

双电子传输层结构硒化锑太阳电池的界面特性优化

曹宇 刘超颖 赵耀 那艳玲 江崇旭 王长刚 周静 于皓

Optimization of interfacial characteristics of antimony sulfide selenide solar cells with double electron transport layer structure

Cao Yu Liu Chao-Ying Zhao Yao Na Yan-Ling Jiang Chong-Xu Wang Chang-Gang Zhou Jing Yu Hao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 038802 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20211525

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211525>

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>

高效硒化锑薄膜太阳电池中的渐变能隙结构

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

物理学报. 2021, 70(12): 128802 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202016>

十二烷二酸修饰TiO₂电子传输层改善钙钛矿太阳电池的电流特性

Improvement of current characteristic of perovskite solar cells using dodecanedioic acid modified TiO₂ electron transporting layer

物理学报. 2018, 67(9): 098801 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172779>

Graphene/Ag₂ZnSnSe₄诱导p-n结薄膜太阳电池数值模拟

Numerical simulation of graphene/Ag₂ZnSnSe₄ induced p-n junction solar cell

物理学报. 2021, 70(1): 018801 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201194>

钙钛矿太阳电池中的缓冲层研究进展

Progress in perovskite solar cells based on different buffer layer materials

物理学报. 2020, 69(13): 138401 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200543>

硅异质结太阳电池中钝化层和发射层的优化设计

Design and optimization of passivation layers and emitter layers in silicon heterojunction solar cells

物理学报. 2021, 70(18): 188401 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210674>

双电子传输层结构硫硒化铟太阳电池的界面特性优化*

曹宇¹⁾²⁾ 刘超颖¹⁾²⁾ 赵耀³⁾ 那艳玲³⁾⁴⁾ 江崇旭³⁾⁴⁾
王长刚^{1)2)†} 周静⁵⁾ 于皓^{1)2)‡}

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) (中国铁路设计集团有限公司, 天津 300308)

4) (城市轨道交通数字化建设与测评技术国家工程实验室, 天津 300308)

5) (东北电力大学化学工程学院, 吉林 132012)

(2021 年 8 月 18 日收到; 2021 年 9 月 14 日收到修改稿)

硫硒化铟薄膜太阳电池因其制备方法简单、原材料丰富无毒、光电性质稳定等优点, 成为了光伏领域的研究热点. 经过近几年的发展, 硫硒化铟太阳电池的光电转换效率已经突破 10%, 极具发展潜力. 本文针对硫硒化铟太阳电池中 n/i 界面引起的载流子复合进行了深入研究. 发现硫硒化铟太阳电池的界面特性会受到界面电子迁移能力和能带结构两方面的影响. 界面电子迁移率的提高能使电子更有效地传输至电子传输层, 实现器件短路电流密度和填充因子的有效提升. 在此基础上, 引入 $\text{ZnO}/\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 双电子传输层结构能够进一步优化硫硒化铟太阳电池性能. 其中, $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 能级位置的改变可以同时调节界面和吸光层的能级分布, 在 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 导带能级为 -4.2 eV , 对应 Mg 含量为 20% 时, 抑制载流子复合的效果最为明显, 硫硒化铟太阳电池也获得了最佳的器件性能. 在去除缺陷态的理想情况下, 双电子传输层结构硫硒化铟太阳电池在 600 nm 厚时获得了 20.77% 的理论光电转换效率, 该研究结果为硫硒化铟太阳电池的进一步优化和发展提供了理论与技术支持.

关键词: 薄膜太阳电池, 硫硒化铟, 界面特性, 双电子传输层

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

DOI: 10.7498/aps.71.20211525

1 引言

随着我国“碳达峰”和“碳中和”目标的提出, 可再生能源的发展势在必行. 其中薄膜太阳电池因其原材料消耗少、柔性可卷曲等优势成为了光伏发电的重要形式和研究热点^[1–3]. 铜铟镓硒薄膜太阳电池^[4,5]和碲化镉薄膜太阳电池^[6]的转换效率 (PCE)

超过了 22%, 并已经实现产业化生产. 钙钛矿叠层薄膜太阳电池已经达到了 24.9% 的 PCE^[7]. 而近年来提出的新型硫硒化铟薄膜太阳电池因其原材料丰富且无毒、制备方法简单等优点也得到了快速发展^[8–23].

