

基于双层电子传输层钙钛矿太阳能电池的物理机制*

周 琦¹⁾²⁾ 任信钢^{1)2)3)†} 闫业强¹⁾²⁾ 任昊¹⁾²⁾
杜红梅⁴⁾ 蔡雪原^{5)‡} 黄志祥¹⁾²⁾

1) (安徽大学, 信息材料与智能感知安徽省实验室, 合肥 230601)

2) (目标探测与特征提取安徽省重点实验室, 六安 237000)

3) (安徽大学, 空间电磁环境安徽高校重点实验室, 合肥 230601)

4) (成都运达科技股份有限公司, 成都 611731)

5) (安庆师范大学电子工程与智能制造学院, 安庆 246133)

(2022 年 4 月 17 日收到; 2022 年 6 月 1 日收到修改稿)

近年来基于钙钛矿材料的太阳能电池以其优异的光电转换效率, 成为了最具有发展潜力的光伏器件. 受制于制备工艺及界面传输层的材料, 钙钛矿太阳能电池存在体内、界面缺陷和能级错位等问题, 导致非辐射复合损耗增加, 妨碍其效率进一步提升及工作稳定性. 因此, 降低能级错位及界面缺陷态等损耗对于实现高效钙钛矿太阳能电池至关重要. 本文研究了钙钛矿太阳能电池中双层电子传输层及其阶梯状导带结构对器件性能的影响, 揭示了活性层与传输层之间的导带偏移量对两者之间界面复合及性能提升的机理. 另外, 研究了体内与界面缺陷态密度对单层及双层电子传输层结构下电池性能的影响, 发现在高缺陷态密度下, 双层结构比单层结构具有更高的效率. 研究表明双层电子传输层结构不仅能改善界面能级错位损耗, 还可以降低电池性能受体内及界面缺陷影响, 对制备高性能太阳能电池具有指导意义.

关键词: 钙钛矿太阳能电池, 双层电子传输层, 界面复合, 缺陷态密度**PACS:** 88.40.hj, 88.40.H-, 88.40.fc, 88.30.gg**DOI:** 10.7498/aps.71.20220725

1 引 言

自 2009 年 Miyasaka 等^[1]首次提出有机-无机复合钙钛矿太阳能电池 (perovskite solar cells, PSCs) 以来, 因其成本低、制造简单、光学吸收优异、载流子迁移率高和扩散长度远等优点而备受关注^[2,3]. 过去十多年来, 单节 PSCs 的光电转换效率由最初的 3.8% 上升至 25.7%^[4,5], 以年均效率 2.1% 的增长

速度成为当前发展最快光伏器件^[6–10]. 由于制备工艺及传输层材料种类的限制, PSCs 存在的界面缺陷和能级错位导致非辐射复合量增加, 限制了电池的开路电压 (V_{oc}) 和填充因子 (FF) 的提升^[11–14]. 电子传输层 (electron transport layer, ETL) 与钙钛矿界面的缺陷态是导致非辐射复合损耗的重要因素之一, 因此研究 ETL 和活性层之间界面能级匹配及器件性能受缺陷态密度的影响, 是提高钙钛矿太阳能电池性能的关键^[15,16].

* 国家自然科学基金 (批准号: 62171001, 61701003, 61901001, 61701001, U20A20164, 61871001, 61971001)、安徽省国家自然科学基金 (批准号: 2108085MF198, 1808085QF179, 1908085QF259, 1908085QF251)、安徽高校协同创新项目 (批准号: GXXT-2020-050, GXXT-2020-051, GXXT-2021-027)、安徽大学物质科学与信息技术研究院学科建设开放基金和安徽省博士后人员科研活动经费资助项目 (批准号: 2019B348) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: xgren@ahu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: cai_welcome@163.com

ETL 与活性层之间的导带差被称为导带偏移 (conduction band offset, CBO), CBO 会影响载流子在界面上复合强弱^[17]. 通过在 ETL 与活性层之间引入另外一种 ETL 材料, 所形成的双层 ETL 结构能够减小 ETL 与活性层间的非辐射复合量, 有效改善电池性能^[18–23]. Wang 等^[22] 用 ZnO/SnO₂ 双层 ETL, 将电池效率提高到 19.1%. Wang 等^[23] 报道了 SnO₂/TiO₂ 双层 ETL 可以改善电荷转移过程, 抑制活性层与 ETL 界面上的电荷复合, 电池效率提高了 2%. 采用双层 ETL 可以实现传输层与活性层之间的导带能级匹配, 能级匹配主要是降低导带偏移量, 进而降低活性层与传输层间界面处的复合. 揭示导带偏移量如何影响界面复合, 明确单层及双层 ETL 结构下缺陷态密度对器件效率的影响机理, 然后减小活性层与传输层之间的复合, 这些机制尚未得到很明确的研究.

针对以上问题, 本文将研究单层 (TiO₂) ETL 和双层 (TiO₂/SnO₂) ETL 结构下的钙钛矿电池特性. 首先分析 CBO 对单层 ETL 性能及阴极功函数对电池性能的影响, 然后比较两种结构下体内活性层缺陷态密度和界面缺陷态密度对电池性能的影响. 基于双层 ETL 的高效率钙钛矿电池的机理分析, 对构筑高效稳定光伏器件具有重要意义.

