

Graphene/ $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ 诱导p-n结薄膜太阳能电池数值模拟

肖友鹏 王怀平 李刚龙

Numerical simulation of graphene/ $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ induced p-n junction solar cell

Xiao You-Peng Wang Huai-Ping Li Gang-Long

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 018801 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20201194

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201194>

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>

基于氧化镍背接触缓冲层碲化镉薄膜太阳能电池的研究

Nickel oxide as back surface field buffer layer in CdTe thin film solar cell

物理学报. 2017, 66(11): 117301 <https://doi.org/10.7498/aps.66.117301>

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>

Ag@SiO_2 耦合结构设计及其对薄膜太阳能电池的响应调控

Ag@SiO_2 coupled structure's design and regulation and control of response to thin film solar cells

物理学报. 2020, 69(18): 188801 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200334>

GaInP/GaAs/Ge三结太阳能电池不同能量质子辐照损伤模拟

Modeling and simulating of radiation effects on the performance degradation of GaInP/GaAs/Ge triple-junction solar cells induced by different energy protons

物理学报. 2020, 69(9): 098802 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191878>

石墨烯与复合纳米结构 SiO_2/Au 对染料敏化太阳能电池性能的协同优化

Significant enhancement of the performance of dye-sensitized solar cells with photoelectrode co-doped graphene and hybrid SiO_2/Au nanostructure

物理学报. 2020, 69(16): 160201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191722>

Graphene/ $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ 诱导 p-n 结薄膜 太阳能电池数值模拟*

肖友鹏^{1)2)†} 王怀平¹⁾²⁾ 李刚龙²⁾

1) (东华理工大学, 核技术应用教育部工程研究中心, 南昌 330013)

2) (东华理工大学机械与电子工程学院, 南昌 330013)

(2020 年 7 月 26 日收到; 2020 年 8 月 28 日收到修改稿)

银锌锡硒 ($\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$) 是一种禁带宽度为 1.4 eV 的 n 型半导体材料. 本文提出一种由 n 型 $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ 与石墨烯 (Graphene) 组成的 Graphene/ $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ 诱导 p-n 结薄膜太阳能电池, 并借助 wxAMPS 软件对电池的物理机理和性能影响因素进行模拟研究. 模拟结果表明, 高功函数的石墨烯与 n 型 $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ 半导体接触时, $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ 吸收层的前端能带向上弯曲, 在 n 型 $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ 吸收层表面诱导形成 p 型 $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ 反型层, p 型 $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ 和 n 型 $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ 组成 p-n 同质结. 模拟发现石墨烯和背接触的功函数会影响载流子的分离、输运和收集, 严重影响器件性能, 石墨烯功函数达到 5.5 eV, 背接触功函数不高于 4.4 eV, 都有利于提高器件性能. $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ 吸收层的掺杂浓度主要影响器件的短路电流, 而 $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ 吸收层的体内缺陷对器件整体性能产生影响. 在石墨烯和背接触功函数分别为 5.5 和 3.8 eV, $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ 吸收层的掺杂浓度和缺陷密度分别为 10^{16} 和 10^{14} cm^{-3} 时, Graphene/ $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ 诱导 p-n 结薄膜太阳能电池能够取得高达 23.42% 的效率. 这些模拟结果为设计新型高效低成本太阳能电池提供了思路和物理阐释.

关键词: 石墨烯, 银锌锡硒, 诱导 p-n 结, 薄膜太阳能电池**PACS:** 88.40.H-, 88.40.hj, 88.40.jn, 88.40.fc**DOI:** 10.7498/aps.70.20201194

1 引言

铜锌锡硫 ($\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$, CZTS) 和铜锌锡硒 ($\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$, CZTSe) 黄铜矿半导体材料由于储量丰富、无毒和吸收系数高等优点, 一直被认为是薄膜太阳能电池吸收层材料的最佳选择^[1-3]. 不过许多文献报道 Cu_{Zn} 反位缺陷形成能低, 在半导体带隙中形成带尾态, 限制了电池开路电压的进一步提高^[4-6]. 一个解决的办法是利用具有更大离子半径的其他元素取代 Cu 离子或 Zn 离子, 从而提高反位缺陷的形成能. 银锌锡硒 ($\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$, AZTSe)