硫硒化铟光吸收层可以通过快速热蒸发法和溶液法等技术制备. 2016 年, 华中科技大学唐江课题组^[24]采用硒化铟粉末和硫粉末作为蒸发源, 通

* 城市轨道交通数字化建设与测评技术国家工程实验室开放课题基金 (批准号: 2021HJ05) 和国家自然科学基金 (批准号: 51772049) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: wangcg@neepu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: 20182828@neepu.edu.cn

过快速热蒸发的方法制备了不同组分的硫硒化锑薄膜,并且在硒含量为 80% 时获得了 5.79% 的 PCE. 2018 年,中国科技大学陈涛课题组^[25]采用 Sb-S-Se 前驱体溶液,使用旋涂的方法来制备硫硒化锑薄膜.通过控制前驱体溶液硫和硒元素配比在组分为 $\text{Sb}_{1.9}\text{S}_{2.2}\text{Se}_{0.9}$ 时得到了 5.8% 的硫硒化锑太阳能电池. 2019 年,唐江课题组^[26]采用气相传输沉积法制备了硫硒化锑薄膜,选取硫硒化锑粉末作为单一源并获得了 6.3% 的 PCE. 2020 年,陈涛课题组^[27]采用 $\text{KSbC}_4\text{H}_4\text{O}_7$, $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ 和 $\text{SeC}(\text{NH}_2)_2$ 作为前驱体,通过水热法制备了硒含量约 30% 的硫硒化锑薄膜,并首次获得了 10% 的 PCE.

硫硒化锑太阳能电池中,电子传输层的选择和其与吸光层之间的界面特性是决定器件性能的关键.目前,电子传输层一般采用硫化镉 (CdS) 薄膜,但由于 CdS 中的镉元素具有一定的毒性,且 CdS 的带隙较窄,不利于硫硒化锑太阳能电池短波响应的提升^[28,29].而选择宽带隙且无毒的氧化锌 (ZnO) 电子传输层则可以很好地解决这些问题^[30].此外,应用双电子传输层结构的还能够进一步优化器件的能级结构,提升太阳能电池性能^[31–33]. 2018 年, Wang 等^[31]采用水热后硒化的方法制备了具有 TiO_2/CdS 双电子传输层结构的硫硒化锑太阳能电池,通过形成双电子传输层结构优化了界面的能级排列,有利于电子的提取,同时致密的 TiO_2 层使得 p-n 结质量得到提高,与 CdS 单电子传输层结构相比, PCE 由 4.74% 增至 5.73%. 鉴于在 ZnO 中加入镁元素能够形成能带可调的 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 薄膜,因而将 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 与 ZnO 组成新型双电子传输层也具有在硫硒化锑太阳能电池中应用的潜力^[34]. 基于此,本文建立了基于 ZnO 电子传输层的硫硒化锑太阳能电池仿真模型,首先分析了界面电子迁移能力对电池性能影响,然后将 $\text{ZnO}/\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 双电子传输层应用到器件之中,通过 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 层能带结构的调制使电池的界面特性得到优化.最后获得结构优化后硫硒化锑薄膜太阳能电池的理论效率.

2 器件结构与模拟参数

本研究应用一维微电子与光电子器件模拟软件 wx-AMPS 进行建模仿真. wx-AMPS 可以对同质结、异质结、肖特基结等多种结构太阳能电池进行模拟计算^[35].其工作原理是根据相应的物理模型

和边界条件,基于半导体器件基本方程,即电子、空穴连续性方程和泊松方程,求解得到 $J-V$ 特性、量子效率、能带图、电场强度、载流子复合率等电池内部特性^[36].

本次研究所采用的硫硒化锑太阳能电池为 n-i-p 型平面异质结结构,其中太阳能电池的前、后电极分别选用掺氟二氧化锡 (FTO) 和金 (Au),吸光层材料采用硒含量为 30% 的硫硒化锑 ($\text{Sb}_2(\text{S}_{0.7}\text{Se}_{0.3})_3$),电子传输层和空穴传输层分别选用 ZnO 和 Spiro-OMeTAD. 其中,电子传输层、硫硒化锑光吸收层和空穴传输层的厚度分别为 50, 500 和 50 nm. 电池的器件结构为 $\text{FTO}/\text{ZnO}/\text{Sb}_2(\text{S}_{0.7}\text{Se}_{0.3})_3/\text{Spiro-OMeTAD}/\text{Au}$. 在 ZnO 和 $\text{Sb}_2(\text{S}_{0.7}\text{Se}_{0.3})_3$ 之间插入了厚度为 2 nm 的界面层来模拟界面特性,并且调节界面层的电子迁移率在 10^{-2} — $10^4 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ 之间变化. 为了在 ZnO 和 $\text{Sb}_2(\text{S}_{0.7}\text{Se}_{0.3})_3$ 界面获得更好的能级匹配,提高太阳能电池性能,尝试加入 20 nm 厚的 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 薄膜形成双电子传输层. $\text{Sb}_2(\text{S}_{0.7}\text{Se}_{0.3})_3$ 太阳能电池的器件结构见图 1.

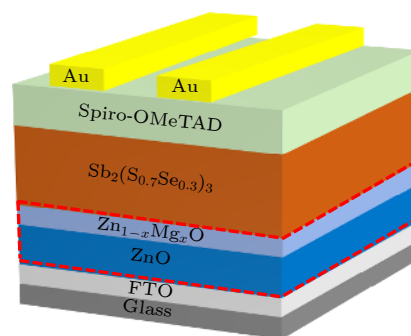


图 1 $\text{Sb}_2(\text{S}_{0.7}\text{Se}_{0.3})_3$ 太阳能电池的结构示意图

Fig. 1. Schematic diagram of the $\text{Sb}_2(\text{S}_{0.7}\text{Se}_{0.3})_3$ solar cell structure.

