



## 高效硫硒化锑薄膜太阳能电池中的渐变能隙结构

曹宇 蒋家豪 刘超颖 凌同 孟丹 周静 刘欢 王俊尧

### Bandgap grading of $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$ for high-efficiency thin-film solar cells

Cao Yu Jiang Jia-Hao Liu Chao-Ying Ling Tong Meng Dan Zhou Jing Liu Huan Wang Jun-Yao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 128802 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20202016

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202016>

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

#### 硒化锑薄膜太阳能电池的模拟与结构优化研究

Simulation and optimal design of antimony selenide thin film solar cells

物理学报. 2018, 67(24): 247301 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181745>

#### p层空穴浓度及厚度对InGaN同质结太阳能电池性能的影响机理研究

Effects of p-layer hole concentration and thickness on performance of p-i-n InGaN homojunction solar cells

物理学报. 2019, 68(19): 196103 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191042>

#### 太阳能电池单二极管模型中的参数提取方法

Review of Parameter extraction methods for single-diode model of solar cell

物理学报. 2018, 67(19): 198801 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181024>

#### 宽带隙钙钛矿材料及太阳能电池的研究进展

Research progress of wide bandgap perovskite materials and solar cells

物理学报. 2020, 69(20): 207401 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200822>

#### Cu<sub>2</sub>O/ZnO氧化物异质结太阳能电池的研究进展

Progress of Cu<sub>2</sub>O/ZnO oxide heterojunction solar cells

物理学报. 2018, 67(11): 118401 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172037>

#### 硅异质结太阳能电池的物理机制和优化设计

Physical mechanism and optimal design of silicon heterojunction solar cells

物理学报. 2017, 66(10): 108801 <https://doi.org/10.7498/aps.66.108801>

# 高效硫硒化锑薄膜太阳能电池中的 渐变能隙结构\*

曹宇<sup>1)2)</sup> 蒋家豪<sup>1)2)</sup> 刘超颖<sup>1)2)</sup> 凌同<sup>1)2)</sup> 孟丹<sup>3)</sup>  
周静<sup>3)†</sup> 刘欢<sup>4)</sup> 王俊尧<sup>4)‡</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) (东北电力大学电气工程学院, 吉林 132012)

3) (东北电力大学化学工程学院, 吉林 132012)

4) (东北电力大学机械工程学院, 吉林 132012)

(2020年11月29日收到; 2021年1月18日收到修改稿)

硫硒化锑 ( $\text{Sb}_2(\text{S},\text{Se})_3$ ) 薄膜太阳能电池因其原材料丰富、制备方法简单、性能稳定等优势近年来得到了快速发展. 本文基于  $\text{Sb}_2(\text{S},\text{Se})_3$  吸光层能隙可调的特点, 应用 wx-AMPS 软件对具有渐变能隙  $\text{Sb}_2(\text{S},\text{Se})_3$  太阳能电池进行建模仿真和结构设计, 并与 50% Se 含量的恒定能隙  $\text{Sb}_2(\text{S},\text{Se})_3$  太阳能电池进行了对比分析. 结果显示, 递减能隙结构所形成的附加电场能够促进空穴的输运, 抑制载流子的复合, 相比与恒定能隙  $\text{Sb}_2(\text{S},\text{Se})_3$  太阳能电池可以得到更高的短路电流密度和填充因子, 使光电转换效率由 12.03% 提升至 14.42%. 此外, 递减能隙结构通过抑制载流子的复合, 有效地缓解  $\text{Sb}_2(\text{S},\text{Se})_3$  太阳能电池因厚度厚或者缺陷态高所引起的性能下降. 在厚度为 1.5  $\mu\text{m}$ , 缺陷态密度在  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  时. 采用递减能隙  $\text{Sb}_2(\text{S},\text{Se})_3$  太阳能电池的效率比恒定能隙  $\text{Sb}_2(\text{S},\text{Se})_3$  太阳能电池高 6.34%. 研究结果表明通过吸光层的能隙结构设计能够发挥  $\text{Sb}_2(\text{S},\text{Se})_3$  等多元合金或化合物的能隙可调的优势, 是提高太阳能电池器件性能的有效技术路线之一.

**关键词:** 硫硒化锑, 递减能隙, 太阳能电池, wx-AMPS

**PACS:** 88.40.hj, 85.30.De, 73.40.Lq

**DOI:** 10.7498/aps.70.20202016

## 1 引言

薄膜太阳能电池以其成本低廉、柔性可卷曲的特点得到了广泛关注<sup>[1-3]</sup>. 其中以硫化锑 ( $\text{Sb}_2\text{S}_3$ ) 和硒化锑 ( $\text{Sb}_2\text{Se}_3$ ) 为代表的锑基薄膜太阳能电池因其原材料丰富低毒、制备方法简单、吸收系数高和光电特性优异等优势, 近些年得到了快速发展<sup>[4-6]</sup>.  $\text{Sb}_2\text{S}_3$  的能隙约为 1.7 eV, 属于一种宽能隙吸光层材料, 其太阳能电池的光谱吸收限在 750 nm 左右<sup>[7]</sup>.

相比之下,  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  的能隙仅为 1.2 eV 左右, 属于一种窄能隙吸光层材料, 这使得  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳能电池的光谱吸收限可以扩宽至 1100 nm<sup>[8,9]</sup>. 然而根据 Shockley-Queisser 极限, 单结太阳能电池的最佳能隙约 1.4 eV, 介于  $\text{Sb}_2\text{S}_3$  与  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  之间<sup>[10]</sup>. 因此, 为了得到最佳的吸光层能隙, 可以通过 S 与 Se 原子所形成的替位式取代, 得到能隙可以在  $\text{Sb}_2\text{S}_3$  和  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  之间连续可调的硫硒化锑 ( $\text{Sb}_2(\text{S},\text{Se})_3$ ) 三元化合物<sup>[11]</sup>. 2020 年, 中国科学技术大学的陈涛课题组<sup>[12]</sup> 通过简单的水热法制备出了高质量的

\* 国家自然科学基金 (批准号: 51772049)、吉林省教育厅“十三五”科学技术研究项目 (批准号: JJKH20200105KJ, JJKH20190705KJ) 和吉林省发改委产业技术研究与开发项目 (批准号: 2019C042) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhoujing@neepu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: junyao\_0001@126.com

$\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  薄膜, 将其应用在太阳电池中得到了超过 10% 的光电转化效率 (PCE), 显示出了这种吸光层材料的开发潜力.

