup>[19]</sup>对Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>薄膜的深能级瞬态谱测试确定了材料的缺陷态信息, 使模型的光电性能更接近实际器件. 模拟中采用的材料参数如表1所列<sup>[22-26]</sup>.

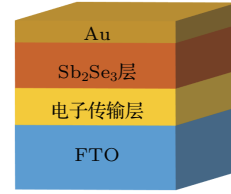


图1 Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>太阳电池的结构示意图

Fig. 1. Schematic of the Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> solar cell structure.

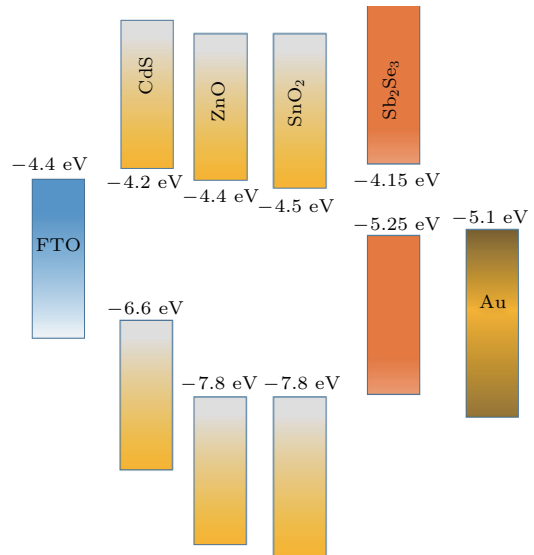


图2 Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>太阳电池各功能层的能带图

Fig. 2. Schematic energy-level diagram of each functional layers in Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> solar cell.

表1 Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>太阳电池的材料参数

Table 1. Material parameters of the Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> solar cells.

参数	CdS <sup>[22]</sup>	ZnO <sup>[22]</sup>	SnO <sub>2</sub> <sup>[23]</sup>	Sb <sub>2</sub> Se <sub>3</sub> <sup>[24-26]</sup>
介电常数	10	9	9	18
电子亲和势/eV	4.2	4.4	4.5	4.15
电子迁移率/cm <sup>2</sup> ·V <sup>-1</sup> ·s <sup>-1</sup>	100	10	100	15
空穴迁移率/cm <sup>2</sup> ·V <sup>-1</sup> ·s <sup>-1</sup>	25	2.5	25	5.1
受主掺杂浓度/cm <sup>-3</sup>	0	0	0	1 × 10 <sup>13</sup>
施主掺杂浓度/cm <sup>-3</sup>	1 × 10 <sup>18</sup>	1 × 10 <sup>18</sup>	1 × 10 <sup>18</sup>	0
禁带宽度/eV	2.4	3.3	3.6	1.1
导带有效状态密度/cm <sup>-3</sup>	2.2 × 10 <sup>18</sup>	2.2 × 10 <sup>18</sup>	2.2 × 10 <sup>18</sup>	4.8 × 10 <sup>18</sup>
价带有效状态密度/cm <sup>-3</sup>	1.8 × 10 <sup>19</sup>	1.8 × 10 <sup>19</sup>	1.8 × 10 <sup>19</sup>	4.8 × 10 <sup>18</sup>

### 3 模拟结果与讨论

#### 3.1 不同电子传输层的应用

三种具有不同电子传输层  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  薄膜太阳能电池的  $J$ - $V$  曲线如图 3(a) 所示. 根据曲线计算出的性能参数总结在表 2 中, 电池厚度为  $0.6 \mu\text{m}$ . 其中具有  $\text{SnO}_2$  电子传输层的  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳能电池的  $V_{\text{oc}}$  和短路电流密度 ( $J_{\text{sc}}$ ) 都较高, 但由于  $FF$  最低, 只有 52.04%, 使其得到了最低的 6.62% 的转换效率. 应用  $\text{CdS}$  作为电子传输层的  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳能电池, 虽然  $V_{\text{oc}}$  和  $J_{\text{sc}}$  略低, 但  $FF$  (61.55%) 是最高的, 可以得到 7.35% 的转换效率. 而当  $\text{ZnO}$  作为电子传输层时,  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳能电池的各项性能都能保持在较高水平, 获得了最高的 7.48% 的转换效率. 图 3(b) 为不同电子传输层  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳能电池的量子效率图. 如图 3(b) 所示, 三个电池的长波响应很相近, 短波响应则有所不同, 其中应用  $\text{CdS}$  的  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳能电池的短波响应最低, 这是因为  $\text{CdS}$  的带隙最窄, 造成