在温度为 300 K, 入射光源为 $100 \text{ W}/\text{cm}^2$ 标准 AM 1.5G 光源的条件下进行太阳能电池性能测试. 太阳光从 FTO 侧入射, 前、后表面的反射率分别为 0% 和 100%. 模拟中采用的前电极 FTO 功函数为 4.4 eV, 背电极 Au 功函数为 5.1 eV. 器件各层材料的详细参数如补充材料表 S1 (online) 所列.

3 结果与讨论

图 2 为不同界面电子迁移率硫硒化锑太阳能电池的性能变化趋势. 随着界面电子迁移率由 $10^{-2} \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ 逐渐增加到 $10^4 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$, 开路电压 (V_{oc}) 由 1.05 V 略微增至 1.07 V. 而 V_{oc} 在界面

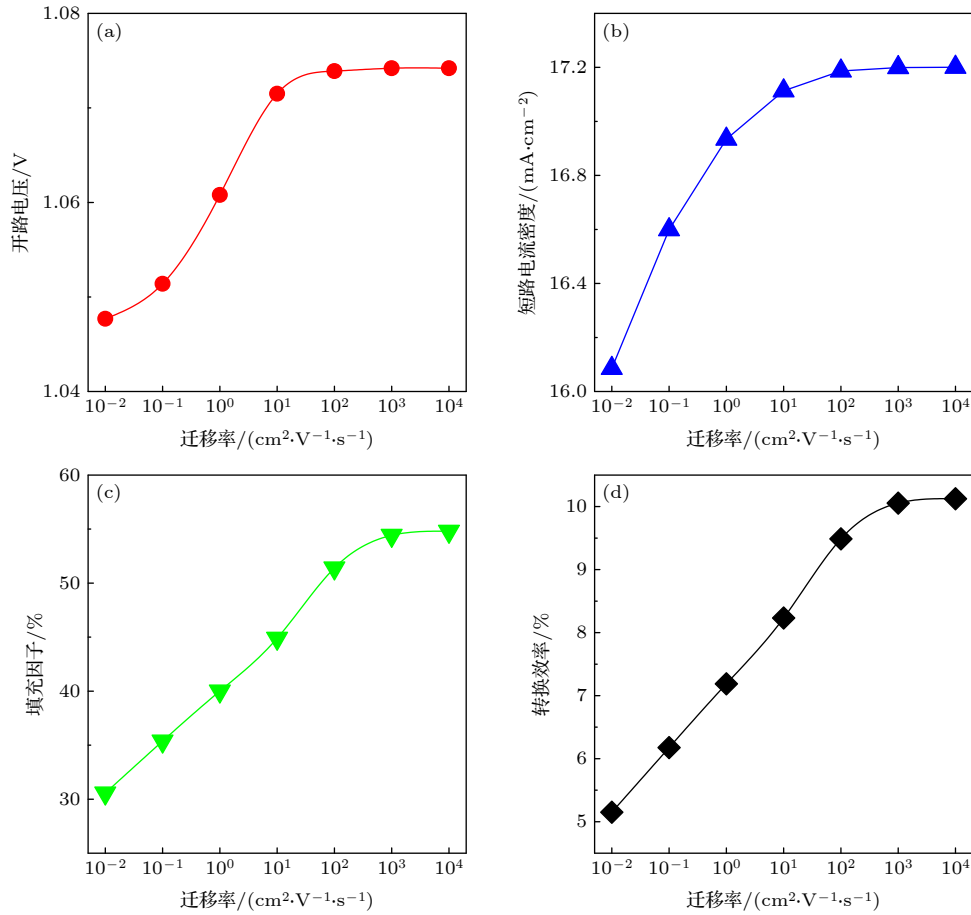


图 2 不同 n/i 界面电子迁移率硫硒化锑太阳电池的器件性能 (a) 开路电压; (b) 短路电流密度; (c) 填充因子; (d) 转换效率
Fig. 2. Device performance of the $\text{Sb}_2(\text{S}_{0.7}\text{Se}_{0.3})_3$ solar cells with different electron mobilities at n/i interface: (a) V_{oc} ; (b) J_{sc} ; (c) FF; (d) PCE.

电子迁移率大于 $10^1 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ 之后就基本不再发生变化. 另一方面, 短路电流密度 (J_{sc}) 和填充因子 (FF) 则都随着界面电子迁移率的提高而显著增大, 其中 J_{sc} 由 $16.09 \text{ mA}/\text{cm}^2$ 增至 $17.20 \text{ mA}/\text{cm}^2$, 而 FF 则由 30.56% 增至 54.79% . 不同的是, J_{sc} 的增速在界面电子迁移率大于 $10^1 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ 后开始放缓, 而 FF 则在界面电子迁移率大于 $10^3 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ 后才基本不变. 基于 J_{sc} 和 FF 的有效提高, 使得硫硒化锑太阳电池的 PCE 随着界面电子迁移率的提高由 5.15% 增至 10.12% . 说明界面电子迁移率的提高能够有效优化硫硒化锑太阳电池的器件性能.