2 器件结构与参数

本文研究的钙钛矿器件结构如图 1(a) 所示, 其能级匹配如图 1(b) 所示. 为研究单层 ETL 结构下 CBO 与阴极功函数对电池性能的影响, 以及单层

ETL 结构与双层 ETL 结构之间电池性能的差异, 采用已开发的漂移-扩散半导体方程求解模型, 利用有限差分法分别求解泊松方程、电子和空穴连续性方程^[24]:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = \frac{q}{\varepsilon} (n - p), \quad (1)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \frac{\partial J_n}{\partial x} + G - R, \quad \frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \frac{\partial J_p}{\partial x} + G - R, \quad (2)$$

$$J_n = qD_n \frac{\partial n}{\partial x} - q\mu_n n \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \quad J_p = -qD_p \frac{\partial p}{\partial x} - q\mu_p p \frac{\partial \varphi}{\partial x}. \quad (3)$$

其中 ε 是介电常数, q 是电子电荷, G 是生成率, D 是扩散系数, φ 是静电势, p 和 n 分别是自由空穴和电子密度, R 为复合率. 如图 1(a) 所示, 单层 ETL 钙钛矿电池结构为 ITO/TiO₂/CH₃NH₃PbI₃/Spiro-OMeTAD/Au, 在该结构中 ITO 为阴极, Au 是阳极, Spiro-OMeTAD 和 TiO₂ 分别作为空穴和 ETL, 活性层采用 CH₃NH₃PbI₃. 双层 ETL 结构为 ITO/SnO₂/TiO₂/CH₃NH₃PbI₃/Spiro-OMeTAD/Au, TiO₂/SnO₂ 为电池结构中的双层 ETL. 各种材料的半导体参数如表 1 所列^[23,25–27], 模型中活性层钙钛矿的吸收系数设为 10⁵ cm⁻¹, 标准入射辐射光谱为 AM 1.5 G, 默认工作温度为 300 K.

3 结果与讨论

3.1 CBO 与阴极功函数对电池性能影响

本节主要研究单层 ETL 结构下, ETL 亲和能变化对太阳能电池性能的影响. 通过在 TiO₂ 引入掺杂或材料的复合, 可以改变其能带结构, 此处假设

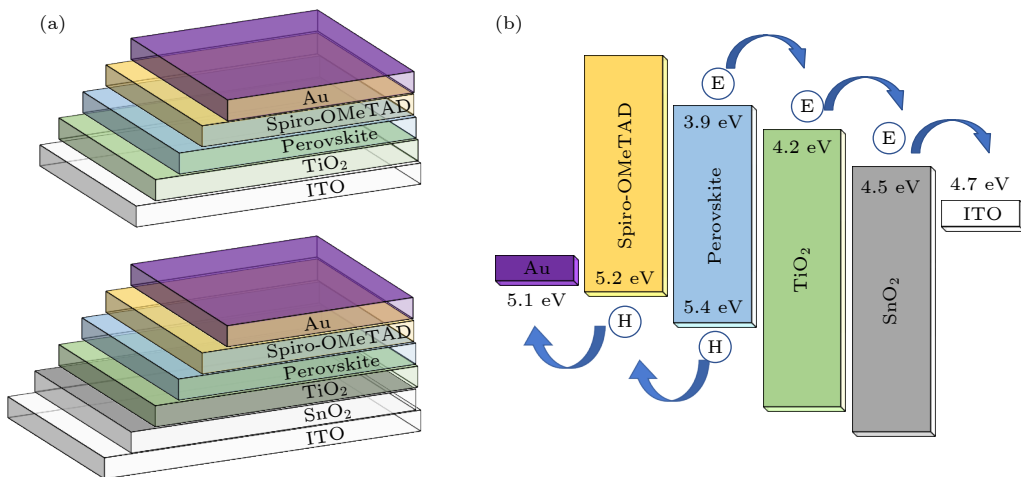
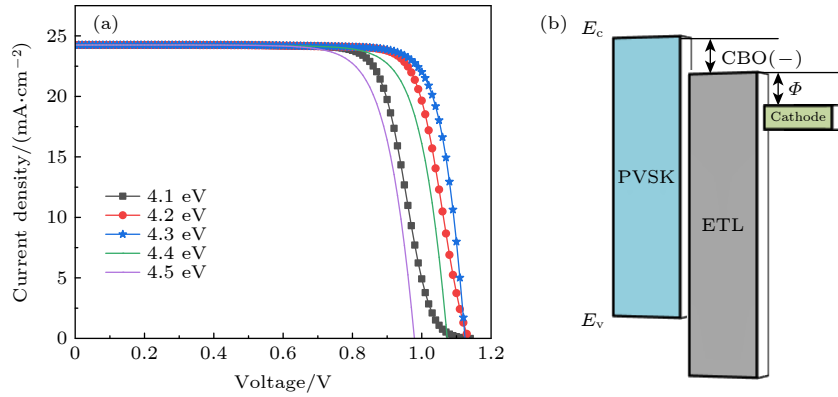


图 1 (a) 单双层 ETL 结构示意图; (b) 双层 ETL 结构能级示意图

Fig. 1. (a) Schematic diagram of single and double ETL structures; (b) diagram of energy level of double ETL structure.

表 1 仿真结构中材料参数
 Table 1. Simulation structure parameters.