是一种新型的光伏半导体材料, 理论计算和实验都表明 AZTSe 中的 Ag_{Zn} 反位缺陷具有高的形成能^[7,8]. AZTSe 是一种 n 型半导体材料, 禁带宽度为 1.4 eV, 非常适合作为太阳能电池的吸收层^[9,10]. 最近 Gershon 等^[11] 报道了一种基于 n 型 AZTSe 半导体材料的新型肖特基光伏器件, 器件采用 FTO/AZTSe/ MoO_3 /ITO 结构并取得了 5.2% 的转换效率, 这一效率高过其他以 n 型薄膜作为吸收层的太阳能电池, 但是远低于传统太阳能电池所取得的效率, 需要继续提升 AZTSe 半导体薄膜的品质并设计出新的电池结构来提高电池的效率. 石墨烯是一种具有优异电学和光学性能的材料, 与 AZTSe 结合形成 Graphene/

* 东华理工大学博士科研启动基金 (批准号: DHBK2019170) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: xiaoyunc@ecut.edu.cn

AZTSe 诱导 p-n 结薄膜太阳电池, 电池结构简单, 预期电池制造成本低. 目前还没有关于 Graphene/AZTSe 结构太阳电池实验和理论方面的文献报道, 对器件工作物理机理和性能表现犹未可知. 利用数值模拟方法对光伏器件进行研究多有报道 [12–15], 不仅深入认识了器件内在的物理机理, 还预测了器件的性能表现. 因此本文利用数值模拟方法对 Graphene/AZTSe 结构太阳电池展开模拟分析, 主要目的是提出一种新型的太阳电池并分析诱导 p-n 结薄膜太阳电池工作的物理机理及其性能影响因素.

2 器件结构与模拟参数

利用一维微电子与光电子器件模拟软件 wxAMPS 对 Graphene/AZTSe 薄膜太阳电池进行模拟分析. 模拟采用的电池结构如图 1 所示, 其中 AZTSe 为吸收层. 表 1 为模拟使用的主要材料参数 [11,16–19]. 模拟时电池的工作温度为 300 K, 入射光是标准的 AM 1.5G 光谱. 模拟时如无特别说明 AZTSe 吸收层中的缺陷密度设定为 10^{14} cm^{-3} .

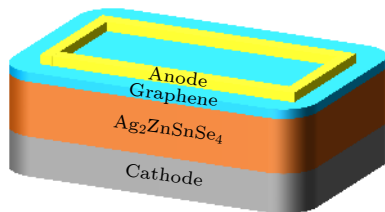


图 1 模拟器件结构

Fig. 1. Structure of the graphene/AZTSe induced p-n junction solar cell used in the numerical simulation.

表 1 模拟使用的主要材料参数

Table 1. Main material parameters used in the numerical simulation.

参数	AZTSe
厚度/ μm	2
相对介电常数 ϵ_r	12.6
电子亲和能 χ_e/eV	4.2
禁带宽度 E_g/eV	1.4
施主掺杂浓度 N_D/cm^{-3}	10^{11} – 10^{16}
导带有效态密度 N_c/cm^{-3}	2.2×10^{18}
价带有效态密度 N_v/cm^{-3}	1.8×10^{19}
电子迁移率 $\mu_n/\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$	100
空穴迁移率 $\mu_p/\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$	2
缺陷密度 N_t/cm^{-3}	10^{13} – 10^{18}

3 结果与讨论

3.1 石墨烯功函数的影响

在 Graphene/AZTSe 诱导 p-n 结薄膜太阳电池中, 石墨烯不仅充当透明导电电极和太阳光进入电池的窗口层, 发挥载流子收集功能, 更重要的是诱导半导体吸收层表面发生反型, 直接参与光生载流子的分离, 因此石墨烯对诱导 p-n 结薄膜太阳电池性能有很大的影响. 早期研究报道石墨烯的功函数在 3.40–5.14 eV 之间 [20–22], 最近 Seo 等 [23] 利用化学气相沉积的方法制备了功函数高达 5.5 eV 的石墨烯. 我们首先保持电池背接触为平带结构, 通过调整石墨烯的功函数来研究 Graphene/AZTSe 太阳电池的光伏性能. 图 2(a) 给出的是电池的电流密度-电压特性曲线, 可以看出, 随着功函数的增加, 电池的开路电压、短路电流和填充因子都得到明显改善, 功函数为 5.5 eV 时, 电池的开路电压、短路电流、填充因子和转换效率分别为 856.4 mV, 31.28 mA/cm^2 , 84.04% 和 22.51%.