为深入分析界面电子迁移能力对硫硒化锑太阳电池界面特性的影响, 仿真得到 ZnO 电子传输层与硫硒化锑吸光层所形成的 n/i 界面附近的电子浓度分布和载流子复合率分布. 通过图 3(a) 电子浓度分布可知, 当界面电子迁移率为较低的 $10^{-2} \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ 时, 电子较难穿过 n/i 界面, 导致其在硫硒化锑吸光层前端堆积. 堆积的电子由于无法

被电子传输层收集, 只能在缺陷处被复合掉, 导致此处具有很高的载流子复合率, 如图 3(b) 所示, 此时硫硒化锑太阳电池仅有 5.15% 的 PCE. 而随着界面电子迁移率的提高, 硫硒化锑吸光层前端的电子浓度逐渐降低, 载流子复合率也随之降低, 这能有效提高硫硒化锑太阳电池的 J_{sc} 和 FF, 因此使器件性能随着界面电子迁移能力的提高而提高. 当界面电子迁移率达到 $10^3 \text{ cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ 时, 硫硒化锑吸光层靠近界面处的电子已经基本都被电子传输层所收集, 载流子复合率不会随着界面电子迁移率的提高而进一步降低. 在此基础上继续增加界面电子迁移率, 电池 PCE 也基本保持不变. 以上结果说明, 通过界面特性优化使电子更加高效的跨越 n/i 界面, 是提高硫硒化锑太阳电池性能的重要手段.

将新型双电子传输层结构应用在硫硒化锑太阳电池中. 即在 ZnO 层与硫硒化锑层之间加入 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 层. 利用 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 能带结构可调的特点进一步优化器件能带结构. 不同 x 值 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$

对应的能级参数如补充材料表 S2 (online) 所列. 图 4 为具有不同导带位置 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 电子传输层的硫硒化锑太阳能电池的性能. 具体参数如表 1 所列. 从图 4 可以发现, $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 电子传输层的导带能级过低或者过高都不利于优化硫硒化锑太阳能电池的性能. 当 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 电子传输层的导带能级为较高的 -4.0 eV 时, 电子由硫硒化锑的导带向 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 导带传递的过程中的驱动能力较弱, 使其在吸光层前端 $0-100$ nm 处产生堆积, 导致此

表 1 不同 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 层导带能级硫硒化锑太阳能电池的器件性能参数

Table 1. Device performance of $\text{Sb}_2(\text{S}_{1-x}\text{Se}_x)_3$ solar cells with different conduction band energy levels of $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ layer.

导带能级/eV	V_{oc}/V	$J_{sc}/(\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2})$	FF/%	PCE/%
-4.0	1.08	17.27	60.44	11.23
-4.2	1.08	17.73	61.28	11.70
-4.4	1.08	17.42	58.10	10.90
-4.6	1.07	16.94	54.39	9.83

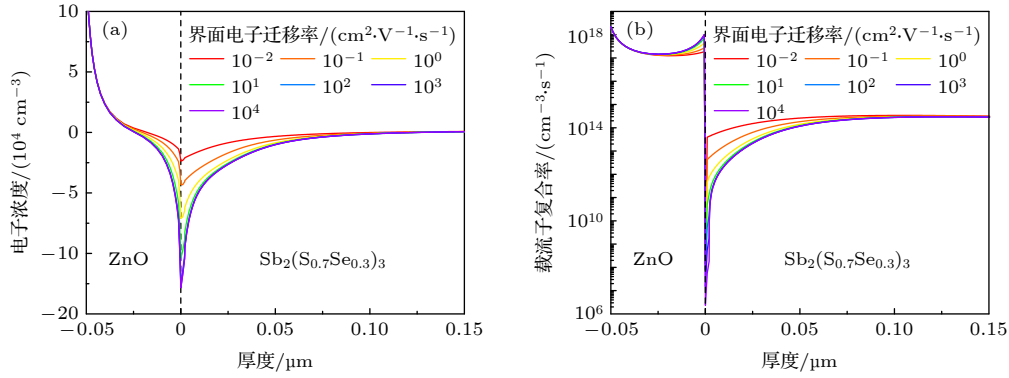


图 3 不同 n/i 界面电子迁移率硫硒化锑太阳能电池的器件特性 (a) 电子浓度分布; (b) 载流子复合率分布

Fig. 3. Device performance of the $\text{Sb}_2(\text{S}_{0.7}\text{Se}_{0.3})_3$ solar cells with different electron mobilities at n/i interface: (a) Electron density distribution; (b) carrier recombination rate distribution.