Layer properties	Spiro-OMeTAD	CH ₃ NH ₃ PbI ₃	SnO ₂	TiO ₂
厚度 L/nm	350 ^[25]	400 ^[26]	50 ^[27]	50 ^[27]
电子亲和能 χ/eV	3.0 ^[25]	3.9 ^[26]	4.5 ^[23]	4.2 ^[23]
介电常数 ϵ_r	3.0 ^[25]	6.5 ^[26]	9.0 ^[27]	9.0 ^[27]
禁带宽度 E_g/eV	2.2 ^[25]	1.5 ^[26]	4.0 ^[23]	3.6 ^[23]
受主掺杂浓度 N_A/cm^{-3}	1.0×10^{18} ^[25]	5.21×10^9 ^[26]	0 ^[27]	0 ^[27]
施主掺杂浓度 N_D/cm^{-3}	0 ^[25]	5.21×10^9 ^[26]	1.0×10^{18} ^[27]	1.0×10^{18} ^[27]
电子迁移率 $\mu_n/(\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	2.0×10^{-4} ^[25]	20 ^[26]	20 ^[27]	20 ^[27]
空穴迁移率 $\mu_p/(\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	2.0×10^{-4} ^[25]	20 ^[26]	10 ^[27]	10 ^[27]
缺陷态密度 N_t/cm^{-3}	1.0×10^{13} ^[25]	2.5×10^{13} ^[26]	1.0×10^{15} ^[27]	1.0×10^{15} ^[27]
导带有效密度 N_c/cm^{-3}	2.2×10^{18} ^[25]	2.2×10^{18} ^[26]	2.2×10^{18} ^[28]	2.2×10^{18} ^[28]
价带有效密度 N_v/cm^{-3}	1.8×10^{19} ^[25]	1.8×10^{19} ^[26]	1.8×10^{19} ^[28]	1.8×10^{19} ^[28]


 图 2 (a) 不同亲和能情况下的 J - V 曲线图; (b) CBO 和 ϕ 示意图
 Fig. 2. (a) J - V curves under different affinities; (b) schematic diagram of CBO and ϕ .

TiO₂ ETL 亲和能在 4.1—4.5 eV 内变化. 如图 2(a) 电池 J - V 曲线所示, 随着 ETL 亲和能逐渐增加, V_{oc} 呈现出逐渐下降的趋势, 但 J_{sc} 几乎没有变化, 电池的整体性能呈现先上升然后下降的趋势, 在亲和能为 4.3 eV 时电池性能最好.

为揭示 ETL 亲和能变化对电池性能影响, 对 ETL 和活性层导带之间的偏移量 ($CBO = E_{c_ETL} - E_{c_PVSK}$), 以及 ETL 导带底与阴极功函数能级差 ϕ (图 2(b)) 进行了研究. ETL 亲和能在 4.1—4.5 eV 变化过程中, CBO 的绝对值逐渐增大, 而 ϕ 在减小, 此时电池性能出现先上升后下降的趋势. 接着先研究了改变 ϕ 对电池性能的影响, 图 3(a) 给出了不同阴极功函数下, ϕ 不同时 PSCs 的 J - V 曲线, 随着 ϕ 从 0.2 eV 增加到 1.2 eV, PSCs 的性能单调下降, 并且出现了 S 型曲线. 在图 3(b) 中, 活性层的能带斜率随着 ϕ 从 0.2 eV 增加到 1.2 eV 而降低, 表示内建电压 V_{bi} 的减小并进一步降低了活性层

上的电场, 使活性层的载流子提取效率降低, 因此会出现 S 型曲线, 最终导致电池的整体性能降低. 如图 3(c) 和图 3(d) 所示, 随着 ϕ 从 0.2 eV 增加到 1.2 eV, 由于内建电场的降低, 导致光生载流子提取效率降低, 使活性层内的电子和空穴浓度上升^[29]. 因此单层结构下当 ETL 亲和能逐渐变化时, ϕ 值呈现出逐渐降低的趋势, 所以电池整体性能开始呈现上升的趋势.

但随着亲和能的继续改变, 电池性能出现下降的趋势, 接下来研究 CBO 对电池的影响. 如图 4(a) 所示, 当 ETL 的导带低于活性层的导带, 即 CBO 为负值时, 在活性层与 ETL 界面处会形成悬崖 (cliff) 结构的界面势垒. 悬崖势垒不会阻碍电子从活性层钙钛矿向 ETL 迁移, 故图 2(a) 中的 J_{sc} 几乎不受 ETL 亲和能即悬崖势垒影响. 当 ETL 具有较低导带能级时, 界面形成悬崖势垒将对电子的注入与运输起到阻碍作用, V_{oc} 将逐渐减小^[17].