为了更深入理解石墨烯功函数对电池性能改善的物理机理, 图 2(b) 给出了不同石墨烯功函数情况下的电池能带结构. 高功函数的石墨烯与 (n)AZTSe 吸收层接触时, 两种材料之间的费米能级差驱动着电子从 (n)AZTSe 吸收层流向石墨烯, (n)AZTSe 吸收层前端的能带向上弯曲, 导带远离费米能级而价带靠近费米能级, 在 (n)AZTSe 吸收层前端诱导形成一个 p 型 AZTSe 反型层, p 型 AZTSe 和 n 型 AZTSe 组成诱导 p-n 同质结. 在以 n 型 MoO_x 作为空穴选择性接触的结构为 TCO/(n) MoO_x /(i)a-Si:H/(n)c-Si/(i)a-Si:H/(n)a-Si:H 的硅异质结太阳电池中, 高功函数的 n 型 MoO_x 与 n 型 c-Si 接触时同样引起 c-Si 表面的能带弯曲, 形成 p 型反型层和诱导 p-n 同质结 [12,24,25], 而且取得了 23.5% 的效率 [26]. 由图 2(b) 还可以看到, 随着石墨烯功函数的增加, (n)AZTSe 吸收层前端能带弯曲程度增大, 越有利于光生载流子的分离, 从而提高电池的开路电压. 图 2(b) 中也可以看出石墨烯功函数的增加对电池背接触的能带结构几乎没有影响.