$\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  与铜铟镓硒 ( $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ )、非晶硅锗和钙钛矿等多元合金或化合物材料类似, 都可以通过改变元素配比调节材料的禁带宽度. 如果在制备的过程中或者通过后处理的方式, 使化合物中的元素比例随着厚度的变化而变化, 就能够制备出具有渐变能隙结构的吸光层 [13–15]. 这种能隙工程的概念已经成功应用在了多种太阳电池的器件结构的设计中, 并使电池性能得到了显著的优化. 在  $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$  太阳电池中, Mattheis 等 [16] 制备出了具有 Ga 梯度的吸光层, 通过导带能级梯度的优化提高了自由电子收集作用, 而改善了后接触界面的复合, 使得电池的短路电流密度 ( $J_{\text{sc}}$ ) 得到了有效的提升. 在非晶硅锗太阳电池中, Fan 等 [17] 采用射频等离子体增强化学气相沉积技术, 通过调节锗烷流量制备出具有渐变能隙结构的非晶硅锗吸光层, 使得电池中载流子迁移能力以及被传输层收集的概率得到提升, 使电池的  $J_{\text{sc}}$  和稳定性均高于恒定能隙非晶硅锗太阳电池. 在钙钛矿太阳电池仿真研究中, Liu 等 [18] 在器件背接触面一侧引入了渐变能隙结构, 所形成的电子势垒抑制了载流子在界面处的复合, 从而改善了电池性能.

渐变能隙结构也是提高  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳电池性能的一项关键技术. Choi 等 [19] 通过有序沉积  $\text{Sb}_2\text{S}_3$  和  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  来调整吸光层组分制备了渐变能隙的  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳电池, 其 PCE 高于恒定能隙的  $\text{Sb}_2\text{S}_3$  和  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  太阳电池. 而后, Zhang 等 [20] 使用化学浴沉积法, 通过控制 Se 与  $\text{Sb}_2\text{S}_3$  薄膜固相反应速率制备了具有渐变能隙的  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  薄膜, 发现渐变能隙不仅能够扩宽电池的光谱响应, 还能够促进空穴的输运, 使得电池的  $J_{\text{sc}}$  得到了优化, 并制备出了 PCE 为 5.71% 的  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳电池.

通过以上研究结果可以发现, 渐变能隙结构在多元合金或者化合物电池中都具有很大的研究价值, 对于其内在机理的研究也是十分必要的. 基于此, 我们采用 wx-AMPS 仿真软件, 对具有递减能隙结构的  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳电池进行了建模仿真. 首先通过载流子迁移率的调节探明渐变能隙结构与载流子输运特性的内在关系. 然后在不同厚度和缺陷态的条件下, 将递减能隙与恒定能隙结构的  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳电池进行了对比分析. 最后明确了递减能隙结构  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳电池的应用条件和

优势. 我们的研究结果对具有渐变能隙结构的高性能  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳电池的研发提供了理论指导.

## 2 器件结构与模拟参数

AMPS 是由宾夕法尼亚州立大学 Zhu 等 [21] 开发的太阳电池仿真工具, 在  $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$  和非晶硅等薄膜太阳电池的模拟研究上得到广泛的使用. 而后, 南开大学的 Liu 等 [22] 对 AMPS 的算法进行了改进, 并开发了 wx-AMPS 软件. 该软件采用 Newton 和 Gummel 相结合的新方法, 使仿真具有更快的速度和更好的稳定性. 此外, wx-AMPS 对于在电池模型的构造中对层数不再进行限制, 这使得对渐变能隙这样精细吸光层结构设计更加的准确和可靠.

$\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳电池的器件结构为 FTO/CdS/ $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$ /Spiro-OMeTAD/Au, 如图 1 所示. 我们设计了递减能隙的  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳电池, 即将 Se 含量为 0% 的  $\text{Sb}_2\text{S}_3$  层设置为起始层, 随着吸光层深度的加深线性增加 Se 含量, 到吸光层末端对应 Se 含量为 100% 的  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  层. 其中  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  的禁带宽度、电子亲和势和介电常数均随着 Se 含量呈线性变化, 相邻渐变层之间 Se 含量的差值为 1% [23]. 也引入了 50% Se 含量的恒定能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳电池进行比较研究. 通过调节载流子传输层的电子亲和势消除界面势垒对载流子运输的影响. 各层模型的具体参数如表 1 所列 [24–29], 其中将  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  吸光层电子的迁移率 ( $\mu_e$ ) 由  $0.1 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$  变化至  $10 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ , 同时固定空穴迁移率 ( $\mu_h$ ) 为  $0.1 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ ;  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  吸光层的厚度由  $0.25 \text{ }\mu\text{m}$  变化至  $2 \text{ }\mu\text{m}$ ;  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  吸光层的缺陷态密度由  $10^{14} \text{ cm}^{-3}$  变化至  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ .

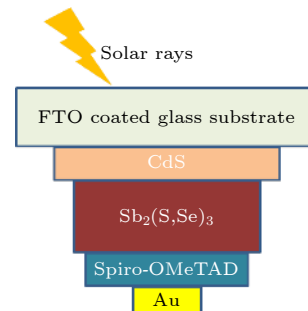


图 1  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳电池的结构示意图

Fig. 1. Schematic diagram of the  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  solar cell structure.

仿真温度设定在 300 K, 太阳光谱选用的是 AM 1.5G, 入射光强度为 100 mW/cm<sup>2</sup>.

表 1 Sb<sub>2</sub>(S,Se)<sub>3</sub> 太阳能电池材料参数  
Table 1. Material parameters of the Sb<sub>2</sub>(S,Se)<sub>3</sub> solar cells.

参数	CdS	Sb <sub>2</sub> (S,Se) <sub>3</sub>	Spiro-OMeTAD
介电常数	10	10—19	3
电子亲和势/eV	3.7—3.87	3.7—4.04	1.99—2.41
电子迁移率/(cm <sup>2</sup> ·V <sup>-1</sup> ·s <sup>-1</sup> )	100	4	0.0001
空穴迁移率/(cm <sup>2</sup> ·V <sup>-1</sup> ·s <sup>-1</sup> )	25	0.1	0.0001
施主掺杂浓度/cm <sup>-3</sup>	1 × 10 <sup>19</sup>	0	0
受主掺杂浓度/cm <sup>-3</sup>	0	1 × 10 <sup>13</sup>	3 × 10 <sup>18</sup>
禁带宽度/eV	2.4	1.2—1.7	2.91
导带有效态密/cm <sup>-3</sup>	2.2 × 10 <sup>18</sup>	2.2 × 10 <sup>18</sup>	2.2 × 10 <sup>18</sup>
价带有效态密/cm <sup>-3</sup>	1.8 × 10 <sup>19</sup>	1.8 × 10 <sup>19</sup>	1.8 × 10 <sup>19</sup>
缺陷态密度/cm <sup>-3</sup>	1 × 10 <sup>17</sup>	3 × 10 <sup>16</sup>	1 × 10 <sup>16</sup>

### 3 结果与讨论

图 2(a) 给出了递减能隙与恒定能隙的 Sb<sub>2</sub>(S,Se)<sub>3</sub> 太阳能电池的 *J-V* 曲线. 具体的电池参数如表 2 所列. 递减能隙 Sb<sub>2</sub>(S,Se)<sub>3</sub> 太阳能电池获得了 0.82 V 的开路电压 (*V*<sub>oc</sub>), 22.94 mA·cm<sup>-2</sup> 的 *J*<sub>sc</sub>, 77.04% 的填充因子 (FF), 得到了 14.42% 的 PCE. 其中, 递减能隙中吸光层的 Se 含量由 0% 线性增加到 100%, 此时吸收层的平均 Se 含量为 50%. 相比之下, 50% Se 含量固定能隙 Sb<sub>2</sub>(S,Se)<sub>3</sub> 太阳能电池的 PCE 为 12.03%. 递减能隙 Sb<sub>2</sub>(S,Se)<sub>3</sub> 太阳能电池性能优于恒定能隙的原因是它具有更高的 *J*<sub>sc</sub> 和 FF.