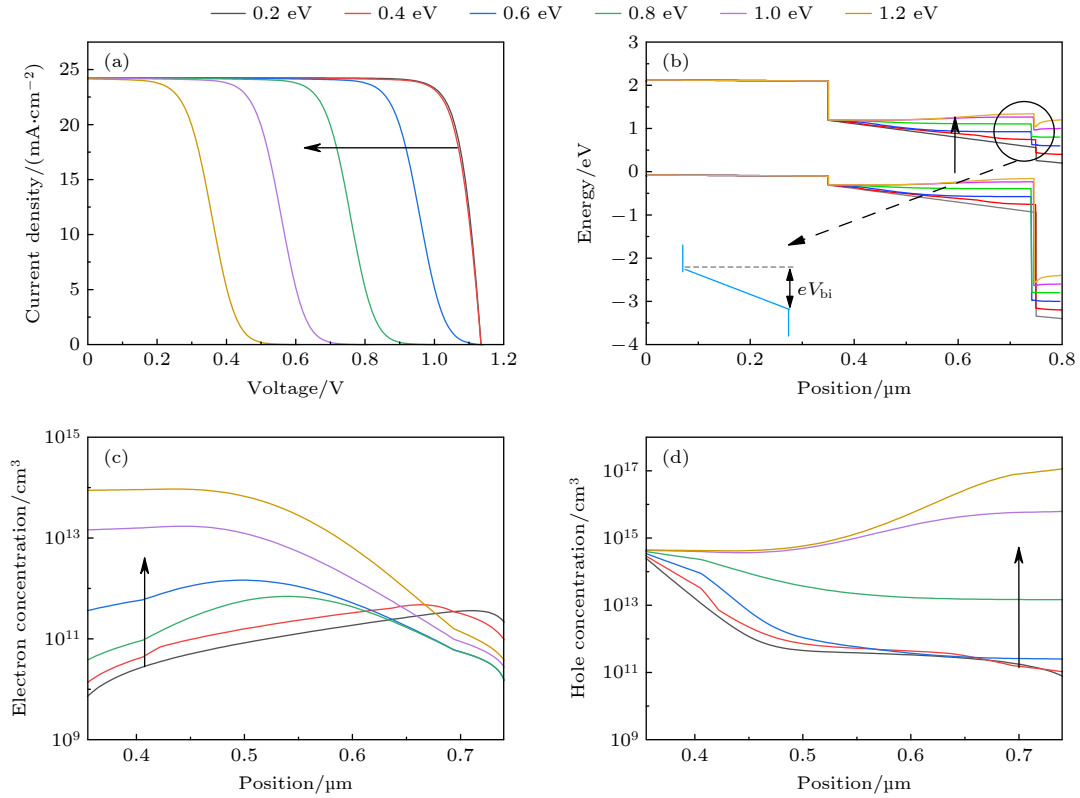


图 3 改变 ϕ 对电池性能的影响 (a) J - V 曲线; (b) 能级分布图; (c) 活性层中的电子分布图; (d) 活性层中的空穴分布图
Fig. 3. Influence of changing ϕ on battery performance: (a) J - V curves; (b) energy level distribution diagrams; (c) electron distribution in the active layer; (d) hole distribution in the active layer.

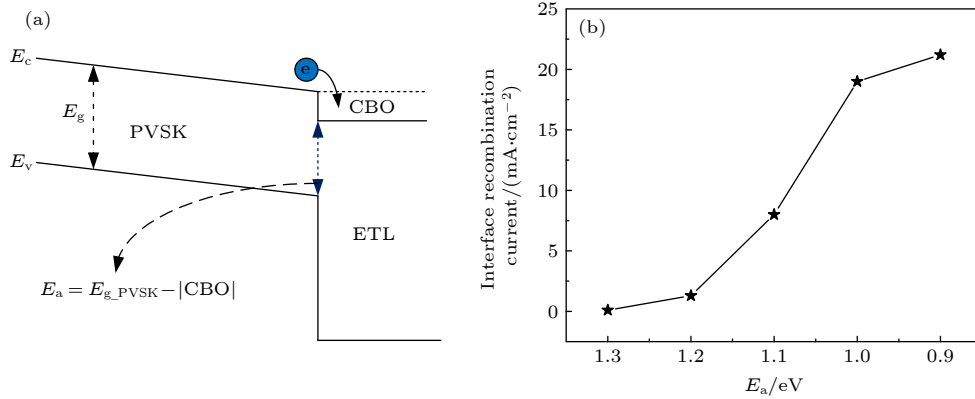


图 4 (a) 悬崖势垒的示意图; (b) 活性层与 ETL 界面复合电流随 E_a 变化
Fig. 4. (a) Schematic diagram of cliff barrier; (b) recombination current at the interface between the active layer and electron transport layer varies with E_a .

此外, CBO 会影响界面处载流子的复合强度, 定义载流子复合激活能是活性层带隙与 $|CBO|$ 的差, $E_a = E_{g_PVS} - |CBO|$. 随着 $|CBO|$ 的增加, 载流子复合激活能逐渐降低, 如图 4(b) 所示, 载流子复合激活能逐渐降低, 活性层与 ETL 接触面上的复合电流增加, 电池非辐射复合损耗变大. 所以亲和能继续变化时, 界面处复合消耗了大量的载流子, 导致器件电池性能下降. 因此, 减小活性层与

传输层导带偏移量的大小, 可以降低电池复合电流损耗, 提高电池性能 [29].

通过上述分析可得, 在亲和能变化的过程中, 电池性能呈现先上升后下降的趋势. 此时, 电池性能提高主要原因是 ETL 导带底与阴极功函数能级差 ϕ 势垒降低, 虽然复合激活能减小使得复合电流升高, 但 ϕ 降低使得电池中载流子的输运性能变好. 随着导带偏移量继续增大, 复合损耗进一步增

大, 电池性能出现下降的趋势. 因此为了减小 CBO 与 ϕ 对电池性能的影响, 采用双层 ETL 对电池的结构进行优化, 如图 5 所示, 将两种结构的 $J-V$ 曲线进行对比, 可以发现双层结构在整体性能上有所提高. 由图 2(b) 可以看出, 传统结构很难同时控制 CBO 与 ϕ 的大小, 但是双层结构却能降低活性层与 ETL 之间的导带偏移量, 减小导带偏移量可

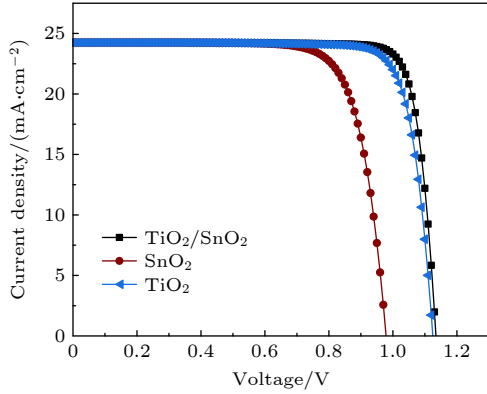


图 5 单层 ETL 与双层 ETL 结构的 $J-V$ 曲线对比
Fig. 5. $J-V$ curve comparison of single and double ETL structure.