图 2(c) 给出了不同石墨烯功函数情况下电池的电场分布情况. 图中显示的 (n)AZTSe 吸收层前端负方向的电场也印证了前述的 p 型反型层. 石墨

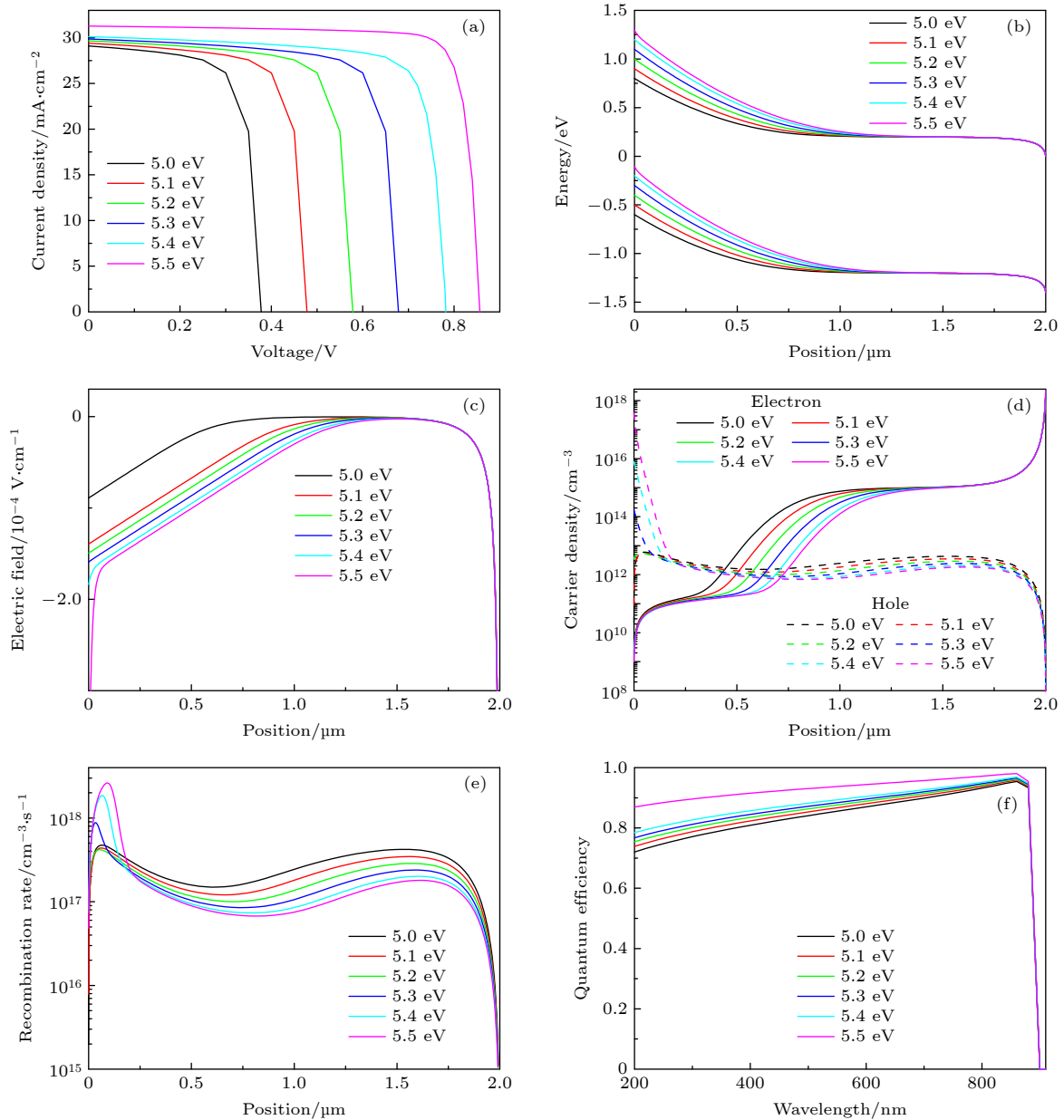


图2 不同石墨烯功函数情况下电池的 (a) 电流密度-电压特性曲线, (b) 能带结构, (c) 电场分布, (d) 载流子浓度, (e) 载流子复合率分布, (f) 量子效率

Fig. 2. Graphene/AZTSe induced p-n junction thin film solar cell with different values of graphene work function (a) current density-voltage curves, (b) energy band structure, (c) electric field, (d) carrier concentration, (e) carrier recombination rate profile, (f) quantum efficiency.

烯的功函数越大, 负方向的电场越大, 越有利于 (n)AZTSe 吸收层中光生载流子的分离和光生空穴向石墨烯输运从而被石墨烯收集。

图 2(d) 给出了不同石墨烯功函数情况下电池内的载流子分布情况。由图可见 (n)AZTSe 吸收层前端的空穴浓度大于电子浓度, 再次印证了前述的 p 型反型层。随着功函数的增加, (n)AZTSe 吸收层前端的空穴浓度增加, 说明 (n)AZTSe 吸收层前端的反型程度也在增强。能带弯曲程度的增加和反

型程度的增强有利于光生空穴流过 Graphene/(n)AZTSe 界面, 同时也会阻挡光生电子流向界面。也就是说石墨烯功函数的增加有利于空穴选择性流过, 从而提高了 Graphene/(n)AZTSe 接触的载流子选择性, 改善了光生载流子的输运性能, 有利于提高电池的填充因子。

图 2(e) 给出了不同石墨烯功函数情况下电池内的载流子复合情况。由图可见石墨烯功函数越大, (n)AZTSe 吸收层前端的空穴浓度越高, 使得

前端载流子的复合率越高. 不过整个 (n)AZTSe 吸收层中则是石墨烯功函数越大, 载流子复合率越小.

图 2(f) 给出了不同石墨烯功函数情况下电池的量子效率. 由图可见石墨烯功函数越大, 光生载流子的分离和收集越有效, 载流子复合率越小, 电池的量子效率越高, 从而改善了电池的整体性能.