Sb<sub>2</sub>(S,Se)<sub>3</sub> 太阳能电池中存在一定强度的内建电场. 在吸光层中产生的光生电子-空穴对会在内建电场的作用下分离, 被两个电极收集并形成电流. 其中电子与空穴的输运性能可以通过漂移速度 *ν* 来衡量<sup>[30]</sup>:

$$\nu = E \times \mu, \quad (1)$$

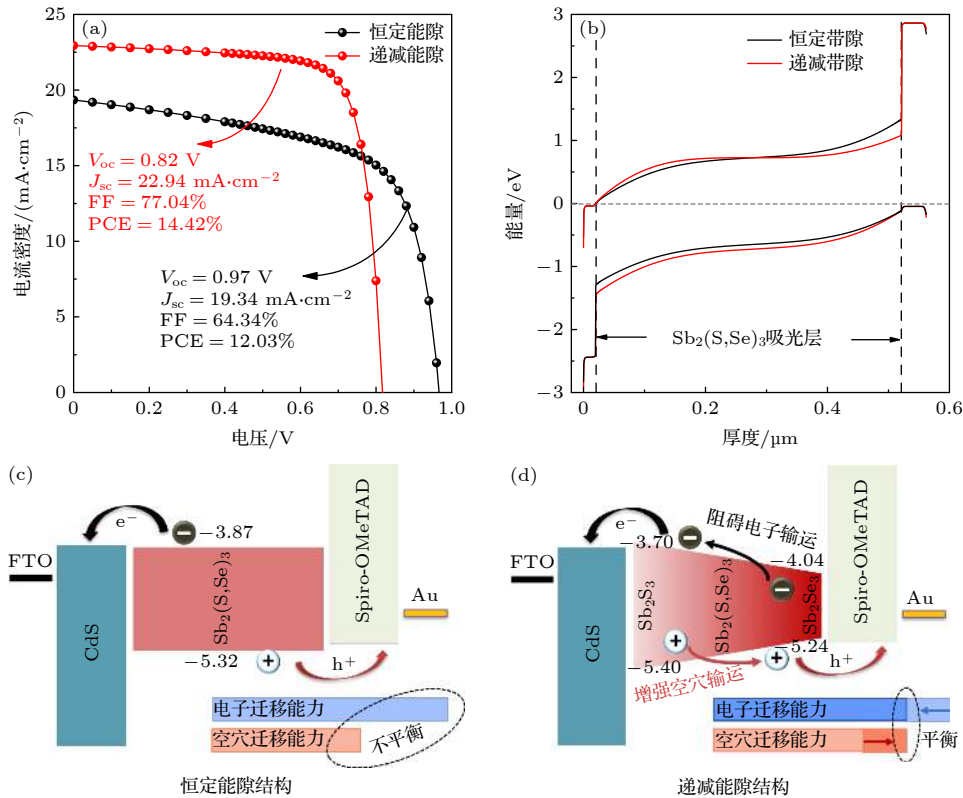


图 2 递减能隙与恒定能隙的 Sb<sub>2</sub>(S,Se)<sub>3</sub> 太阳能电池 (a) *J-V* 曲线; (b) 能带图; (c) 恒定能隙 Sb<sub>2</sub>(S,Se)<sub>3</sub> 太阳能电池能带结构示意图; (d) 递减能隙 Sb<sub>2</sub>(S,Se)<sub>3</sub> 太阳能电池能带结构示意图

Fig. 2. Sb<sub>2</sub>(S,Se)<sub>3</sub> solar cells with narrowing and constant band gap structure: (a) *J-V* curves; (b) energy band diagram; (c) energy band scheme of constant band gap Sb<sub>2</sub>(S,Se)<sub>3</sub> solar cell; (d) energy band scheme of narrowing band gap Sb<sub>2</sub>(S,Se)<sub>3</sub> solar cell.

表 2 不同 $\mu_e$ 的  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  递减能隙结构太阳能电池的性能参数

Table 2. Photovoltaic performance of the narrowing band gap structure  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  solar cell with different  $\mu_e$ .

$\mu_e/(\text{cm}^2\cdot\text{V}^{-1}\cdot\text{s}^{-1})$	$V_{oc}/\text{V}$	$J_{sc}/(\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2})$	FF/%	PCE/%
0.1	0.93	20.00	52.50	9.74
0.25	0.87	21.77	63.39	12.05
1	0.83	22.77	73.44	13.89
5	0.82	22.95	77.18	14.46
10	0.81	22.95	77.72	14.51

其中  $E$  为电场强度,  $\mu$  为载流子迁移率. 在恒定能隙的  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池中, 电子和空穴所受的电场强度是一致的, 但由于空穴的迁移率低于电子迁移率, 使得空穴漂移速度较低, 这导致空穴在运输过程中被复合的概率要显著高于电子, 成为了限制器件性能的关键因素. 这时载流子在  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  吸光层中的运输是不平衡的 (图 2(c)). 通过图 2(b) 递减能隙与恒定能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池的能带

对比图可以看出, 递减能隙结构会使导带的能极差降低, 而价带的能极差增加, 相当于在 50% Se 含量  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  吸光层的原有电场下, 叠加了一个附加电场. 这个附加电场会使得自由电子所受电场强度减弱, 空穴所受电场强度增强, 也就是阻碍了自由电子的运输而增强了空穴的运输. 在提高空穴的漂移速度的同时降低电子的漂移速度, 最终使得电子与空穴具有相近的漂移速度 (图 2(d)), 使得载流子的迁移能力变得较为平衡, 因此获得了更高的 PCE. 由此我们认为渐变能隙的应用和吸光层中载流子的迁移率是密不可分的, 为了进一步揭示渐变能隙优化器件性能的内在机理, 探究了不同载流子迁移率递减能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池的性能.