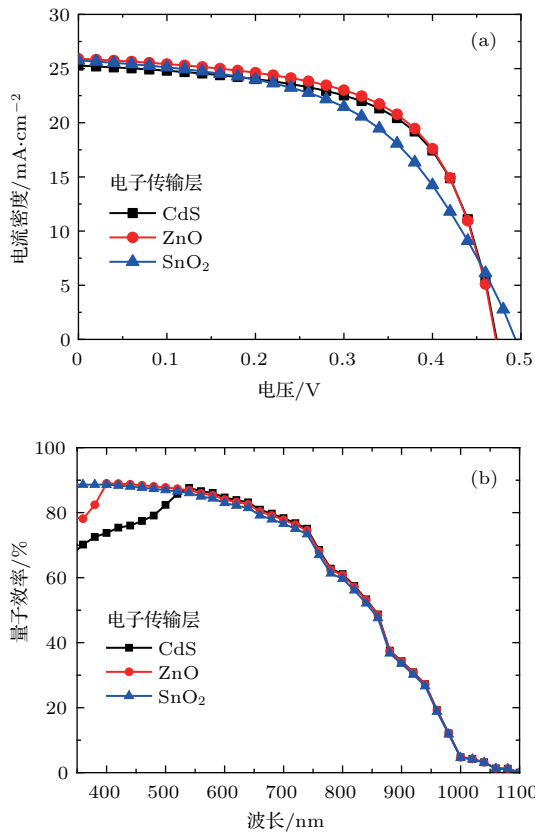


图 3 不同电子传输层  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳能电池的 (a)  $J$ - $V$  特性和 (b) 量子效率

Fig. 3. The (a)  $J$ - $V$  characteristic and (b) quantum efficiency of  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  solar cells with different electron transport layers.

电子传输层会吸收较多的短波光光子, 这些光子无法形成电流, 因此使得电池的短波响应降低. 这种现象在实验中也得到了印证, Tang 课题组<sup>[19]</sup>所制备的具有  $\text{CdS}$  电子传输层的  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳能电池, 其 450 nm 处只有约 60% 的光谱响应. 而使用  $\text{SnO}_2$  和  $\text{ZnO}$  作为电子传输层, 电池在 450 nm 处均可以获得约 75% 的光谱响应<sup>[15,17]</sup>.

表 2 不同电子传输层  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳能电池的性能参数  
Table 2. Photovoltaic performance of  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  solar cells with different electron transport layers.

电子传输层	$V_{\text{oc}}/\text{V}$	$J_{\text{sc}}/\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$	$FF/\%$	转换效率/ $\%$
CdS	0.47	25.28	61.55	7.35
ZnO	0.47	25.91	61.21	7.48
$\text{SnO}_2$	0.49	25.75	52.04	6.62

#### 3.2 $\chi_{\text{e-ETL}}$ 对器件性能的影响

以  $\text{ZnO}$  模型为基础, 改变  $\chi_{\text{e-ETL}}$  从 3.8 eV 提高到 4.8 eV, 以研究电子传输层不同能带结构对  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳能电池的影响. 不同  $\chi_{\text{e-ETL}}$  的  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳能电池的能带结构如图 4(a) 所示. 由于 FTO 的功函数不变, 这使得  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳能电池电子传输层的能带在  $\chi_{\text{e-ETL}}$  低于 4.4 eV 时向上弯曲, 而在  $\chi_{\text{e-ETL}}$  高于 4.4 eV 时向下弯曲. 同时,  $\chi_{\text{e-ETL}}$  的变化也会影响  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  层的能带结构,  $\chi_{\text{e-ETL}}$  越高,  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  层能带的变化就越平缓. 图 4(b) 所示为不同  $\chi_{\text{e-ETL}}$  的  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  层的载流子复合率分布. 对于  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  层前端, 当  $\chi_{\text{e-ETL}}$  为 3.8 eV 时, 复合率较高, 随着  $\chi_{\text{e-ETL}}$  的增加, 复合率逐渐下降, 而当  $\chi_{\text{e-ETL}}$  提高到 4.8 eV 时, 复合率又大幅增加. 对于  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  层后端, 当  $\chi_{\text{e-ETL}}$  高于 4.6 eV 时, 其复合率随之上升.