3.2 背接触功函数的影响

背接触主要影响太阳电池背端的能带结构和光生载流子的收集, 对太阳电池的性能也有很大影响. 接下来的模拟是在保持石墨烯功函数为 5.5 eV 不变的情况下进行的, 背接触功函数的变化区间选择在 3.8—5.0 eV 之间. 图 3(a) 显示的是模拟所得太阳电池的电流密度-电压特性曲线, 可以看到, 背接触功函数为 3.8 eV 时电池的效率可以进一步提升到 22.59%. 当背接触功函数从 3.8 eV 增加到 4.4 eV, 电池性能变化很小, 当功函数继续增加, 电池性能明显下降, 并且主要是电池的开路电压明显变差. 图 3(b) 显示的是不同背接触功函数时电池的能带结构. 当背接触功函数小于 4.4 eV

时, 功函数影响的是 (n)AZTSe 吸收层背部近表面区域, 并且功函数小于 4.4 eV 时能带向下弯曲, 光生电子能够被背接触高效收集. 当功函数继续增加, 由于器件为薄膜太阳电池, 功函数的影响向 AZTSe 吸收层前端延伸, 能带弯曲程度下降, 电池开路电压下降. 同时背部的能带向上抬升, 光生电子收集受阻, 影响载流子的输运特性进而影响电池的填充因子. 受阻的电子不能流过 (n)AZTSe/背接触界面, 在界面处电子浓度急剧下降, 如图 3(c) 所示. 而背接触功函数越小, 电子浓度越高, 容易在背接触界面附近积累, 使得载流子复合率升高, 如图 3(d) 所示.

3.3 吸收层掺杂浓度的影响

继续模拟 AZTSe 吸收层掺杂浓度对电池性能的影响, 模拟时石墨烯和背接触的功函数分别为 5.5 和 3.8 eV, 掺杂浓度从 10^{10} cm^{-3} 增加到 10^{16} cm^{-3} . 不同吸收层掺杂浓度情况下电池的电流密度-电压特性曲线如图 4 所示. 可以看到掺杂浓度的增加对电池的短路电流提升明显. 当掺杂浓度增加时, 入