图 3 给出了改变  $\mu_e$  由  $0.1 \text{ cm}^2\cdot\text{V}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$  提高至  $10 \text{ cm}^2\cdot\text{V}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$  的递减能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池特性图, 具体性能参数如表 2 所列. 在递减能隙结构中, 当  $\mu_e$  与  $\mu_h$  相等时, 附加电场的存在使得自由电子所受电场强度要低于空穴所受电场强度, 导致自

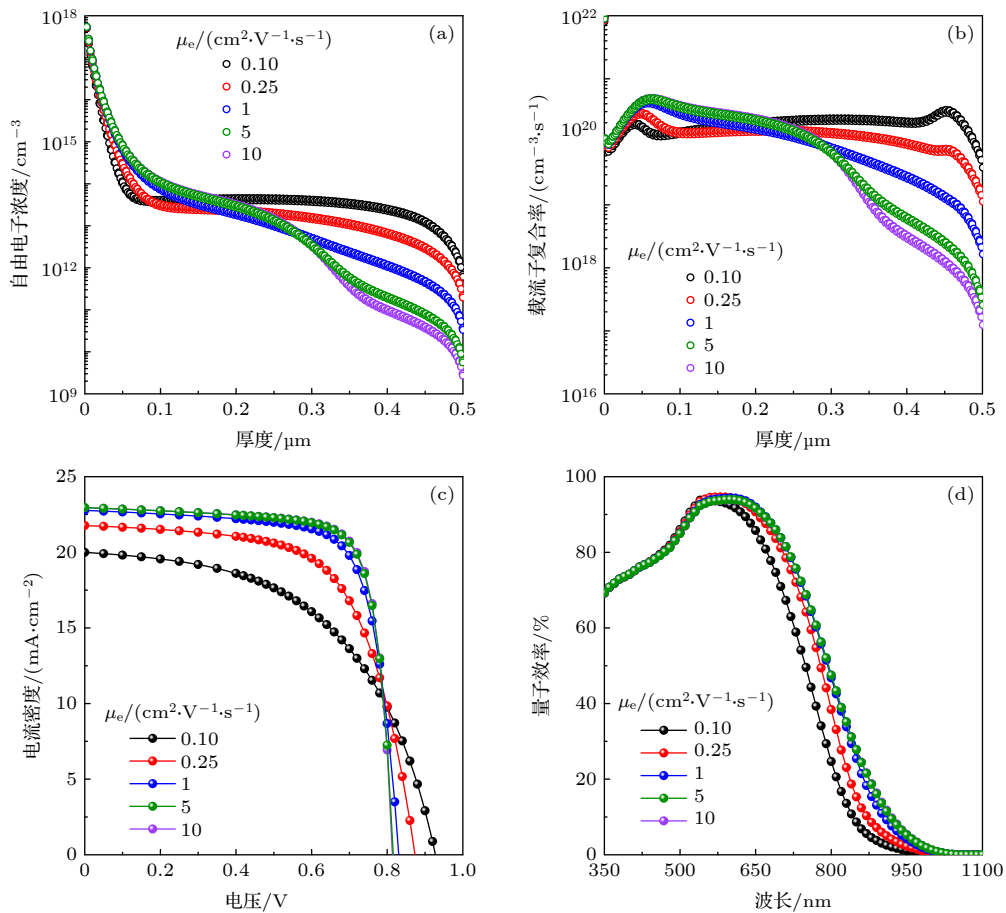


图 3 不同 $\mu_e$ 的递减能隙结构  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池 (a) 自由电子浓度分布; (b) 载流子复合率分布; (c)  $J$ - $V$  曲线; (d) 量子效率曲线  
Fig. 3. Narrowing band gap structure  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  solar cells with different  $\mu_e$ : (a) Free electron concentration distribution; (b) recombination rate distribution; (c)  $J$ - $V$  curves; (d) quantum efficiency curves.

由电子的传输受到了抑制. 通过图 3(a) 不同  $\mu_e$  下  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  的自由电子浓度可以看到, 此时自由电子在吸光层 0.2 至 0.5  $\mu\text{m}$  处具有最高的浓度, 说明自由电子在电池尾部产生堆积, 不能有效地被电子传输层收集, 导致此处具有最高的载流子复合率, 如图 3(b) 所示. 此时电池的  $J_{sc}$  和 FF 最低, 仅有 9.74% 的 PCE. 该电池效率小于 50% 恒定能隙的  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳电池, 这是因为当吸光层中  $\mu_e$  与  $\mu_h$  相近时, 递减能隙反而会使自由电子传输特性劣化, 使载流子输运变得不平衡, 也说明渐变能隙结构并不适用于所有的电池特性情况.

随着  $\mu_e$  的提升, 自由电子的输运逐渐克服了渐变能隙所产生的附加电场对电子输运的不利影响, 使更多电池尾端产生的光生自由电子可以输运到电子传输层. 因此, 如图 3(a) 所示, 递减能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  吸光层后半部分的自由电子浓度会随着  $\mu_e$  的提高而降低, 也使得这部分的载流子复合率逐渐降低 (图 3(b)). 图 3(d) 为不同  $\mu_e$  递减能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳电池的量子效率曲线. 由于电池后半部分的光生载流子主要源于吸收的长波光, 因此复合的降低使得电池在 600—1100 nm 的长波响应得到增强<sup>[20,31]</sup>. 这也使得  $J_{sc}$  由 20.00  $\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$  逐渐提高至 22.95  $\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$ . 载流子复合率的降低也使得电池 FF 由 52.5% 提高至了 77.72%. 通过上述分析可知, 渐变能隙的设置与载流子的迁移率关系密切, 当吸光层的  $\mu_e$  与  $\mu_h$  相近时, 是无需引入渐变能隙结构的. 在实验中, 在固定  $\mu_h$  为  $0.1 \text{ cm}^2\cdot\text{V}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ ,  $\mu_e$  为  $0.25 \text{ cm}^2\cdot\text{V}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$  的情况下就可以得到与恒定能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳电池相似的器件性能. 而当  $\mu_e$  高于  $0.25 \text{ cm}^2\cdot\text{V}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$  之后, 就能够逐渐体现出递减能隙结构的优势. 当  $\mu_e$  为  $5 \text{ cm}^2\cdot\text{V}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$  时, 器件获得了 14.46% 的 PCE, 而在此基础上继续增加  $\mu_e$  至  $10 \text{ cm}^2\cdot\text{V}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ , 电池性能仅有微弱的增长. 这说明递减能隙所产生附加电场的作用在  $\mu_e$  为  $5 \text{ cm}^2\cdot\text{V}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$  时就能够发挥的较为充分. 在无机吸光层材料中, 一般情况下  $\mu_h$  都是器件性能的限制因素, 因此, 引入递减能隙以平衡调节载流子输运是优化器件性能的有效手段.

目前在实验研究中, 对于不同 Se 含量的  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  的能带位置还没有确定结论<sup>[19,20]</sup>, 因此能带位置的不同是否会对渐变能隙的作用产生影响是一个需要探明的问题. 为此建立了两种模型: 一种为  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  的导带随 Se 含量变化在 3.7 和

4.04 eV 之间线性变化; 另一种为  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  的导带随 Se 含量的变化一直固定在 3.7 eV. 两种能带位置  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳电池的仿真结果如图 4 所示. 导带位置固定与不固定  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳电池的 PCE 分别为 14.56% 和 14.42%. 两者 PCE 基本相同, 表明  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  导带位置并不会对附加电场产生影响. 当  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳电池形成 pn 结时, 费米能级需要对齐, 虽然在两种模型下  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  的导带位置不相同, 但是导带与费米能级之间的距离确是相同的, 如图 4(c) 所示. 因此在费米能级对齐后, 两种模型所形成的导带和价带形状是基本相同的, 因此能够表现出相同强度的附加电场.