图 4(c) 为不同  $\chi_{\text{e-ETL}}$  的  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳能电池的电场分布图. 我们发现, 当  $\chi_{\text{e-ETL}}$  较低时, 会在电子传输层和  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  吸光层的界面处产生一定的势垒, 而当  $\chi_{\text{e-ETL}}$  大于 4.4 eV 后, 势垒会消失, 但同时在电子传输层产生了一个相反的电场. 从图 4(d) 所示不同  $\chi_{\text{e-ETL}}$  的  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳能电池的自由电子浓度分布可以看出, 低  $\chi_{\text{e-ETL}}$  产生的势垒会阻碍光生载流子的传输, 在界面处形成自由电子的堆积, 而  $\chi_{\text{e-ETL}}$  越低, 界面处堆积的自由电子就越多, 导致其复合增多, 因此随着  $\chi_{\text{e-ETL}}$  由 4.4 eV 降低到 3.8 eV,  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  层前端的载流子复合率随之提高.

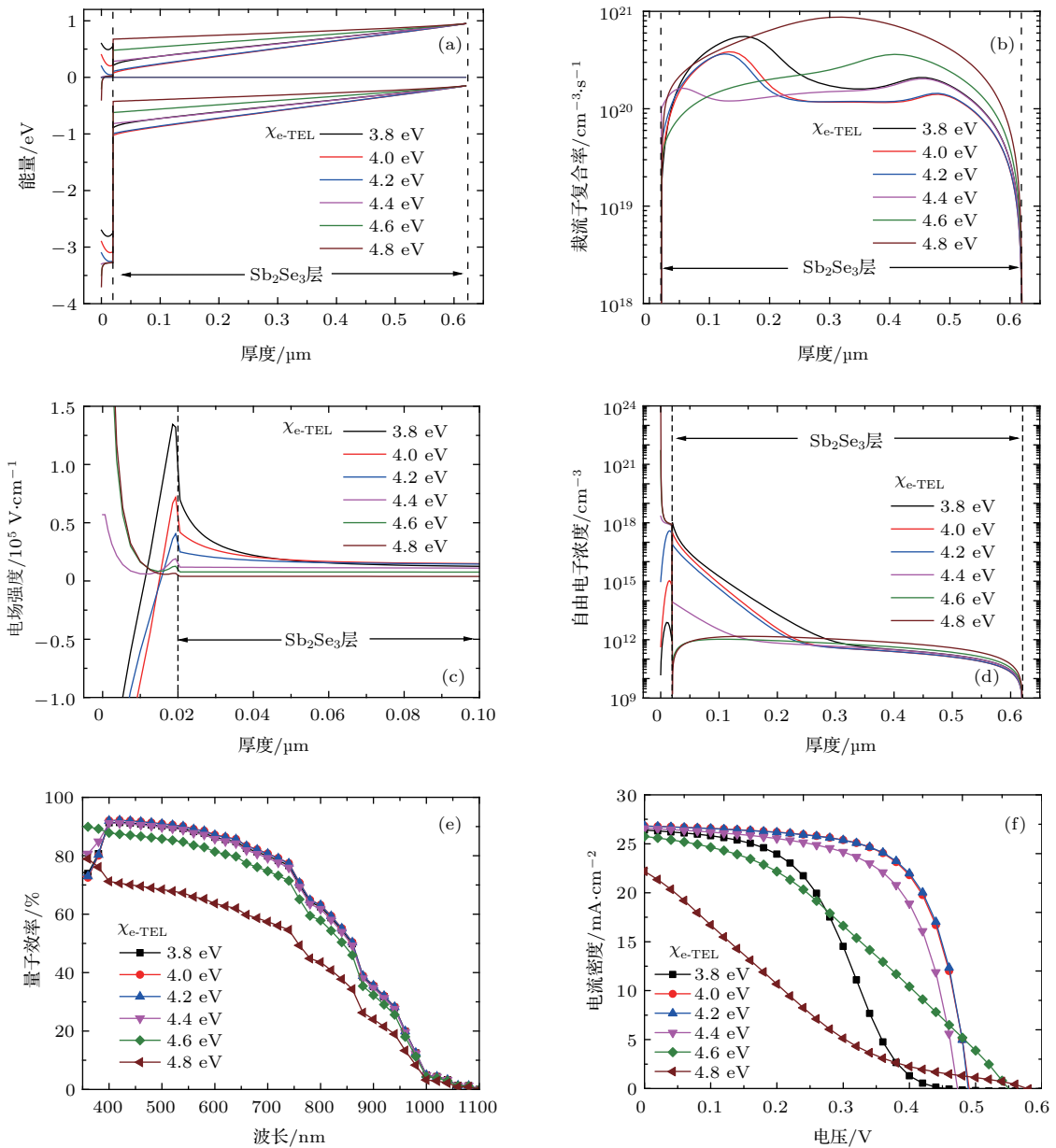


图4 不同 $\chi_{e-ETL}$ 的 $Sb_2Se_3$ 太阳电池的 (a) 能带图、(b) 载流子复合率分布、(c) 电场分布、(d) 自由电子浓度分布、(e) 量子效率和 (f)  $J-V$  特性

Fig. 4. (a) Energy band structure, (b) carrier recombination rate distribution, (c) electric field distribution, (d) free electrons concentration distribution, (e) quantum efficiency, (f)  $J-V$  characteristic of  $Sb_2Se_3$  solar cells with different  $\chi_{e-ETL}$ .