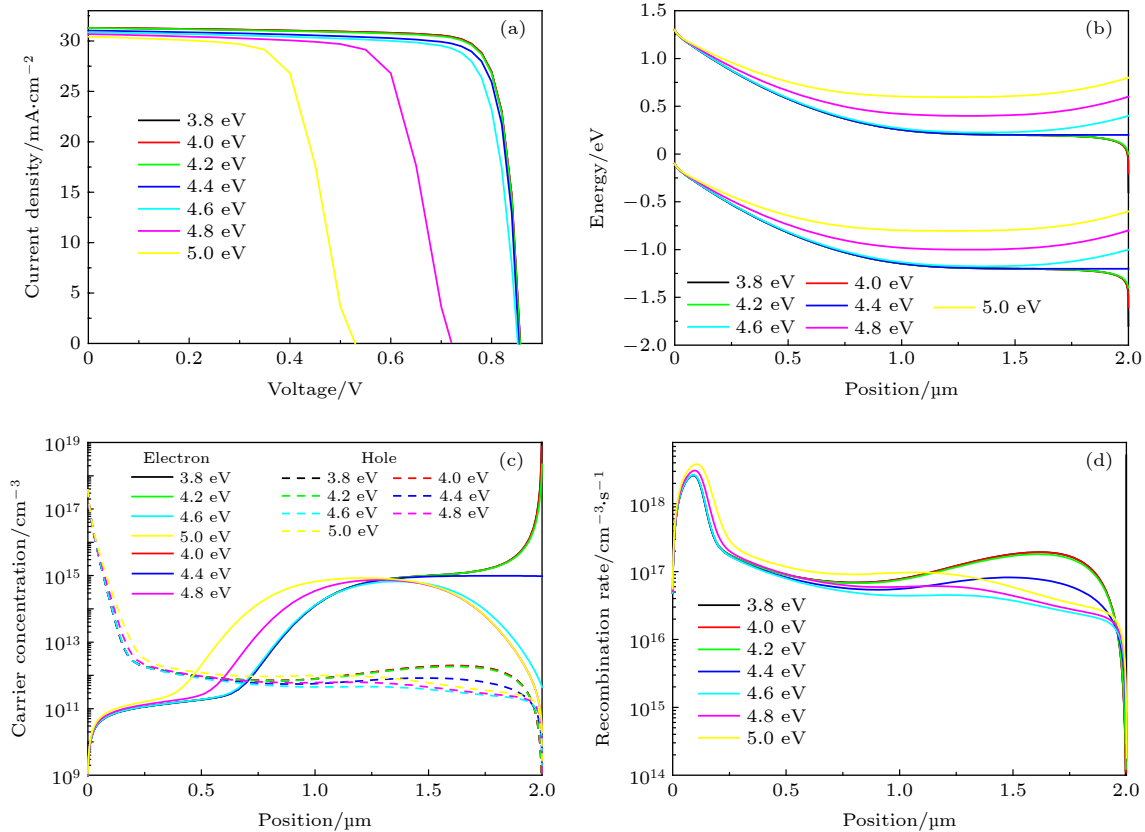


图 3 不同背接触功函数时电池的 (a) 电流密度-电压特性曲线, (b) 能带结构, (c) 电子浓度, (d) 载流子复合率分布

Fig. 3. Graphene/AZTSe induced p-n junction thin film solar cell with different values of back contact work function (a) current density-voltage curves, (b) energy band structure, (c) carrier concentration, (d) carrier recombination rate profile.

射同样通量的光子将产生更多的光生载流子, 此时电池的能带结构得到优化, 光生载流子能够有效收集, 电池的填充因子和短路电流都会得到提升. AZTSe 吸收层掺杂浓度为 10^{16} cm^{-3} 时电池的效率可以进一步提升到 23.42%.

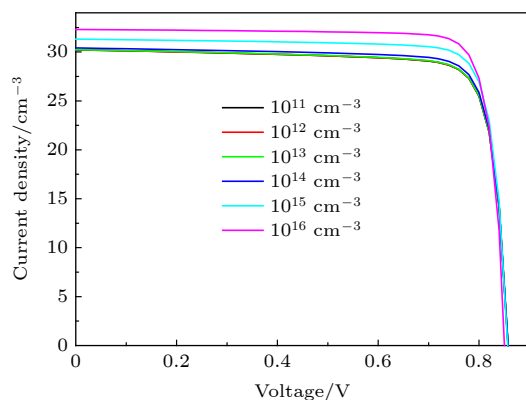


图 4 不同吸收层掺杂浓度时电池的电流密度-电压特性曲线

Fig. 4. Current density-Voltage curves of graphene/AZTSe induced p-n junction solar cell with different values of absorber layer doping concentration.

3.4 吸收层缺陷密度的影响

AZTSe 吸收层是诱导 p-n 结薄膜太阳能电池载流子光照产生和输运的场所, 吸收层中的缺陷特别是深能级缺陷对电池性能有很大影响. 模拟时隙间缺陷态为高斯分布, 缺陷能级位于禁带中央, 特征能为 0.1 eV, 缺陷密度从 10^{13} cm^{-3} 增加到 10^{18} cm^{-3} , 电子俘获截面和空穴俘获截面分别为 10^{-14} 和 10^{-15} cm^2 , 模拟结果如图 5 所示. 可以看出, 深能级缺陷密度不超过 10^{14} cm^{-3} 时, 缺陷对电池性能影

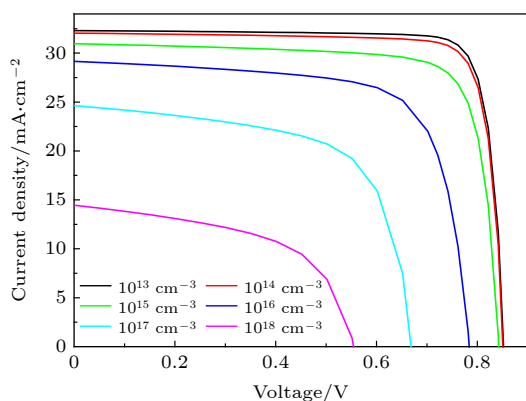


图 5 不同吸收层缺陷密度时的电流密度-电压特性曲线

Fig. 5. Current density-Voltage curves of graphene/AZTSe induced p-n junction solar cell with different values of absorber layer defect densities.

响很小. 当缺陷密度超过 10^{14} cm^{-3} 时, 缺陷对电池的整体性能都会产生影响. 随着缺陷密度的增加, 更多的光生载流子被复合, 直接对电池的短路电流产生影响. 复合形成更高的暗电流, 电池的开路电压会下降. 载流子的复合会影响载流子的输运和收集, 还会影响电池的填充因子. 因此电池制备过程中提升 AZTSe 吸收层薄膜质量非常重要, 需要将薄膜中缺陷密度控制在 10^{14} cm^{-3} 及以下.