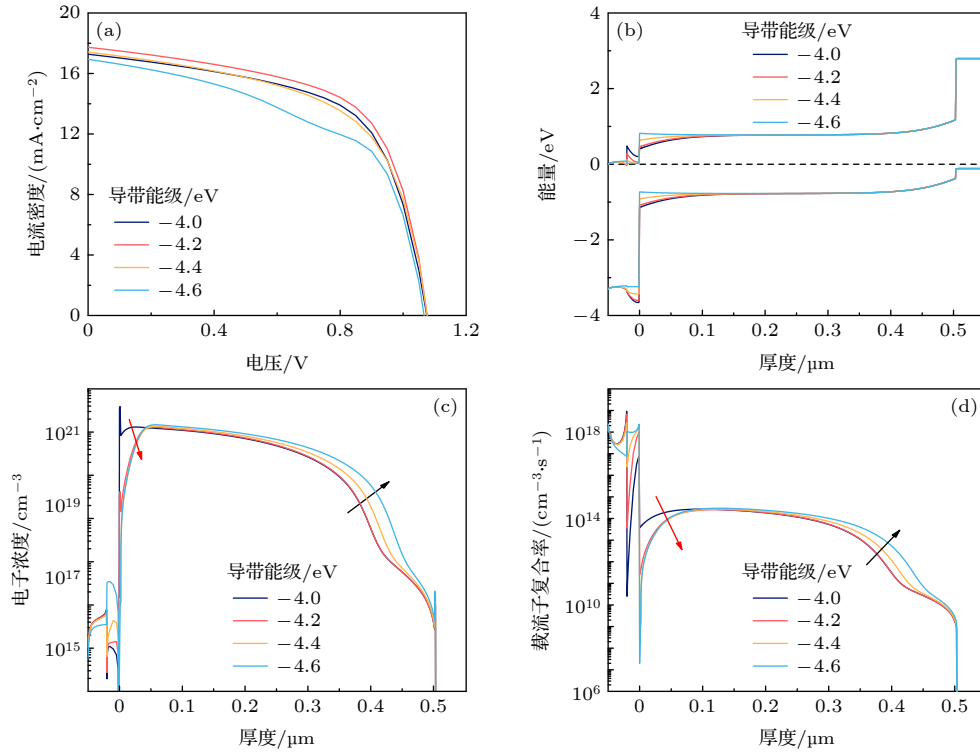


图 4 不同 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 层导带能级硫硒化锑太阳能电池的器件性能 (a) $J-V$ 曲线; (b) 能带图; (c) 电子浓度分布; (d) 载流子复合率分布

Fig. 4. Device performance of the $\text{Sb}_2(\text{S}_{0.7}\text{Se}_{0.3})_3$ solar cells with different conduction band energy levels of $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ layer: (a) $J-V$ curves; (b) energy band diagram; (c) electron density distribution; (d) carrier recombination rate distribution.

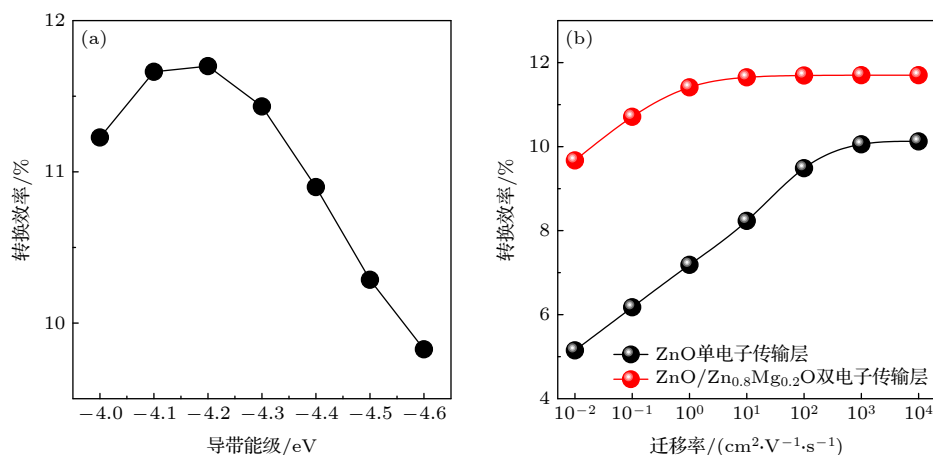


图 5 (a) 不同 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 层导带能级硫化锑太阳能电池的 PCE; (b) 单电子传输层与双电子传输层硫化锑太阳能电池的性能对比
Fig. 5. (a) PCE of the $\text{Sb}_2(\text{S}_{0.7}\text{Se}_{0.3})_3$ solar cells with different conduction band energy levels of $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ layer; (b) PCE comparison of $\text{Sb}_2(\text{S}_{0.7}\text{Se}_{0.3})_3$ solar cells with single and double electron transport layers.

处具有较高的载流子复合, 如图 4(c) 和图 4(d) 所示, 电池 PCE 因此降低. 另一方面, 当 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 电子传输层的导带能级为较低 -4.6 eV 时, 此时电子在向电子传输层输运时具有较大的驱动力, 吸光层前端的电子浓度较低, 可以有效抑制此处的载流子复合. 然而从图 4(b) 硫化锑太阳能电池的能带图可以发现, 较高电子亲和势导致了硫化锑吸光层内建电场的减弱, 使吸光层产生的光生载流子不能有效输运至前端, 造成了载流子在硫化锑吸光层 200—500 nm 处的复合率随导带能级的下降而升高, 这会导致电池 J_{sc} 和 FF 的下降, 造成器件性能的降低.