图4(e)为不同 $\chi_{e-ETL}$ 的 $Sb_2Se_3$ 太阳电池的量子效率图谱。从图4(e)可以看出,在 $\chi_{e-ETL}$ 低于4.4 eV的情况下, $Sb_2Se_3$ 太阳电池的量子效率图谱很相近,说明 $J_{sc}$ 也相近,并且都在短波处的响应有一定的“凹陷”。而当 $\chi_{e-ETL}$ 提高到4.6 eV以上时,量子效率图谱的短波响应有所提高,“凹陷”的形状消失,但总体响应会随之降低。由于短波光子的主要在 $Sb_2Se_3$ 层前端被吸收,所以它和该部分的复合率的变化基本一致。对于长波部分,

当 $\chi_{e-ETL}$ 较低时,电池的光谱响应变化不大,而当 $\chi_{e-ETL}$ 高于4.6 eV时,电池的光谱响应开始下降,对应着电池中后部分的复合率的大幅增加。根据这一系列 $Sb_2Se_3$ 太阳电池的能带图可知, $\chi_{e-ETL}$ 越高 $Sb_2Se_3$ 层的能带越平缓,这就使得加在 $Sb_2Se_3$ 吸光层的内建电场变小,许多光生载流子没有得到足够的驱动力到达电池两极就在 $Sb_2Se_3$ 层的缺陷处复合,导致电池长波响应的下降。

不同 $\chi_{e-ETL}$ 的 $Sb_2Se_3$ 太阳电池的 $J-V$ 特性如

图4(f)所示,详细的电池性能参数列于表3.由表3可知,电子传输层的能带位置对电池性能影响很大,随着 $\chi_{e-ETL}$ 由3.8 eV提高到4.2 eV,电池效率先由4.65%提高到7.87%,接着再继续提高 $\chi_{e-ETL}$ 到4.8 eV,转换效率会迅速下降至2.14%.对比电池参数发现,转换效率的改变主要是由 $FF$ 的变化所引起的.在 $\chi_{e-ETL}$ 为3.8 eV时, $FF$ 的降低主要是由于串联电阻的增加引起的.这是由于较低的 $\chi_{e-ETL}$ 在电子传输层/ $Sb_2Se_3$ 层界面处产生的势垒是一种高阻层,导致了串联电阻的增加[27].而当 $\chi_{e-ETL}$ 高于4.6 eV时, $FF$ 的降低则是由串联电阻和并联电阻共同影响的.首先较高的 $\chi_{e-ETL}$ 会在电子传输层形成反向电场,导致载流子堆积在透明导电膜与电子传输层的界面,这会阻碍载流子的输运,使得串联电阻增加,与此同时,由于 $Sb_2Se_3$ 层电场的减弱导致复合增多,也在一定程度上降低了并联电阻,这两种因素共同作用使得 $FF$ 降低.因此 $\chi_{e-ETL}$ 过高或者过低都会导致 $Sb_2Se_3$ 太阳能电池的性能劣化,要想使电池保持较高的器件性能,4.0 eV到4.4 eV之间是 $\chi_{e-ETL}$ 的一个合适的范围.