以减小界面处的非辐射复合, 同时又减小了 ETL 与阴极功函数之间的差值 ϕ , 提升了载流子输运能力, 从而提高电池的性能.

3.2 双 ETL 亲和能对电池性能的影响

3.1 节研究了单层 ETL 结构下 ETL 亲和能对电池性能的影响, 并提出了双层 ETL 结构. 为了研究最佳的双层 ETL 导带结构, 如图 6(a) 所示, 在 SnO_2 亲和能保持不变的情况下, 改变 TiO_2 ETL 的亲和能为 4.0—4.4 eV; 电池的 V_{oc} , FF 与 PCE 的变化如图 6(b) 所示. 当 TiO_2 亲和能逐渐变化时, FF 与 PCE 先上升后下降, 而 V_{oc} 呈现逐渐下降的趋势. 在 TiO_2 层的亲和能为 4.2 eV 时, 可以获得最佳电池性能.

当亲和能为 4.0—4.4 eV 时, TiO_2 层与活性层之间的 $|\text{CBO}|$ 单调增加, 该界面上的复合在增加. 类似地, TiO_2 和 SnO_2 ETL 之间 $|\text{CBO}|$ 在逐渐减小, 此界面处复合减少. 由分析可知, 活性层通过光吸收产生载流子向传输层进行输运, 因此, 活性

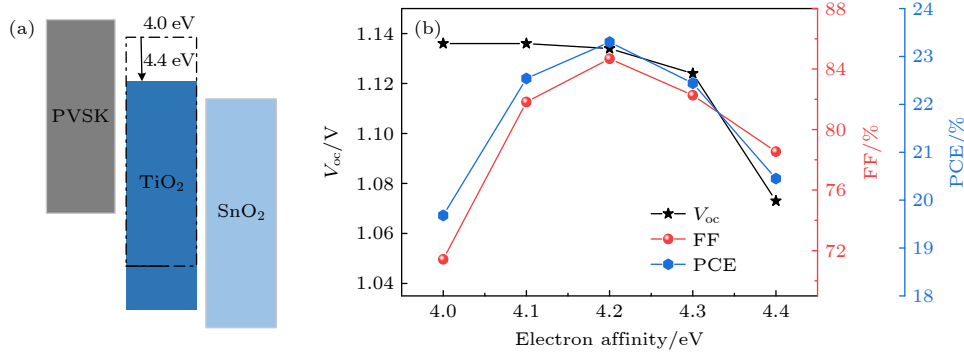


图 6 (a) TiO_2 层亲和能的变化; (b) V_{oc} , FF 与 PCE 随 TiO_2 层亲和能的变化
Fig. 6. (a) Change of the affinity for TiO_2 layer; (b) change of the affinity for V_{oc} , FF and PCE with the TiO_2 layer.

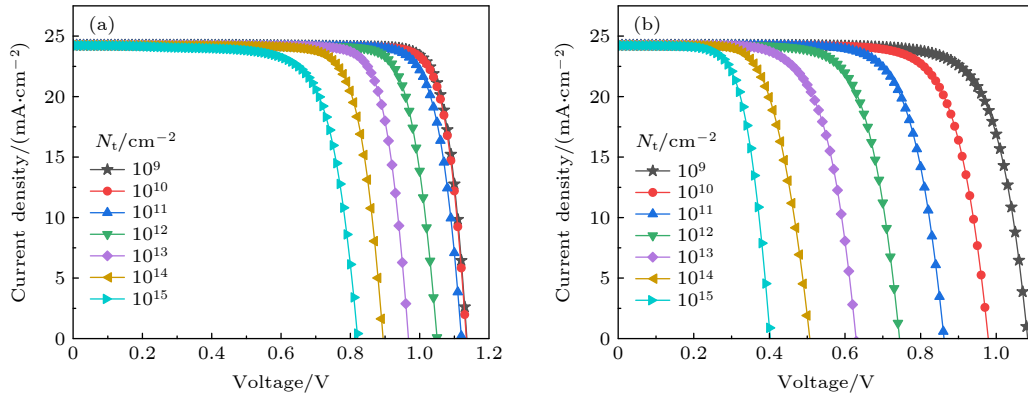


图 7 不同界面缺陷态密度情况下钙钛矿太阳能电池 $J-V$ 曲线 (a) 双层 ETL; (b) 单层 ETL
Fig. 7. $J-V$ curve of perovskite solar cell under different interface defect densities: (a) Double ETL; (b) single ETL.

层与 TiO_2 ETL 界面处的载流子浓度更高, 受到复合的影响更大. 当 TiO_2 层的亲和能在 4.0—4.2 eV 内变化时, 活性层与 TiO_2 层界面处的复合逐渐升高, 但是由于导带偏移量较小, 对电池的整体性能影响不大, 而 TiO_2 与 SnO_2 界面处的复合逐渐减小, 所以此时电池的整体性能呈现出上升的趋势. 当 TiO_2 亲和能在 4.2—4.4 eV 内变化时, 活性层与 TiO_2 层界面处的导带偏移量较大, 界面处复合增多, 电池性能呈现下降的趋势. 所以当 TiO_2 层的亲和能是 4.2 eV 时, 电池性能最好.