基于以上分析, 对 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 电子传输层的导带能级进行了精细调节, 器件性能结果如图 5(a) 所示, 在 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 电子传输层的导带能级为 -4.2 eV 时, 硫化锑得到了 11.70% 的最高 PCE. 而这正好对应着镁含量为 20% 的 $\text{Zn}_{0.8}\text{Mg}_{0.2}\text{O}$ 材料, 因此将 $\text{Zn}_{0.8}\text{Mg}_{0.2}\text{O}$ 电子传输层应用于硫化锑太阳能电池的电子传输层中是较为合适的. 图 5(b) 为不同界面电子迁移率 ZnO 与 $\text{ZnO}/\text{Zn}_{0.8}\text{Mg}_{0.2}\text{O}$ 电子传输层硫化锑太阳能电池的 PCE 对比图. 当界面电子迁移率为 $10^{-2} \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ 时, 应用双电子传输层可以使电池 PCE 由 5.15% 提升至 9.67%, 提升了 87.77%. 当界面电子迁移率为 $10^2 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ 时, 应用双电子传输层还可以将电池 PCE 由 9.49% 提升至 11.69%. 由此可见, 这两种优化方式都可以有效提升硫化锑太阳能电池的器件性能, 特别是界面迁移能力较弱时, 双电子传输层结构能有效优化

硫化锑太阳能电池的能级结构 (图 6), 有利于载流子的输运和收集, 使器件性能得到有效提高.

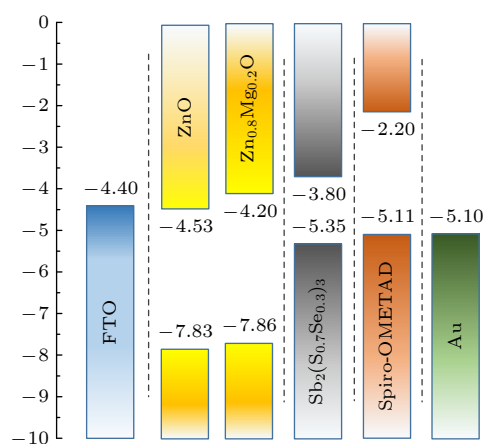


图 6 $\text{ZnO}/\text{Zn}_{0.8}\text{Mg}_{0.2}\text{O}$ 双电子传输层硫化锑太阳能电池能级示意图

Fig. 6. Energy levels diagram of the $\text{Sb}_2(\text{S}_{0.7}\text{Se}_{0.3})_3$ solar cell with $\text{ZnO}/\text{Zn}_{0.8}\text{Mg}_{0.2}\text{O}$ electron transport layer.

在去除电池缺陷态之后, 获得了采用 $\text{ZnO}/\text{Zn}_{0.8}\text{Mg}_{0.2}\text{O}$ 双电子传输层结构硫化锑太阳能电池的理论效率. 电池的 $J-V$ 曲线如图 7(a) 所示, 在电池厚度为 600 nm 的情况下, 电池的理论 PCE 可达 20.77%, 其中 V_{oc} 为 1.17 V, J_{sc} 为 $21.70 \text{ mA}/\text{cm}^2$, FF 为 81.49%. 图 7(b) 为硫化锑太阳能电池的外量子效率曲线, 可以看到电池在 400—620 nm 之间的光电 PCE 可达 95% 以上. 说明在这种器件结构下, 硫化锑太阳能电池可以高效地将光能转换成电能, 是一种非常具有发展前景的新概念薄膜太阳能电池.

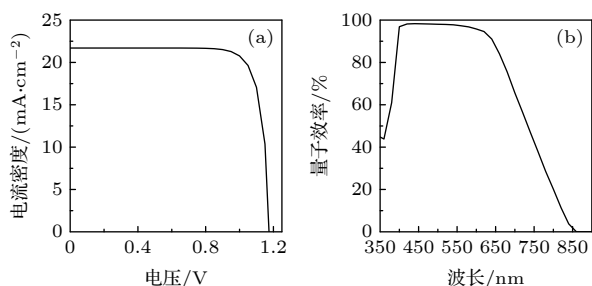


图7 ZnO/Zn_{0.8}Mg_{0.2}O 双电子传输层硫硒化锑太阳电池的器件性能 (a) J - V 曲线; (b) 量子效率图

Fig. 7. Device performance of the $\text{Sb}_2(\text{S}_{0.7}\text{Se}_{0.3})_3$ solar cells with $\text{ZnO}/\text{Zn}_{0.8}\text{Mg}_{0.2}\text{O}$ double electron transport layers: (a) J - V curve; (b) quantum efficiency spectrum.