表3 不同 $\chi_{e-ETL}$ 的 $Sb_2Se_3$ 太阳能电池的性能参数  
Table 3. Photovoltaic performance of the  $Sb_2Se_3$  solar cells with different  $\chi_{e-ETL}$ .

$\chi_{e-ETL}/\text{eV}$	$V_{oc}/\text{V}$	$J_{sc}/\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$	$FF/\%$	转换效率/ $\%$
3.8	0.45	24.96	41.33	4.65
4.0	0.49	25.81	62.35	7.82
4.2	0.48	25.84	62.84	7.87
4.4	0.47	25.91	61.21	7.48
4.6	0.55	25.13	36.08	4.96
4.8	0.58	21.65	17.08	2.14

### 3.3 $Sb_2Se_3$ 太阳能电池性能的优化

根据上述模拟结果,当 $Sb_2Se_3$ 太阳能电池的 $\chi_{e-ETL}$ 在4.2 eV左右,电池可以达到最好7.87%的效率.基于模型参数,要想进一步优化电池性能,关键在于 $Sb_2Se_3$ 层缺陷的有效抑制.将 $Sb_2Se_3$ 层的缺陷态去除后,电池的 $J-V$ 曲线如图5所示.对比含有缺陷态的电池结果,发现电池的 $V_{oc}$ 由0.48 V增加到了0.57 V,而 $FF$ 由62.84%增加到了78.68%,使得电池效率显著提高到12.15%.说明缺

陷态的抑制,可以有效减少光生载流子在 $Sb_2Se_3$ 吸光层的复合,使电池的漏电流降低[26].因此,优化 $Sb_2Se_3$ 吸光层的薄膜质量,是未来提高 $Sb_2Se_3$ 薄膜电池转换效率的有效途径.

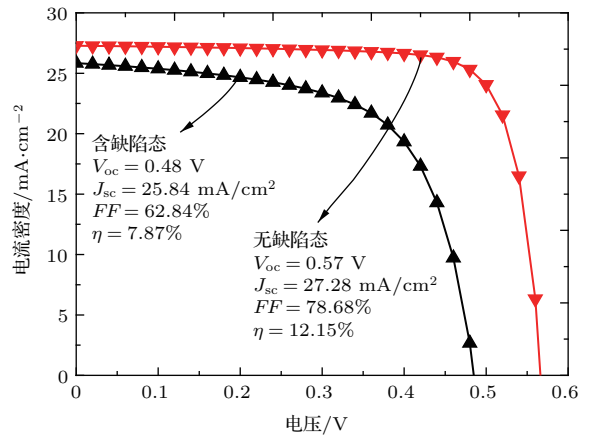


图5 有缺陷态和无缺陷态 $Sb_2Se_3$ 太阳能电池的 $J-V$ 曲线  
Fig. 5.  $J-V$  characteristics of  $Sb_2Se_3$  solar cells with and without defect states.

图6为不同厚度下有缺陷态和无缺陷态 $Sb_2Se_3$ 太阳能电池的转换效率.含有缺陷态的 $Sb_2Se_3$ 太阳能电池,转换效率随厚度的提高呈现先增加后降低的趋势,最佳的电池厚度在0.4  $\mu\text{m}$ 到0.6  $\mu\text{m}$ 之间,对应的效率在7.8%左右;继续增加厚度,则效率随之线性降低,当电池厚度增加到3  $\mu\text{m}$ 时,转换效率仅剩1.24%.说明虽然增加 $Sb_2Se_3$ 层厚度可以吸收更多的光子,然而 $Sb_2Se_3$ 层的电场强度也会随之减弱,使得 $Sb_2Se_3$ 层载流子复合率由于缺陷态的存在而增多,导致器件性能劣化.

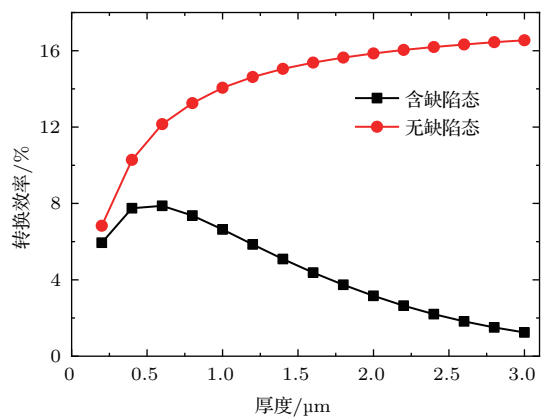


图6 不同厚度下有缺陷态和无缺陷态 $Sb_2Se_3$ 太阳能电池的转换效率  
Fig. 6. Conversion efficiency of  $Sb_2Se_3$  solar cells with and without defect states at different thickness.