3.3 活性层与 ETL 界面处缺陷态密度的影响

不同层之间的界面复合是影响电池性能的重要因素, 界面缺陷会降低性能并导致大量的复合. 将钙钛矿与 ETL 界面处的缺陷态密度 N_t 选定在 10^9 — 10^{15} cm^{-2} 范围内变化, 研究缺陷态密度对两种结构的性能影响.

如图 7 所示, V_{oc} , FF, PCE 随着界面缺陷密度的增加而减小, 说明界面缺陷对于钙钛矿太阳能电池性能有很大的影响. 研究结果表明, 单层 ETL 结构器件的性能受到界面缺陷态密度的影响比双

层 ETL 结构更加明显, 缺陷态密度的增加意味着界面处的陷阱数量也会增加, 导致更多的复合, 从而导致性能下降. 如图 8 所示, 单层结构在 ETL 和活性层界面处的载流子密度较高, 当界面缺陷态密度上升时, 单层结构在界面处的复合损耗高于双层结构, 所以相对于单层结构来说, 双层结构受界面上缺陷态密度的影响较小. 因此当两种结构受到界面缺陷影响时, 双层 ETL 结构对缺陷的容忍度高于单层 ETL 结构.

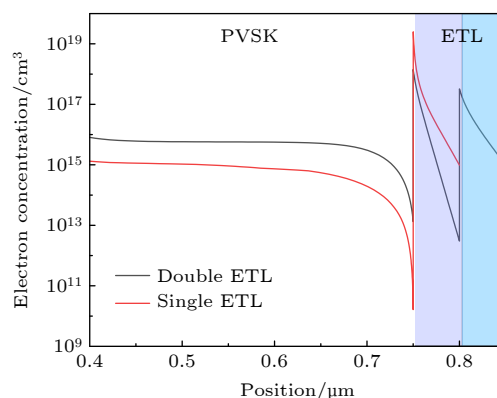


图 8 单层 ETL 和双层 ETL 结构下的电子浓度分布
Fig. 8. Electron concentration distribution diagram under single and double ETL structure.

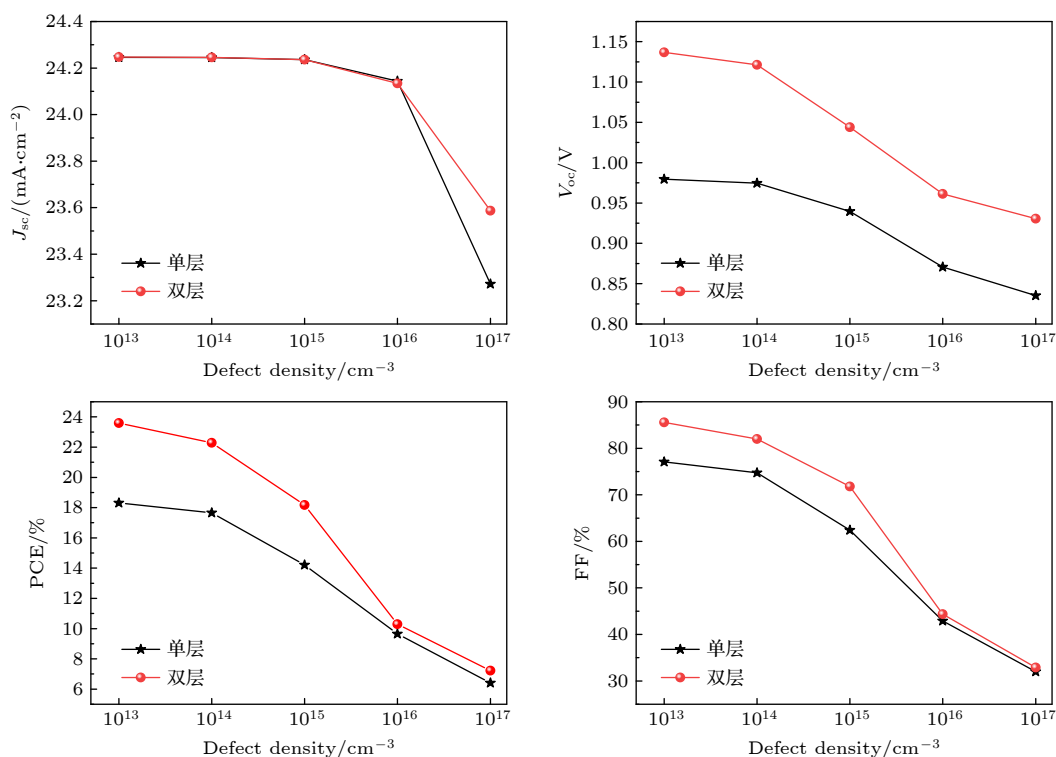


图 9 活性层缺陷态密度对单层和双层 ETL 结构性能影响对比

Fig. 9. Effect comparison of the active layer defect density of states on the performance of the single and double ETL structures.

3.4 活性层内缺陷态密度的影响

活性层作为光吸收层, 载流子的生成与复合主要都是发生在活性层内部, 所以研究缺陷态密度对器件性能的影响对于提高器件效率有着很重要的意义. 活性层薄膜的形貌和质量直接影响钙钛矿型太阳能电池的性能, 若薄膜质量不好, 则在活性层内形成高的缺陷密度, 载流子复合率增加, 导致太阳能电池性能下降. 将活性层缺陷态密度控制在 10^{13} — 10^{17} cm^{-3} 范围内变化, 对比两种结构性能变化的结果图, 如图 9 所示. 在活性层缺陷态密度逐渐增加的过程中, 两种结构的性能参数均呈现出下降的趋势, 主要原因是活性层缺陷态密度升高, 活性层内复合中心变多, 促使活性层内载流子的复合, 但是双层结构的性能一直优于单层结构. 在两种结构中, 当缺陷态密度大于 10^{16} cm^{-3} , 活性层内部的复合占据器件复合的主要部分, 此时 ETL 与活性层界面处的复合影响较小, 但是双层结构的性能仍高于单层结构. 故由于薄膜质量变差导致活性层缺陷增加时, 双层结构会比单层结构表现出更好的性能.