在制备  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  薄膜的实验中, 缺陷态密度对应着薄膜质量, 是决定器件性能的重要参数之一. 缺陷态密度也有可能随 Se 含量的改变而变化<sup>[32]</sup>. 我们构造了缺陷态密度随 Se 含量增加由  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  线性减少到  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$  的递减能隙模型, 发现不同  $\mu_e$  的  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  递减能隙结构太阳电池性能的变化趋势与缺陷态恒定所展现出的变化规律相同, 如图 5 所示. 此外, 硅锗薄膜具有与  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  相似的能隙可调特性, 在对硅锗薄膜太阳电池渐变能隙结构的理论和实验研究中也得到了与本文相似的结论<sup>[33,34]</sup>. 基于此, 我们认为在实际的  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳电池中, 递减能隙结构能够发挥出平衡载流子输运的作用.

鉴于渐变能隙能够优化太阳电池的载流子输运特性, 将不同厚度的缺陷态递减能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳电池和恒定能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳电池性能进行了对比分析. 图 6(a) 为不同厚度递减能隙与恒定能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳电池的相对效率. 如图 6(a) 所示, 恒定能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳电池在厚度为 0.25  $\mu\text{m}$  时取得了最大值, 并且效率会随着厚度的增加而下降. 这是由于当厚度增加时, 不仅内建电场的场强会变弱, 光生载流子输运到传输层的距离也会变长, 这都使得载流子被复合的概率大大增加. 通过图 6(b) 所示的不同厚度恒定能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳电池的载流子复合率分布, 可以看到随着吸光层厚度的增加, 不仅使得吸光层前端的复合率不断提高, 同时也使得高复合的区域被延伸. 当厚度为 1.5  $\mu\text{m}$  时, 电池在整个吸光层中会保持高的复合率, 使得电池的性能劣化至厚度为 0.25  $\mu\text{m}$  时的 14.12%. 而当采用递减能隙时, 随着厚度的增加,  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳电池性能的衰退被大

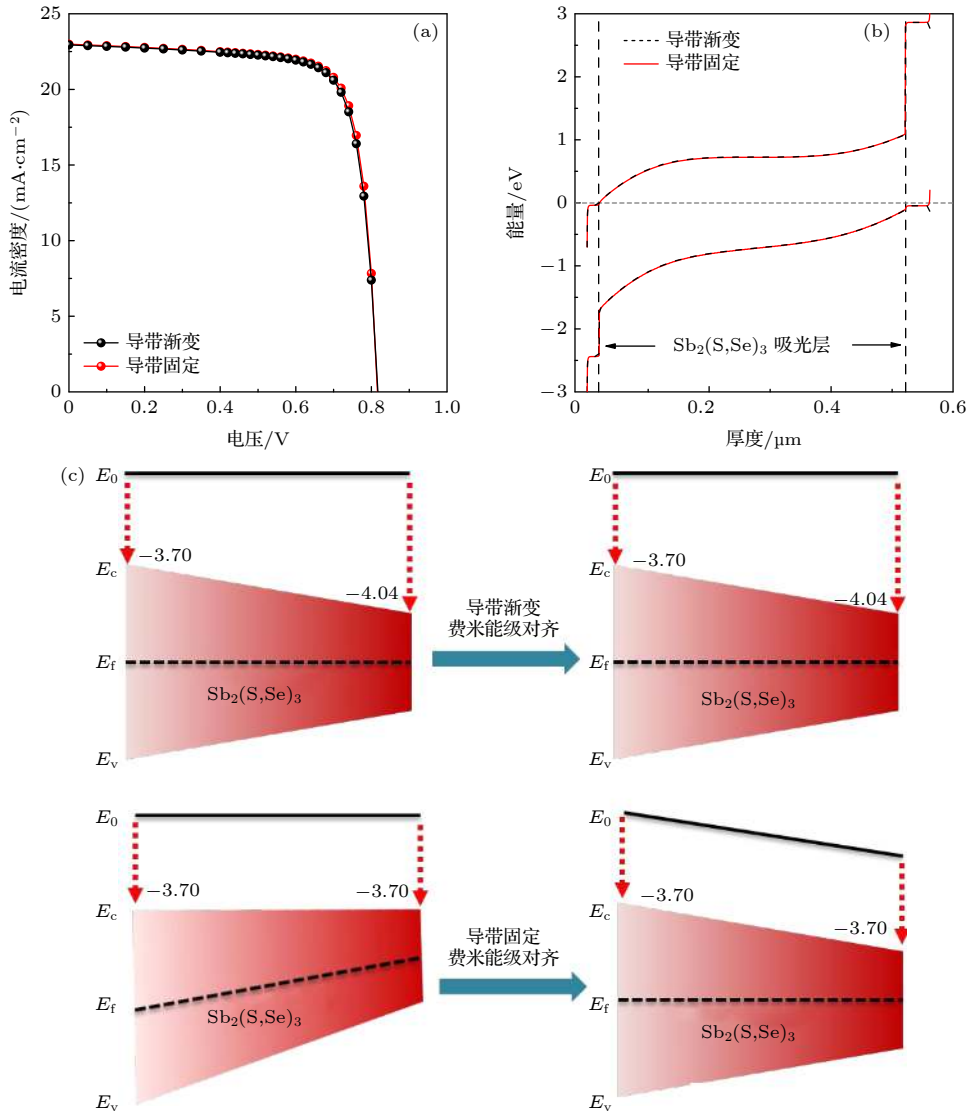


图 4 不同导带位置递减能隙的  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池 (a)  $J$ - $V$  曲线; (b) 能带图; (c) 费米能级对齐示意图

Fig. 4. Narrowing band gap  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  solar cells with different conduction band positions: (a)  $J$ - $V$  curves; (b) energy band diagram; (c) energy band scheme of Fermi level alignment.

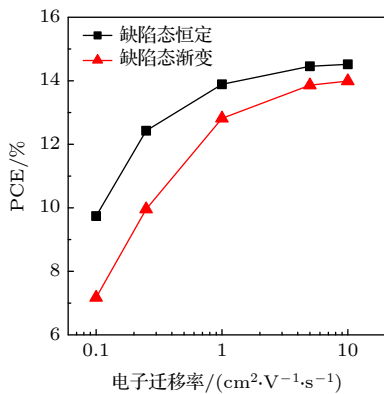


图 5 不同缺陷态分布递减能隙的  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池的 PCE 随  $\mu_e$  的变化

Fig. 5. Narrowing band gap  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  solar cells with different defect state distributions as a function of  $\mu_e$ .