如果将 $\text{Sb}_2\text{Se}_3$ 层的缺陷态去除,厚度的增加就不会对电池性能产生负面影响,因此电池效率就会随着厚度的增加单调递增,而此时效率的提高基本上与 $J_{sc}$ 的提高是同步的,但当厚度超过 $1.8\ \mu\text{m}$ 后效率的增加会放缓,这主要是由于绝大部分光谱能量已经吸收得较为完全,厚度的增加只能使 $700\ \text{nm}$ 以上的长波光有小幅度的增长(图7),当电池厚度为 $3\ \mu\text{m}$ 时,效率可以达到 $16.55\%$  ( $J_{sc} = 34.88\ \text{mA}/\text{cm}^2$ ,  $V_{oc} = 0.59\ \text{V}$ ,  $FF = 80.40\%$ ).  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳电池在简单的结构下就可以得到较高的转换效率,显示了 $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳电池的应用潜力,但值得注意的是,这一效率距离带隙相近的晶体硅太阳电池还有一定距离.在所模拟出的 $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳电池性能参数中, $J_{sc}$ 和 $FF$ 都已经达到了较高的水平,而 $V_{oc}$ 还有一定的提升空间,因此寻求提高 $V_{oc}$ 的有效方法,比如加入空穴传输层来优化器件结构是 $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  电池转换效率进一步提高的关键.

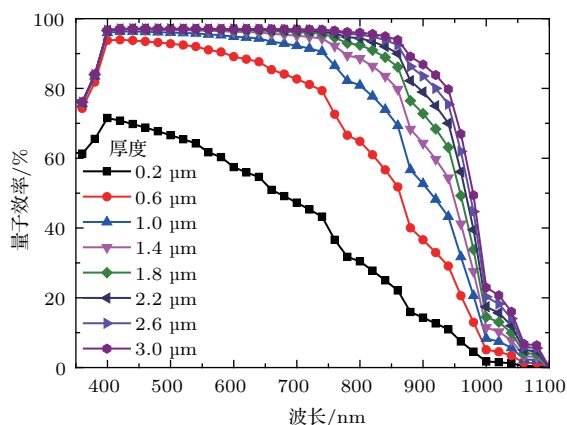


图7 不同厚度下无缺陷态 $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳电池的量子效率  
Fig. 7. Quantum efficiency of  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  solar cells without defect states at different thickness.

## 4 结 论

本文应用 wx-AMPS 模拟软件对 $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  薄膜太阳电池进行了模拟优化.首先研究了不同电子传输层模型对 $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳电池器件性能的影响.发现 $\chi_{e\text{-ETL}}$  是决定 $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳电池转换效率的关键.过高或过低的 $\chi_{e\text{-ETL}}$  都会使 $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  层的载流子复合率提高,导致太阳电池的填充因子降低,进而降低其器件性能.  $4.0\ \text{eV}$  到  $4.4\ \text{eV}$  之间是 $\chi_{e\text{-ETL}}$  的一个合适的选择范围.  $\chi_{e\text{-ETL}}$  在此范围内的 CdS 和 ZnO 均比较适宜作为 $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳电池的电子

传输层.其次,在优化 $\chi_{e\text{-ETL}}$  的基础上, $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  层材料质量的提高可以进一步提升电池性能.在去除 $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  层的缺陷态的情况下,厚度为 $0.6\ \mu\text{m}$  的 $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳电池转换效率可以由 $7.87\%$  显著提高到 $12.15\%$ .继续增加电池厚度到 $3\ \mu\text{m}$ ,转换效率可以提升至 $16.55\%$ .一方面体现了 $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳电池的应用潜力,另一方面说明优化 $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  层的薄膜质量是进一步提高电池性能的关键.

感谢伊利诺伊大学 Rockett 教授和刘一鸣博士对 wx-AMPS 模拟软件的开发.