4 结 论

本文基于漂移-扩散模型对双 ETL 钙钛矿太阳能电池进行了研究. 结果表明: 双层 ETL 结构可以同时控制活性层与 ETL 之间的导带偏移量和 ETL 与电极之间的能级差, 形成阶梯型导带结构, 降低由于能级错位而引起的非辐射复合量, 提高电池的整体性能; 接着研究了双层 ETL 结构中 TiO_2 亲和能的影响, 得出当 TiO_2 亲和能为 4.2 eV 时, TiO_2 层两界面处复合影响最小, 此时电池性能最佳; 改变活性层与 ETL 界面处和活性层内部缺陷态密度, 发现双层 ETL 结构比单层 ETL 结构受缺陷的影响更小, 因此双层 ETL 结构受因制备过程中所造成的缺陷影响较小. 综上所述, 双层 ETL 结构钙钛矿太阳能电池的性能各方面优于单层 ETL, 并且对缺陷的容忍度更高, 是提高钙钛矿太阳能电池效率及稳定性的重要手段.

参考文献

[1] Kojima A, Teshima K, Shirai Y, Miyasaka T 2009 *J. Am.*

Chem. Soc. **131** 6050

[2] Akkerman Q A, Raino G, Kovalenko M V, Manna L 2018 *Nat. Mater* **17** 394

[3] Stranks S D, Eperon G E, Grancini G, Menelaou C, Alcocer M J P, Leijtens T, Herz L M, Petrozza A, Snaith H J 2013 *Science* **342** 341

[4] Mazzarella L, Lin Y H, Kirner S, et al. 2019 *Adv. Energy Mater.* **9** 14

[5] Kim M, Jeong J, Lu H Z, et al. 2022 *Science* **375** 302

[6] Jena A K, Kulkarni A, Miyasaka T 2019 *Chem. Rev.* **119** 3036

[7] Kim J Y, Lee J W, Jung H S, Shin H, Park N G 2020 *Chem. Rev.* **120** 7867

[8] Ma S, Cai M L, Cheng T, Ding X H, Shi X Q, Alsaedi A, Hayat T, Ding Y, Tan Z, Dai S Y 2018 *Sci. China Mater.* **61** 1257

[9] Shi P, Ding Y, Liu C, Yang Y, Arain Z, Cai M, Ren Y, Hayat T, Alsaedi A, Dai S 2019 *Sci. China Mater.* **62** 1846

[10] Shi X Q, Chen J Q, Wu Y H, Cai M L, Shi P J, Ma S, Liu C, Liu X P, Dai S Y 2020 *ACS Sustain. Chem. Eng.* **8** 4267

[11] Bi D Q, Yi C Y, Luo J S, Decoppet J D, Zhang F, Zakeeruddin S M, Li X, Hagfeldt A, Gratzel M 2016 *Nat. Energy* **1** 16142

[12] Shubham, Raghvendra, Pathak C, Pandey S K 2020 *IEEE Trans. Electro. Dev.* **67** 2837

[13] Son D Y, Lee J W, Choi Y J, Jang I H, Lee S, Yoo P J, Shin H, Ahn N, Choi M, Kim D, Park N G 2016 *Nat. Energy* **1** 16081

[14] Zheng X P, Chen B, Dai J, Fang Y J, Bai Y, Lin Y Z, Wei H T, Zeng X C, Huang J S 2017 *Nat. Energy* **2** 17102

[15] Kim G W, Kang G, Kim J, Lee G Y, Kim H I, Pyeon L, Lee J, Park T 2016 *Energ. Environ. Sci.* **9** 2326

[16] Liu M Z, Johnston M B, Snaith H J 2013 *Nature* **501** 395

[17] Gan Y J, Jiang Q B, Qin B Y, Bi X G, Li Q L 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 038801 (in Chinese) [甘永进, 蒋曲博, 覃斌毅, 毕雪光, 李清流 2021 物理学报 **70** 038801]

[18] Gao Y, Wu Y, Liu Y, Chen C, Shen X, Bai X, Shi Z, Yu W W, Dai Q, Zhang Y 2019 *Solar RRL* **3** 1900314

[19] Li N, Yan J, Ai Y, Jiang E, Lin L, Shou C, Yan B, Sheng J, Ye J 2019 *Sci. China Mater.* **63** 207

[20] Shi X, Tao Y, Li Z, Peng H, Cai M, Liu X, Zhang Z, Dai S 2021 *Sci. China Mater.* **64** 1858

[21] Ding X J, Ni L, Ma S B, Ma Y Z, Xiao L X, Chen Z J 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 038802 (in Chinese) [丁雄傑, 倪露, 马圣博, 马英壮, 肖立新, 陈志坚 2015 物理学报 **64** 038802]

[22] Wang D, Wu C, Luo W, Guo X, Qu B, Xiao L, Chen Z 2018 *ACS Appl. Energy Mater.* **1** 2215

[23] Wang Y, Duan C, Zhang X, Rujisamphan N, Liu Y, Li Y, Yuan J, Ma W 2020 *ACS Appl. Mater. Inter.* **12** 31659