4 结 论

本文利用高功函数的石墨烯与 AZTSe 吸收层组成一种 Graphene/AZTSe 诱导 p-n 结薄膜太阳能电池, 并借助 wxAMPS 软件对电池的物理机理和性能影响因素进行模拟与分析. 模拟结果表明, 高功函数的石墨烯与 n 型 AZTSe 半导体接触时, AZTSe 吸收层的前端能带向上弯曲, 在 n 型 AZTSe 表面诱导形成 p 型 AZTSe 反型层, p 型 AZTSe 和 n 型 AZTSe 组成诱导同质 p-n 结. 模拟发现石墨烯和背接触的功函数、AZTSe 吸收层的掺杂浓度和体内缺陷都会对电池性能产生影响. 石墨烯功函数越高, AZTSe 吸收层前端能带弯曲程度越大, 有利于提高电池的开路电压和光生空穴向石墨烯输运, 从而提高电池的填充因子. 背接触功函数同样能引起 AZTSe 吸收层背面能带的弯曲, 功函数太高时对能带弯曲的影响还会向 AZTSe 吸收层前端延伸, 严重影响电池性能. 在石墨烯和背接触功函数分别为 5.5 和 3.8 eV, AZTSe 吸收层的掺杂浓度和缺陷密度分别为 10^{16} 和 10^{14} cm^{-3} 时, 电池能够取得高达 23.42% 的效率. 这些模拟结果有助于理解诱导 p-n 结薄膜太阳能电池工作的物理机理, 并在未来电池制备过程中起到一定的理论辅助作用.

参考文献

- [1] Repins I, Beall C, Vora N, DeHart C, Kuciauskas D, Dippo P, To B, Mann J, Hsu W C, Goodrich A, Noufi R 2012 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **101** 154
- [2] Liu F, Sun K, Li W, Yan C, Cui H, Jiang L, Hao X, Green M A 2014 *Appl. Phys. Lett.* **104** 051105
- [3] Zeng X, Tai K F, Zhang T, Ho C W J, Chen X, Huan A, Sun T C, Wong L H 2014 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **124** 55
- [4] Chen S, Gong X G, Walsh A, Wei S H 2010 *Appl. Phys. Lett.* **96** 021902
- [5] Gokmen T, Gunawan O, Todorov T K, Mitzi D B 2013 *Appl. Phys. Lett.* **103** 103506