## 参考文献

- [1] Lee T D, Ebong A U 2017 *Renew. Sustain. Energy Rev.* **70** 1286
- [2] Bosio A, Rosa G, Romeo N 2018 *Sol. Energy* DOI: 10.1016/j.solener.2018.01.018
- [3] Bermudez V 2017 *Sol. Energy* **146** 85
- [4] Yang W S, Noh J H, Jeon N J, Kim Y C, Ryu S, Seo J, Seok S 2015 *Science* **348** 1234
- [5] Chen C, Li W, Zhou Y, Chen C, Luo M, Liu X, Zeng K, Yang B, Zhang C, Han J, Tang J 2015 *Appl. Phys. Lett.* **107** 043905
- [6] 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]
- [7] Zhou Y, Leng M, Xia Z, Zhong J, Song H, Liu X, Yang B, Zhang J, Chen J, Zhou K, Han J, Cheng Y, Tang J 2014 *Adv. Energy Mater.* **4** 1301846
- [8] Choi Y C, Mandal T N, Yang W S, Lee Y H, Im S H, Noh J H, Seok S 2014 *Angew. Chem.* **126** 1353
- [9] Yuan C, Zhang L, Liu W, Zhu C 2016 *Sol. Energy* **137** 256
- [10] Liang G X, Zheng Z H, Fan P, Luo J T, Hu J G, Zhang X H, Ma H L, Fan B, Luo Z K, Zhang D P 2018 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **174** 263
- [11] Zhao B, Wan Z, Luo J, Han F, Malik H A, Jia C, Liu X, Wang R 2018 *Appl. Surf. Sci.* **450** 228
- [12] Liu X, Xiao X, Yang Y, Xue D J, Li D B, Chen C, Lu S, Gao L, He Y, Beard M C, Chen S, Tang J 2017 *Prog. Photovolt.: Res. Appl.* **25** 861
- [13] Zhou Y, Wang L, Chen S, Qin S, Liu X, Chen J, Xue D J, Luo M, Cao Y, Cheng Y, Sargent E H, Tang J 2015 *Nat. Photon.* **9** 409
- [14] Shen K, Ou C, Hang T, Zhu H, Li J, Li Z, Mai Y 2018 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **186** 58
- [15] Wang L, Li D B, Li K, Chen C, Deng H X, Gao L, Zhao Y, Jiang F, Li L, Huang F, He Y, Song H, Niu G, Tang J 2017 *Nat. Energy* **2** 17046
- [16] Chen C, Zhao Y, Lu S, Li K, Li Y, Yang B, Chen W, Wang L, Li D, Deng H, Yi F, Tang J 2017 *Adv. Energy Mater.* **7** 1700866

- [17] Lu S, Zhao Y, Chen C, Zhou Y, Li D, Li K, Chen W, Wen X, Wang C, Kondrotas R, Lowe N, Tang J 2018 *Adv. Electron. Mater.* **4** 1700329
- [18] Patrick C E, Giustino F 2011 *Adv. Funct. Mater.* **21** 4663
- [19] Wen X, Chen C, Lu S, Li K, Kondrotas R, Zhao Y, Chen W, Gao L, Wang C, Zhang J, Niu G, Tang J 2018 *Nat. Commun.* **9** 2179
- [20] Liu Y, Sun Y, Rockett A 2012 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **98** 124
- [21] Xiao Y P, Gao C, Wang T, Zhou L 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 158801 (in Chinese) [肖友鹏, 高超, 王涛, 周浪 2017 物理学报 **66** 158801]
- [22] Yaşar S, Kahraman S, Çetinkaya S, Apaydin S, Bilican I, Uluer I 2016 *Optik* **127** 8827
- [23] Gloeckler M, Fahrenbruch A L, Sites J R 2003 *Proceedings of 3rd World Conference on Photovoltaic Energy Conversion* Osaka, Japan, May 11–18, 2003 p491
- [24] Chen C, Bobela D C, Yang Y, Lu S, Zeng K, Ge C, Yang B, Gao L, Zhao Y, Beard M C, Tang J 2017 *Front. Optoelectron.* **10** 18
- [25] Zhang L, Li Y, Li C, Chen Q, Zhen Z, Jiang X, Zhong M, Zhang F, Zhu H 2017 *ACS Nano* **11** 12753
- [26] Lin L, Jiang L, Qiu Y, Fan B 2018 *J. Phys. Chem. Solids* **122** 19
- [27] Shi J J, Wei H Y, Zhu L F, Xu X, Xu Y Z, Lü S T, Wu H J, Luo Y H, Li D M, Meng Q B 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 038402 (in Chinese) [石将建, 卫会云, 朱立峰, 许信, 徐余颀, 吕松涛, 吴会觉, 罗艳红, 李冬梅, 孟庆波 2015 物理学报 **64** 038402]