[24] Ren X, Wang Z, Sha W E I, Choy W C H 2017 *ACS Photonics* **4** 934

[25] Singh N, Agarwal A, Agarwal M 2021 *Superlattice. Microst* **149** 106750

[26] Azri F, Meftah A, Sengouga N, Meftah A 2019 *Solar Energy* **181** 372

[27] Ahmed S, Jannat F, Khan M A K, Alim M A 2021 *Optik* **225** 165765

[28] Tan K, Lin P, Wang G, Liu Y, Xu Z C, Lin Y X 2016 *Solid State Electron* **126** 75

[29] Zhao P, Lin Z H, Wang J P, Yue M, Su J, Zhang J C, Chang J J, Hao Y 2019 *ACS Appl. Energy Mater.* **2** 4504

Physical mechanism of perovskite solar cell based on double electron transport layer^{*}

Zhou Yang¹⁾²⁾ Ren Xin-Gang^{1)2)3)†} Yan Ye-Qiang¹⁾²⁾ Ren Hao¹⁾²⁾
Du Hong-Mei⁴⁾ Cai Xue-Yuan^{5)‡} Huang Zhi-Xiang¹⁾²⁾

1) (*Information Materials and Intelligent Sensing Laboratory of Anhui Province, Anhui University, Hefei 230601, China*)

2) (*Key Laboratory of Target Recognition and Feature Extraction of Anhui Province, Lu'an 237000, China*)

3) (*Key Laboratory of Electromagnetic Environmental Sensing of Anhui Higher Education Institutes, Anhui University, Hefei 230601, China*)

4) (*Chengdu Yunda Technology Co., Ltd., Chengdu 611731, China*)

5) (*School of Electronic Engineering and Intelligent Manufacturing, Anqing Normal University, Anqing 246133, China*)

(Received 17 April 2022; revised manuscript received 1 June 2022)

Abstract

With their excellent photoelectric properties, perovskite solar cells have become the most promising photovoltaic devices in recent years. However, owing to defects and energy level misalignment, the non-radiative recombination loss of the perovskite solar cell will increase, which hinders the its efficiency and operational stability from being improved further. Therefore, it is very important to reduce the loss caused by energy level misalignment for realizing high-efficiency perovskite solar cells. In order to solve the above-mentioned problems, perovskite solar cell with dual electron transport layer (ETL) is studied in this work. The dual-layer structure forms a stepped conduction band structure to reduce the conduction band offset between the active layer and the transport layer, which reduces the interface recombination between the two structures and improves device performance. In addition, the influences of the defect density on the cell performance for the two ETL structures are also discussed. With the continuous increase of the defect density, the performance of the single-layer structure decreases more obviously. While the dual ETL structure can alleviate the performance dependence on the defect density in comparison with the single ETL structure. Therefore, the use of dual ETL can improve the performance of perovskite solar cells and defect tolerance, which provides guidance for designing high-performance solar cells.

Keywords: perovskite solar cell, double electron transport layer, interface recombination, defect density

PACS: 88.40.hj, 88.40.H–, 88.40.fc, 88.30.gg

DOI: 10.7498/aps.71.20220725

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 62171001, 61701003, 61901001, 61701001, U20A20164, 61871001, 61971001), the National Natural Science Foundation of Anhui Province, China (Grant Nos. 2108085MF198, 1808085QF179, 1908085QF259, 1908085QF251), the University Synergy Innovation Program of Anhui Province, China (Grant Nos. GXXT-2020-050, GXXT-2020-051, GXXT-2021-027), the Open Fund for Discipline Construction, Institute of Physical Science and Information Technology, Anhui University, China, and the Postdoctoral Science Foundation Founded Project of Anhui Province, China (Grant No. 2019B348).

[†] Corresponding author. E-mail: xgren@ahu.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: cai_welcome@163.com

基于双层电子传输层钙钛矿太阳能电池的物理机制

周扬 任信钢 闫业强 任昊 杜红梅 蔡雪原 黄志祥

Physical mechanism of perovskite solar cell based on double electron transport layer

Zhou Yang Ren Xin-Gang Yan Ye-Qiang Ren Hao Du Hong-Mei Cai Xue-Yuan Huang Zhi-Xiang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 208802 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20220725

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220725>

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

低温制备 SnO_2 电子传输层用于钙钛矿太阳能电池

Low-temperature preparation of SnO_2 electron transport layer for perovskite solar cells

物理学报. 2022, 71(11): 118801 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211930>

高效无空穴传输层碳基钙钛矿太阳能电池的制备与性能研究

Preparation and performance of high-efficient hole-transport-material-free carbon based perovskite solar cells

物理学报. 2018, 67(22): 228801 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181457>

n-i-p结构钙钛矿太阳能电池界面钝化的研究进展

Research progress of interface passivation of n-i-p perovskite solar cells

物理学报. 2019, 68(15): 158803 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190468>

EDTA/ SnO_2 双层复合电子传输层在钙钛矿电池中的应用

Application of EDTA/ SnO_2 double-layer composite electron transport layer to perovskite solar cells

物理学报. 2022, 71(13): 137201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220074>

氧化锌纳米棒形貌控制及其在钙钛矿太阳能电池中作为电子传输层的应用

Morphology control of zinc oxide nanorods and its application as an electron transport layer in perovskite solar cells

物理学报. 2020, 69(17): 178101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200555>

界面修饰对有机-无机杂化钙钛矿太阳能电池性能的影响

Effect of interface modification on performances of organic-inorganic hybrid perovskite solar cells

物理学报. 2021, 70(2): 028402 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201222>