大地缓解了, 电池的各项参数的下降幅度均小于恒定能隙, 其中递减能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池在吸光层厚度为  $0.5 \mu\text{m}$  时获得了最高的效率. 当吸收层厚度为  $1.5 \mu\text{m}$  时, 递减能隙太阳能电池还能保持厚度为  $0.25 \mu\text{m}$  时的  $40.71\%$ . 从图 6(b) 所示的递减能隙与恒定能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池复合率分布的比较可以看出, 递减能隙的  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池的复合率在吸光层前端有显著降低, 说明此时渐变能隙所产生的附加电场有效地提升了空穴的迁移能力遏制了  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  器件性能的劣化. 值得注意的是, 随着锑基太阳能电池的发展, 将不同能隙锑基太阳能电池结合起来形成多结叠层太阳能电池结构将是进一步提高电池性能的有效途径 [35]. 此时,

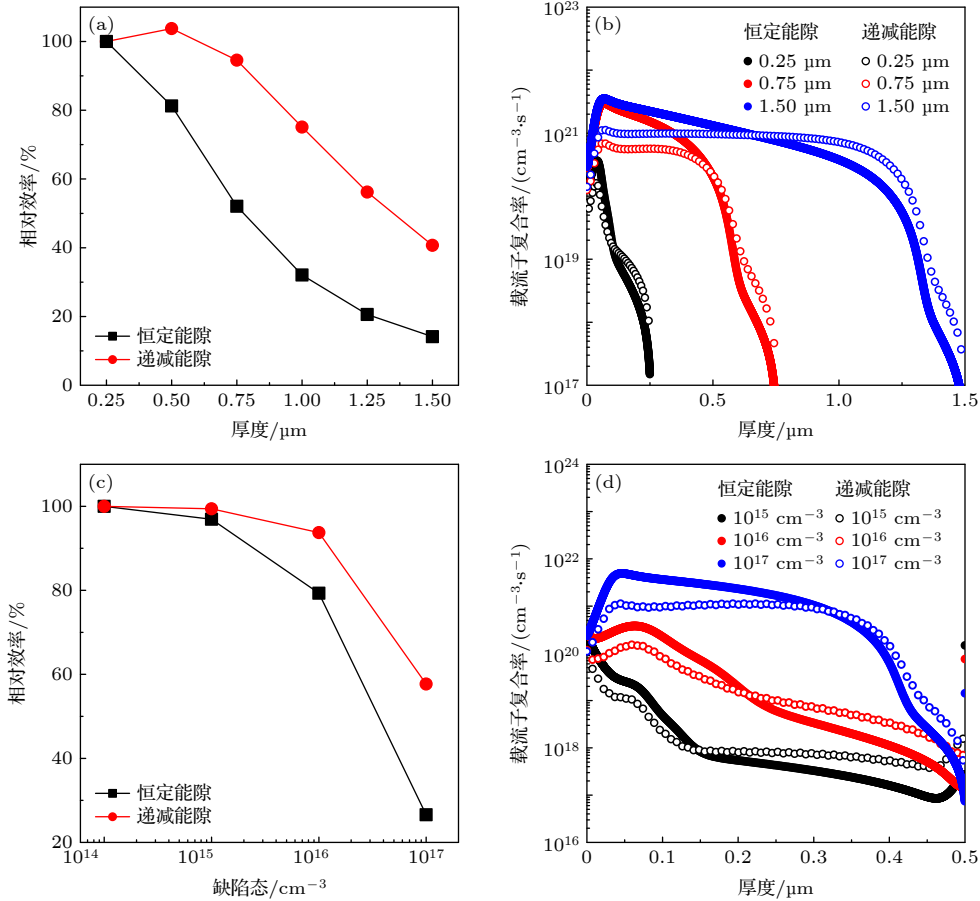


图 6 (a) 恒定能隙与递减能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池的相对效率随厚度的变化, 此处相对效率指的是以厚度为  $0.25 \mu\text{m}$   $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池效率为基准计算出的效率比值; (b) 恒定能隙与递减能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池的载流子复合率分布随厚度的变化; (c) 恒定能隙与递减能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池的相对效率随缺陷态密度的变化, 此处相对效率指的是以缺陷态密度为  $10^{14} \text{cm}^{-3}$   $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池效率为基准计算出的效率比值; (d) 恒定能隙与递减能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池的载流子复合率分布随缺陷态密度的变化

Fig. 6. (a) Relative PCE of constant band gap and narrowing band gap  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  solar cells with different thicknesses. Here, the relative PCE refers to the PCE ratio calculated by applying the PCE of  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  solar cell with  $0.25 \mu\text{m}$  thick as the denominator; (b) the carrier recombination rate distribution of constant band gap and narrowing band gap  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  solar cells with different thicknesses; (c) the relative PCE of constant band gap and narrowing band gap  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  solar cells with different defect densities. Here, the relative PCE refers to the PCE ratio calculated by applying the PCE of  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  solar cell with the defect density of  $10^{14} \text{cm}^{-3}$  as the denominator; (d) the carrier recombination rate distribution of constant band gap and narrowing band gap  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  solar cells with different defect densities.

$\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  一般需要作为叠层电池中间电池或者底电池的吸收层. 要想达到各结子电池的电流匹配, 中间电池或者底电池的厚度一般高于  $1 \mu\text{m}$  以尽可能吸收长波光子<sup>[36]</sup>. 递减能隙结构  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池在厚度较厚的情况下仍可以保持较高的器件性能, 体现了其在叠层太阳能电池中的应用潜力.

图 6(c) 给出了不同缺陷态递减能隙与恒定能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池的相对效率. 在缺陷态小于  $10^{15} \text{cm}^{-3}$  时,  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池性能随着缺陷态的变化基本保持不变, 而当缺陷态密度高于  $10^{15} \text{cm}^{-3}$  以后, 两种能隙结构  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池

的性能都会随着缺陷态密度的提高而降低. 我们发现递减能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池的性能下降速度要低于恒定能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池, 在缺陷态密度为  $10^{17} \text{cm}^{-3}$  时, 递减能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池仍能保持 57.70% 的相对效率, 明显高于恒定能隙的 26.57%. 通过对比不同缺陷态密度的恒定能隙和递减能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  的复合率分布可以发现(图 6(d)), 递减能隙结构的优势在于, 可以有效地抑制吸光层前端的载流子复合, 使器件在高缺陷态下仍可以保持较高的器件性能.

总结以上结果发现, 递减能隙在吸光层较厚或



缺陷态密度较高的情况下均保持了较高的器件性能,为进一步探究递减能隙在  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池中的适用条件. 绘制了递减能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池与恒定能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池效率差值的等高线图,结果如图 7 所示. 在  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池厚度很薄,或者缺陷态很低的情况下,尽管恒定能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  吸光层的  $\mu_{\text{h}}$  较低,但由于此时光生载流子被复合的概率也很低,使得绝大多数空穴都能够成功被空穴传输层所收集,因此不会对器件性能造成不利影响. 这导致递减能隙附加电场的作用不能得到体现,其器件性能要小于恒定能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池. 而随着吸光层厚度和缺陷态密度的增加,递减能隙结构的优势能够逐渐显现. 在吸光层缺陷态密度为  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$  时,递减能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池在厚度高于  $1 \mu\text{m}$  之后具有更高的器件性能. 而当吸光层缺陷态密度为  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  时,递减能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池在厚度高于  $0.5 \mu\text{m}$  之后就具有更高的器件性能了. 当  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池厚度和缺陷态密度分别为  $1.5 \mu\text{m}$  和  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  时,两种结构太阳能电池的 PCE 具有最大的 6.34% 的差值,显示出了递减能隙结构的优势. 而当吸光层厚度和缺陷态密度继续增加,  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池效率的差值又有所降低,这是由于此时吸光层的载流子复合率都过高,这两种结构  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池的 PCE 都很低所导致的. 虽然  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池在近些年得到了快速发展,但其 PCE 距离类似结构的碲化镉太阳能电池和钙钛矿太阳能电池还有较大的优化空间. 其中吸光