- [6] Chen S, Walsh A, Gong X G, Wei S H 2013 *Adv. Mater.* **25** 1522
- [7] Yeh L Y, Cheng K W 2014 *Thin Solid Films* **558** 289
- [8] Patil R M, Nagapure D R, Chandra G H, Subbaiah Y P V, Gupta M, Rao R P 2020 *Phys. Status Solidi* **217** 1900752
- [9] Yuan Z K, Chen S, Xiang H, Gong X G, Walsh A, Park J S, Repins I, Wei S H 2015 *Adv. Funct. Mater.* **25** 6733
- [10] Chagarov E, Sardashti K, Kummel A C, Lee Y S, Haight R, Gershon T S 2016 *J. Chem. Phys.* **144** 104704
- [11] Gershon T, Sardashti K, Gunawan O, Mankad R, Singh S, Lee Y S, Ott J A, Kummel A, Haight R 2016 *Adv. Energy Mater.* **6** 1601182
- [12] 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]
- [13] Cao Y, Zhu X Y, 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, 陈瀚博, 王长刚, 张鑫童, 侯秉东, 申明仁, 周静 2018 物理学报 **67** 247301]
- [14] Liang X J, Cao Y, Cai H K, Su J, Ni J, Li J, Zhang J J 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 057901 (in Chinese) [梁晓娟, 曹宇, 蔡宏琨, 苏健, 倪华, 李娟, 张建军 2020 物理学报 **69** 057901]
- [15] Zhang A, Zhang C X, Chen Y L, Zhang C M, Meng T 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 118801 (in Chinese) [张翱, 张春秀, 陈云林, 张春梅, 孟涛 2020 物理学报 **69** 118801]
- [16] Gershon T, Sardashti K, Lee Y S, Gunawan O, Singh S, Bishop D, Kummel A C, Haight R 2017 *Acta Mater.* **126** 383
- [17] Gershon T, Gunawan O, Gokmen T, Brew K W, Singh S, Hopstaken M, Poindexter J R, Barnard E S, Buonassisi T, Haight R 2017 *J. Appl. Phys.* **121** 174501
- [18] Jia J, Li Y, Yao B, Ding Z, Deng R, Jiang Y, Sui Y 2017 *J. Appl. Phys.* **121** 215305
- [19] Jiang Y, Yao B, Jia J, Ding Z, Deng R, Liu D, Sui Y, Wang H, Li Y 2019 *J. Appl. Phys.* **125** 025703
- [20] Hibino H, Kageshima H, Kotsugi M, Maeda F, Guo F Z, Watanabe Y 2009 *Phys. Rev. B* **79** 125437
- [21] Garg R, Dutta N K, Choudhury N R 2014 *Nanomaterials* **4** 267
- [22] Kim J H, Hwang J H, Suh J, Tongay S, Kwon S, Hwang C C, Wu J, Park J Y 2013 *Appl. Phys. Lett.* **103** 171604
- [23] Seo J, Bong J, Cha J, Lim T, Son J, Park S H, Hwang J, Hong S, Ju S 2014 *J. Appl. Phys.* **116** 084312
- [24] Bivour M, Temmler J, Steinkemper H, Hermle M 2015 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **142** 34
- [25] Gerling L G, Voz C, Alcubilla R, Puigdollers J 2017 *J. Mater. Res.* **32** 260
- [26] Dréon J, Jeangros Q, Cattin J, Haschke J, Antognini L, Ballif C, Boccard M 2020 *Nano Energy* **70** 104495

Numerical simulation of graphene/ $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ induced p-n junction solar cell*

Xiao You-Peng^{1)2)†} Wang Huai-Ping¹⁾²⁾ Li Gang-Long²⁾

1) (*Engineering Research Center of Nuclear Technology Application, Ministry of Education,*

East China University of Technology, Nanchang 330013, China)

2) (*School of Mechanical and Electronic Engineering, East China University of Technology, Nanchang 330013, China*)

(Received 26 July 2020; revised manuscript received 28 August 2020)

Abstract

$\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ is an n-type semiconductor with a suitable bandgap of 1.4 eV. In the present study, a graphene/ $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ induced p-n junction thin film solar cell is proposed and the physical mechanism and performance influencing factors of the solar cell are simulated and analyzed by using the wxAMPS software. The simulation results show that when a high work function graphene contacts an n-type $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ semiconductor, the energy band of the $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ absorber layer bends upward, meanwhile a p-type $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ inversion layer is induced on the surface of n-type $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$, therefore the p-type $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ and n-type $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ form an induced p-n homojunction. It is found that the work function of graphene and back contact significantly influence the photogenerated carrier separation, transportation and collection. The graphene work function should be 5.5 eV and the work function of back contact should not be greater than 4.4 eV, which is beneficial to the improving of the device performance. The doping concentration of $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ absorber mainly affects the short-circuit current of the device, however, the defect density of $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ absorber affects the whole device performance. When the work function of graphene and back contact are 5.5 eV and 3.8 eV, the doping concentration and defect density of $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ absorber are 10^{16} cm^{-3} and 10^{14} cm^{-33} , respectively, the conversion efficiency of the graphene/ $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$ induced p-n junction thin film solar cell can reach 23.42%. These simulation results provide the idea and physical explanation for designing a novel type of solar cell with high efficiency and low cost.

Keywords: graphene, $\text{Ag}_2\text{ZnSnSe}_4$, induced p-n junction, thin film solar cell

PACS: 88.40.H-, 88.40.hj, 88.40.jn, 88.40.fc

DOI: 10.7498/aps.70.20201194

* Scientific Research Starting Foundation for Doctors of East China University of Technology, China (Grant No. DHBK2019170).

† Corresponding author. E-mail: xiaoyunc@ecut.edu.cn