目前硫硒化锑太阳电池的最高实验室效率为 10.5%^[16], 与本文仿真的理论效率相比还有较大的提升空间. 通过的器件参数的比较发现, 器件 V_{oc} 的模拟结果为 1.17 V, 而实验结果仅为 0.66 V, 说明 V_{oc} 是限制硫硒化锑太阳电池性能的主要因素. V_{oc} 的损失主要是来自于锑基吸光层中的高密度的悬挂键、深能级缺陷和带尾态, 因此提高硫硒化锑吸光层质量对器件性能的优化尤为重要^[37]. 另一方面, 硫硒化锑太阳电池所采用的 CdS 电子传输层的带隙较窄, 使得器件在波长低于 500 nm 范围内的光谱响应最高仅为 70%, 也会造成一定的短波光能量损失. 可以预见, 应用本文所构建的 ZnO/Zn_{0.8}Mg_{0.2}O 双电子传输层, 在发挥电子传输层宽带隙特点以提高短波光响应的同时, 利用 Zn_{1-x}Mg_xO 能隙可调的特点优化器件的界面特性, 有望使硫硒化锑薄膜太阳电池的器件性能得到进一步提高.

4 结 论

本文主要针对硫硒化锑太阳电池的 n/i 界面进行了优化研究, 首先分析了界面电子迁移能力对硫硒化锑太阳电池性能的影响. 结果表明界面电子迁移率的增强能够提高电子被电子传输层收集的效率, 使得硒化锑吸光层前端的复合率有效降低, 电池的 J_{sc} 和 FF 有效提高. 其次, 在硫硒化锑太阳电池中应用 ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO 双电子传输层结构, 其中 Zn_{1-x}Mg_xO 电子传输层的加入可以对界面和硫硒化锑吸光层的能带结构进行双重调节. 在 Zn_{1-x}Mg_xO 电子传输层的 Mg 含量为 20% 时, 硫硒化锑太阳电池整体的载流子复合率最低, 并

得到了最高的 J_{sc} 和 PCE. 最后, 在电池厚度仅为 600 nm 的情况下, 具有新型双电子传输层结构的硫硒化锑太阳电池获得了 20.77% 的理论效率, 表明了这种新型结构硫硒化锑太阳电池的发展潜力.

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] Righetto M, Lim S S, Giovanni D, Lim J W M, Zhang Q, Ramesh S, Tay Y K E, Sum T C 2020 *Nat. Commun.* **11** 1
- [2] Metzger W K, Grover S, Lu D, Colegrove E, Moseley J, Perkins C L, Li X, Mallick R, Zhang W, Malik R, Kephart J, Jiang C S, Kuciauskas D, Albin D S, Al-Jassim M M, Xiong G, Gloeckler M 2019 *Nat. Energy* **4** 837
- [3] Cao Y, Jiang J H, Liu C Y, Ling T, Meng D, Zhou J, Liu H, Wang J Y 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 128802 (in Chinese) [曹宇, 蒋家豪, 刘超颖, 凌同, 孟丹, 周静, 刘欢, 王俊尧 2021 物理学报 **70** 128802]
- [4] Birant G, Wild J De, Kohl T, Buldu D G, Brammertz G, Meuris M, Poortmans J, Vermang B 2020 *Sol. Energy* **207** 1002
- [5] Chen Y, Song K, Xu X L, Yao G, Wu Z Y 2020 *Sol. Energy* **195** 121
- [6] Li D B, Bista S S, Song Z N, Awni R A, Subedi K K, Shrestha N, Pradhan P, Chen L, Bastola E, Grice C R, Phillips A B, Heben M J, Ellingson R J, Yan Y F 2020 *Nano Energy* **73** 104835
- [7] Wang Y R, Gu S, Liu G L, Zhang L P, Liu Z, Lin R X, Xiao K, Luo X, Shi J H, Du J L, Meng F Y, Li L D, Liu Z X, Tan H R 2021 *Sci. China Chem.* **64** 1
- [8] 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
- [9] 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
- [10] 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]
- [11] Li K H, Li F, Chen C, Jiang P F, Lu S C, Wang S Y, Lu Y, Tu G L, Guo J J, Shui L Q, Liu Z, Song B X, Tang J 2021 *Nano Energy* **86** 106101
- [12] Lian W T, Jiang C H, Yin Y W, Tang R F, Li G, Zhang L J, Che B, Chen T 2021 *Nat. Commun.* **12** 1
- [13] Lee S J, Sung S J, Yang K J, Kang J K, Kim J Y, Do Y S, Kim D H 2020 *ACS Appl. Energy Mater.* **3** 12644
- [14] Luo J T, Xiong W, Liang G X, Liu Y K, Yang H Z, Zheng Z H, Zhang X H, Fan P, Chen S 2020 *J. Alloys Compd.* **826** 154235
- [15] Xiao Y P, Wang H P, Kuang H 2020 *Opt. Mater.* **108** 110414
- [16] 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
- [17] 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, Schropp R E I, Mai Y H 2019 *Nat. Commun.* **10** 1
- [18] Islam M T, Thakur A K 2020 *Sol. Energy* **202** 304
- [19] Ning H, Guo H F, Zhang J Y, Wang X, Jia X G, Qiu J H, Yuan N Y, Ding J N 2021 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **221** 110816