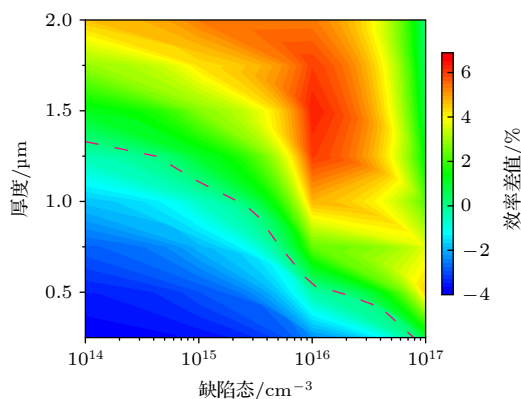


图 7 不同厚度与缺陷态下恒定能隙与递减能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池效率之差的等高线图

Fig. 7. Contour map of the PCE difference between the constant band gap and narrowing band gap structure  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  solar cells with different thicknesses and defect densities.

层材料中较高的缺陷态密度 (铋基材料的缺陷态密度比碲化镉材料要高一到两个数量级<sup>[37]</sup>) 导致的高复合率是铋基太阳能电池效率较低的主要原因之一<sup>[38,39]</sup>. 因此,在  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池中应用渐变能隙是提高电池效率的有效手段. 基于太阳能电池吸光层材料中,  $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$  材料、非/微晶硅锗材料和钙钛矿材料都具有能隙可调的性质. 本文所总结出的渐变能隙结构的研究成果也可以为以上多元合金或化合物太阳能电池的器件结构设计提供理论指导.

## 4 结论

本文应用 wx-AMPS 软件对  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  薄膜太阳能电池的渐变能隙结构进行了模拟分析. 首先研究了载流子迁移率对递减能隙太阳能电池的性能影响,发现在  $\mu_{\text{e}}$  高于  $\mu_{\text{h}}$  时,递减能隙结构相比与恒定能隙结构具有明显的性能优势,其原因在于这种能隙结构能够形成辅助空穴输运而阻碍自由电子输运的附加电场,在降低自由电子迁移能力的同时,提高了空穴的迁移能力,以此平衡载流子的输运,使得  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池的  $J_{\text{sc}}$  和 FF 得到了显著的提高, PCE 由 12.03% 提高至了 14.42%. 其次,针对不同厚度以及缺陷态密度对递减能隙和恒定能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池进行对比分析,发现吸光层厚度和缺陷态密度的增加会引起较高的载流子复合,而递减能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池所产生的附加电场能通过增强空穴迁移,有效地抑制输运过程中所产生的载流子复合. 当缺陷态密度在  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  厚度在  $1.25\text{--}1.75 \mu\text{m}$  时,递减能隙  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  太阳能电池能发挥出最大的性能优势. 本文的研究结果不仅可以为  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  薄膜太阳能电池的优化制备提供指导,也能够在其他具有能隙可调特性的多元合金或化合物太阳能电池中得以应用.

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] Giraldo S, Jehl Z, Placidi M, Izquierdo-Roca V, Perez-Rodriguez A, Saucedo E 2019 *Adv. Mater.* **31** 1806692
- [2] Ramamujam J, Bishop D M, Todorov T K, Gunawan O, Rath J, Nekovei R, Artagiani E, Romeo A 2020 *Mater. Sci.* **110** 100619