# Simulation and optimal design of antimony selenide thin film solar cells\*

Cao Yu<sup>1)</sup> Zhu Xin-Yun<sup>1)</sup> Chen Han-Bo<sup>2)</sup> Wang Chang-Gang<sup>1)</sup> Zhang Xin-Tong<sup>2)</sup>  
Hou Bing-Dong<sup>2)</sup> Shen Ming-Ren<sup>1)</sup> Zhou Jing<sup>2)†</sup>

1) (Key Laboratory of Modern Power System Simulation and Control & Renewable Energy Technology, Ministry of Education (Northeast Electric Power University), Jilin 132012, China)

2) (School of Chemical Engineering, Northeast Electric Power University, Jilin 132012, China)

( Received 21 September 2018; revised manuscript received 1 November 2018 )

## Abstract

In this paper, the wx-AMPS simulation software is used to model and simulate the antimony selenide ( $\text{Sb}_2\text{Se}_3$ ) thin film solar cells. Three different electron transport layer models ( $\text{CdS}$ ,  $\text{ZnO}$  and  $\text{SnO}_2$ ) are applied to the  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  solar cells, and the conversion efficiencies of which are obtained to be 7.35%, 7.48% and 6.62% respectively. It can be seen that the application of  $\text{CdS}$  and  $\text{ZnO}$  can achieve a better device performance. Then, the electric affinity of the electron transport layer ( $\chi_{\text{e-ETL}}$ ) is adjusted from 3.8 eV to 4.8 eV to study the effect of the energy band structure change on the solar cell performance. The results show that the conversion efficiency of the  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  solar cell first increases and then decreases with the increase of the  $\chi_{\text{e-ETL}}$ . The lower  $\chi_{\text{e-ETL}}$  creates a barrier at the interface between the electron transport layer and the  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  layer, which can be considered as a high resistance layer, resulting in the increase of series resistance. On the other hand, when the  $\chi_{\text{e-ETL}}$  is higher than 4.6 eV, the electric field of the electron transport layer can be reversed, leading to the accumulation of the photon-generated carriers at the interface between the transparent conductive film and the electron transport layer, which could also hinder the carrier transport and increase the series resistance. At the same time, the electric field of  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  layer becomes weak with the value of  $\chi_{\text{e-ETL}}$  increasing according to the band structure of the  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  solar cell, leading to the increase of the carriers' recombination and the reduction of the cell parallel resistance. As a result, too high or too low  $\chi_{\text{e-ETL}}$  can lower the  $FF$  value and cause the device performance to degrade. Thus, to maintain high device performance, from 4.0 eV to 4.4 eV is a suitable range for the  $\chi_{\text{e-ETL}}$  of the  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  solar cell. Moreover, based on the optimization of the  $\chi_{\text{e-ETL}}$ , the enhancement of the  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  layer material quality can further improve the solar cell performance. In the case of removing the defect states of the  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  layer, the conversion efficiency of the  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  solar cell with a thickness of 0.6  $\mu\text{m}$  is significantly increased from 7.87% to 12.15%. Further increasing the thickness of the solar cell to 3  $\mu\text{m}$ , the conversion efficiency can be as high as 16.55% ( $J_{\text{sc}} = 34.88 \text{ mA/cm}^2$ ,  $V_{\text{oc}} = 0.59 \text{ V}$ ,  $FF = 80.40\%$ ). The simulation results show that the  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  thin film solar cells can obtain excellent performance with simple device structure and have many potential applications.

**Keywords:** antimony selenide, electron transport layer, thin film solar cell, wx-AMPS

**PACS:** 73.61.-r, 88.40.hj, 82.20.Wt

**DOI:** 10.7498/aps.67.20181745

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51772049), the Jilin Scientific and Technological Development Program, China (Grant No. 20170520159JH), and the "Thirteenth Five-Year" Scientific and Technological Research Project of the Education Department of Jilin Province, China (Grant No. JJKH20190705KJ).

† Corresponding author. E-mail: [zhoujing@neepu.edu.cn](mailto:zhoujing@neepu.edu.cn)