- [20] Cai Z H, Dai C M, Chen S Y 2020 *Sol. RRL* **4** 1900503
- [21] Ishaq M, Chen S, Farooq U, Azam M, Deng H, Su Z H, Zheng Z H, Fan P, Song H S, Liang G X 2020 *Sol. RRL* **4** 2000551
- [22] Lei H W, Chen J J, Tan Z J, Fang G J 2019 *Sol. RRL* **3** 1900026
- [23] 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 J W, Liu H, Cuniberti G 2021 *Sol. RRL* **5** 2000800
- [24] Yang B, Qin S K, Xue D J, Chen C, He Y S, Niu D M, Huang H, Tang J 2017 *Prog. Photovolt: Res. Appl.* **25** 113
- [25] Wu C Y, Zhang L J, Ding H H, Ju H X, Jin X, Wang X M, Zhu C F, Chen T 2018 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **183** 52
- [26] Lu S C, Zhao Y, Wen X X, Xue D J, Chen C, Li K H, Kondrotas R, Wang C, Tang J 2019 *Sol. RRL* **3** 1800280
- [27] 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 C, Chen S Y, Zhu C F, Hao X J, Green M A, Chen T 2020 *Nat. Energy* **5** 587
- [28] Li K H, Lu Y, Ke X X, Li S, Lu S C, Wang C, Wang S Y, Chen C, Tang J 2020 *Sol. RRL* **4** 2000220
- [29] 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]
- [30] Weng T F, Yan M, Yu X, Qiao Q, Zhou Y T, Li Z H, Wei J, Yu X M 2021 *Opt. Mater.* **121** 111516
- [31] Wang W H, Wang X M, Chen G L, Chen B W, Cai H L, Chen T, Chen S Y, Huang Z G, Zhu C F, Zhang Y 2018 *Sol. RRL* **2** 1800208
- [32] Ishaq M, Deng H, Yuan S J, Zhang H, Khan J, Farooq U, Song H S, Tang J 2018 *Sol. RRL* **2** 1800144
- [33] Gharibshahian I, Orouji A A, Sharbati S 2020 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **212** 110581
- [34] Li K H, Kondrotas R, Chen C, Lu S C, Wen X X, Li D B, Luo J J, Zhao Y, Tang J 2018 *Sol. Energy* **167** 10
- [35] Liu Y M, Sun Y, Rockett A 2012 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **98** 124
- [36] Cao Y, Zhu X Y, Chen H B, Zhang X T, Zhou J, Hu Z Y, Pang J B 2019 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **200** 109945
- [37] Chen C, Tang J 2020 *ACS Energy Lett.* **5** 2294

Optimization of interfacial characteristics of antimony sulfide selenide solar cells with double electron transport layer structure^{*}

Cao Yu¹⁾²⁾ Liu Chao-Ying¹⁾²⁾ Zhao Yao³⁾ Na Yan-Ling³⁾⁴⁾
 Jiang Chong-Xu³⁾⁴⁾ Wang Chang-Gang^{1)2)†} Zhou Jing⁵⁾ Yu Hao^{1)2)‡}

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) (*China Railway Design Corporation, Tianjin 300308, China*)

4) (*National Engineering Laboratory for Digital Construction and Evaluation Technology of Urban Rail Transit, Tianjin 300308, China*)

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

(Received 18 August 2021; revised manuscript received 14 September 2021)

Abstract

Antimony sulfide selenide thin film solar cells have drawn great interest in the field of photovoltaic due to their advantages of simple preparation method, abundant raw materials, non-toxic and stable photoelectric properties. After the development in recent years, the photoelectric conversion efficiency of antimony sulfide selenide solar cells has exceeded 10%, which has great development potential. In this work, the carrier recombination near n/i interface in antimony sulfide selenide solar cells is studied. It is found that the characteristics of the n/i interface are affected by the interfacial electron mobility and energy band structure. The improvement of the interface electron mobility can make the electrons more effectively transferred to the electron transport layer, and realize the effective improvement of the short circuit current density and fill factor of the device. Moreover, the introduction of $\text{ZnO}/\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ double electron transport layer structure can further optimize the performance of antimony sulfide selenide solar cells. The change of $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ energy level position can adjust the energy level distribution of the interface and light absorption layer simultaneously. When the conduction band energy level of $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ is -4.2 eV and the corresponding Mg content is 20%, the effect of restraining the carrier recombination is the most obvious, and the antimony sulfide selenide solar cell also obtains the best device performance. Finally, under the ideal condition of removing the defect state, the antimony sulfide selenide solar cells with 600 nm in thickness can achieve 20.77% theoretical photoelectric conversion efficiency. The research results provide theoretical and technical support for further optimizing and developing the antimony sulfide selenide solar cells.

Keywords: thin film solar cells, antimony sulfide selenide, interface characteristics, double electron transport layer

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

DOI: 10.7498/aps.71.20211525

^{*} Project supported by the Open Project Fund of National Engineering Laboratory for Digital Construction and Evaluation of Urban Rail Transit (Grant No. 2021HJ05) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51772049).

[†] Corresponding author. E-mail: wangcg@necpu.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: 20182828@necpu.edu.cn