- [3] Lei H W, Chen J J, Tan Z J, Fang G J 2019 *Solar RRL* **3** 1900026
- [4] Liang G X, Luo Y D, Chen S, Tang R, Zheng Z H, Li X J, Liu X S, Liu Y K, Li Y F, Chen X Y, Su Z H, Zhang X H, Ma H L, Fan P 2020 *Nano Energy* **73** 104806
- [5] 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]
- [6] Tang R, Zheng Z H, Su Z H, Li X J, Wei Y D, Zhang X H, Fu Y Q, Luo J T, Fan P, Liang G X 2019 *Nano Energy* **64** 103929
- [7] Kondrotas R, Chen C, Tang J 2018 *Joule* **2** 857
- [8] Mavlonov A, Razykov T, Raziq F, Gan J, Chantana J, Kawano Y, Nishimura T, Wei H, Zakutayev A, Minemoto T, Zu X, Li S, Qiao L 2020 *Sol. Energy* **201** 227
- [9] Luo Y D, Tang R, Chen S, Hu J G, Liu Y K, Li Y F, Liu X S, Zheng Z H, Su Z H, Ma X F, Fan P, Zhang X H, Ma H L, Chen Z G, Liang G X 2020 *Chem. Eng. J.* **293** 124599
- [10] Maximilian A, Silvana B, Miguel A L M, Thomas J L, Stefan G 2015 *Phys. Rev. B* **92** 14101
- [11] Yang B, Qin S, Xue D J, Chen C, He Y S, Niu D M, Huang H, Tang J 2017 *Prog. Photovoltaics Res. Appl.* **25** 113
- [12] Tang R F, Wang X M, Lian W T, Huang J L, Wei Q, Huang M L, Yin Y W, Jiang C H, Yang S F, Xing G H, Chen S Y, Zhu C F, Hao X J, Green M A, Chen T 2020 *Nat. Energy* **5** 587
- [13] Li K H, Lu Y, Ke X X, Li S, Lu S C, Wang C, Wang S Y, Chen C, Tang J 2020 *Solar RRL* **4** 2000220
- [14] Pham D P, Kim S, Park J, Le A T, Cho J, Jung J, Iftiqar S M, Yi J 2016 *Mater. Sci. Semicond. Process.* **56** 183
- [15] Chen J F, Ren H Z, Hou F H, Zhou Z X, Ren Q S, Zhang D K, Wei C C, Zhang X D, Hou G H, Zhao Y 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 028101 (in Chinese) [陈俊帆, 任慧志, 侯福华, 周忠信, 任千尚, 张德坤, 魏长春, 张晓丹, 侯国付, 赵颖 2019 物理学报 **68** 028101]
- [16] Mattheis J, Rostan P J, Rau U, Werner J H 2007 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **91** 689
- [17] Fan Q H, Chen C Y, Liao X B, Xiang X B, Zhang S B, Ingler W, Adiga N, Hu Z H, Cao X M, Du W H, Deng X M 2010 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **94** 1300
- [18] Liu Y T, Chen Y H, Lin C C, Fan C M, Liu J C, Tung Y L, Tsai S Y 2017 *Mater. Res. Express* **4** 075505
- [19] Choi Y C, Lee Y H, Im S H, Noh J H, Mandal T N, Yang W S, Seok S 2014 *Adv. Energy Mater.* **4** 1301680
- [20] Zhang Y, Li J M, Jiang G S, Liu W F, Yang S F, Zhu C F, Chen T 2017 *Solar RRL* **1** 1700017
- [21] Zhu H, Kalkan A K, Hou J, Fonash S J 1999 *Proceedings of NCPV 15th Program Review Meeting Denver, Colorado, USA, September 9–11 1998* p309
- [22] Liu Y M, Sun Y, Rockett A 2012 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **98** 124
- [23] Wang X M, Tang R F, Wu C Y, Zhu C F, Chen T 2018 *J. Energy Chem.* **27** 713
- [24] Cao Y, Zhu X X, Chen H B, Wang C G, Zhang X T, Hou B D, Shen M R, Zhou J 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 247301 (in Chinese) [曹宇, 祝新运, 陈翰博, 王长刚, 张鑫童, 侯秉东, 申明仁, 周静 2018 物理学报 **67** 247301]
- [25] Teimouri R, Heydari Z, Ghaziani M P, Madani M, Abdy H, Kolahdouz M, Asl-Soleimani E 2020 *Superlattices Microstruct.* **145** 106627
- [26] Islam M T, Thakur A K 2020 *Sol. Energy* **202** 304
- [27] Li Z Q, Ni M, Feng X D 2020 *Mater. Res. Express* **7** 016416
- [28] Cai Z H, Dai C M, Chen S Y 2020 *Solar RRL* **4** 1900503
- [29] Chen S, Qiao X, Wang F, Luo Q, Zhang X, Wan X, Xu Y, Fan X 2016 *Nanoscale* **8** 2277
- [30] Lee C T, Lu K F, Tseng C Y 2015 *Sol. Energy* **114** 1
- [31] Cao Y, Xue L, Zhou J, Wang Y J, Ni J, Zhang J J 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 146801 (in Chinese) [曹宇, 薛磊, 周静, 王义军, 倪攀, 张建军 2016 物理学报 **65** 146801]
- [32] Deng H, Yuan S J, Yang X K, Zhang J, Khan J, Zhao Y, Isaq M, Ye W, Cheng Y B, Song H S, Tang J 2018 *Prog. Photovoltaics Res. Appl.* **26** 281
- [33] Bernhard N, Bauer G H, Bloss W H 1995 *Prog. Photovoltaics Res. Appl.* **3** 149
- [34] Cao Y, Zhou J, Wang Y J, Ni J, Zhang J J 2015 *J. Alloy. Compd.* **632** 456
- [35] Wang X M, Tang R F, Jiang C H, Lian W T, Ju H X, Jiang G S, Li Z Q, Zhu C F, Chen T 2020 *Adv. Energy Mater.* **10** 2002341
- [36] Cao Y, Zhu X Y, Jiang J H, Liu C Y, Zhou J, Ni J, Zhang J J, Pang J B 2020 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **206** 110279
- [37] Chen C, Tang J 2020 *ACS Energy Lett.* **5** 2294
- [38] Zhou J, Chen H B, Zhang X T, Chi K L, Cai Y M, Cao Y, Pang J B 2021 *J. Alloys Compd.* **862** 158703
- [39] Cao Y, Liu C Y, Jiang J H, Zhu X Y, Zhou J, Ni J, Zhang J J, Pang J B, Rummeli M H, Zhou W J, Liu H, Cuniberti G 2021 *Solar RRL* **5** 2000800

# Bandgap grading of $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$ for high-efficiency thin-film solar cells\*

Cao Yu<sup>1)2)</sup> Jiang Jia-Hao<sup>1)2)</sup> Liu Chao-Ying<sup>1)2)</sup> Ling Tong<sup>1)2)</sup> Meng Dan<sup>3)</sup>  
 Zhou Jing<sup>3)†</sup> Liu Huan<sup>4)</sup> Wang Jun-Yao<sup>4)‡</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 Electrical Engineering, Northeast Electric Power University, Jilin 132012, China*)

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

4) (*School of Mechanical Engineering, Northeast Electric Power University, Jilin 132012, China*)

( Received 29 November 2020; revised manuscript received 18 January 2021 )

## Abstract

$\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  thin film solar cells have been developed rapidly in recent years due to their abundant raw materials, simple preparation method, stable performance, etc. In this study, based on the characteristic of tunable band gap of  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  light absorption layer, wx-AMPS software is used to simulate and design the  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  solar cell with narrowing band gap structure, and compared with the  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  solar cell with constant band gap (50% selenium content). The results show that the additional electric field formed by the narrowing band gap can promote the holes' transport and inhibit the carrier's recombination. Compared with the constant band gap structure, the narrowing band gap structure can increase the short-circuit current density of  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  solar cells from 19.34 to 22.94 mA·cm<sup>-2</sup>, the filling factor from 64.34% to 77.04%, and the photoelectric conversion efficiency from 12.03% to 14.42%. Then, the effect of electron mobility on the performance of  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  solar cells with narrowing band gap is studied. It is found that when the hole mobility is 0.1 cm<sup>2</sup>·V<sup>-1</sup>·s<sup>-1</sup>, the advantage of narrowing band gap can gradually appear after the electron mobility is higher than 0.25 cm<sup>2</sup>·V<sup>-1</sup>·s<sup>-1</sup>. The performance of  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  solar cell is enhanced with the electron mobility further increasing. However, when the electron mobility is higher than 5 cm<sup>2</sup>·V<sup>-1</sup>·s<sup>-1</sup>, the device performance is saturated. Moreover, we demonstrate that the degradation caused by thick or high defect state of  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  solar cell can be effectively alleviated by applying the narrowing band gap due to the suppression of the carrier recombination. When the thickness is 1.5 μm and the defect density is 10<sup>16</sup> cm<sup>-3</sup>, the photoelectric conversion efficiency of  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  solar cell with narrowing band gap is 6.34% higher than that of the constant bandgap. Our results demonstrate that the band gap engineering of the light absorption layer is one of the effective technical routes to optimizing the performance of  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$  solar cells. Since the photo-absorption material such as amorphous/microcrystalline silicon germanium, Copper indium gallium selenide and perovskite have the characteristic of tunable band gap. The design of the gradient band gap structure can also be applied to the optimization of the above alloy or compound solar cells.

**Keywords:**  $\text{Sb}_2(\text{S,Se})_3$ , narrowing band gap structure, solar cell, wx-AMPS

**PACS:** 88.40.hj, 85.30.De, 73.40.Lq

**DOI:** 10.7498/aps.70.20202016

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51772049), the 'Thirteenth Five-Year' Scientific and Technological Research Project of the Education Department of Jilin Province, China (Grant Nos. JJKH20200105KJ, JJKH20190705KJ), and the Project of Jilin Provincial Development and Reform Commission, China (Grant No. 2019C042).

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

‡ Corresponding author. E-mail: [junyao\\_0001@126.com](mailto:junyao_0001@126.com)