

基于 SCAPS-1D 的钙钛矿太阳能电池性能的数值模拟与性能优化比较理论分析*

李诗文¹⁾ 周豹^{1)†} 赵啟融¹⁾ 杨小波²⁾ 谢再新¹⁾
段卓琦¹⁾ 赵恩铭¹⁾ 胡永茂¹⁾

1) (大理大学工程学院, 大理 671000)

2) (昆明理工大学, 昆明 650500)

(2025 年 3 月 13 日收到; 2025 年 4 月 30 日收到修改稿)

数值模拟方法为钙钛矿太阳能电池的器件优化提供了高效的研究手段. 本研究利用 SCAPS-1D 软件, 采用数值模拟方法, 基于 FTO/SnO₂/钙钛矿层/Cu₂O/Au 型太阳能电池, 采用 7 种不同无铅和含铅的材料作为钙钛矿层, 进行器件模拟研究并优化钙钛矿层厚度、界面缺陷态密度、载流子密度对太阳能电池性能的影响. 经过对比分析得出, 在 7 种钙钛矿太阳能电池器件中, Cs₂PtI₆ 钙钛矿太阳能电池的功率转换效率最高, 达到 27.95%. 这为设计高效、稳定的太阳能电池提供了参考.

关键词: 钙钛矿太阳能电池, 数值模拟, 参数优化, SCAPS

PACS: 77.84.Bw, 88.40.H-, 88.40.hj

DOI: 10.7498/aps.74.20250335

CSTR: 32037.14.aps.74.20250335

1 引言

随着全球能源需求持续增长和环境问题日益严峻, 开发高效、清洁的新能源技术已成为人类社会可持续发展的迫切需求^[1]. 21 世纪以来, 国家重点发展核能、风能、太阳能等新能源^[2], 其中太阳能作为最具潜力的可再生能源之一, 具有可再生、清洁、储量巨大、易获取等优势, 其高效利用是解决能源危机和减少碳排放的关键途径. 钙钛矿太阳能电池因其高转换效率 (目前已超过 26%)^[3]、吸收系数高^[4]、载流子迁移率高^[5]、带隙可调^[6]、低激子结合能^[7]、成本较低^[8]等重要应用潜力, 已引发科学界的广泛关注^[9,10]. 自 Kojima 等^[11]首次于 2009 年将钙钛矿用作光伏吸收材料, 采用 CH₃NH₃PbBr₃

和 CH₃NH₃PbI₃ 两种材料作为钙钛矿层首次成功制备出钙钛矿太阳能电池 (perovskite solar cells, PSCs) 之后, 钙钛矿光伏技术的研究持续深化, 在材料设计、器件优化和稳定性提升等方面取得系列重要成果. 然而, PSCs 的实验制备通常面临制备周期较长, 工艺复杂等问题. 例如, 优化薄膜沉积、界面工程和组分调控需反复尝试, 且受环境 (如湿度、温度) 和材料批次的影响, 导致研发效率低下. 相比之下, 数值模拟方法因其高效、低成本的特点, 成为深入理解器件物理机制和优化电池性能的重要手段. 通过数值模拟, 可以系统地分析不同材料参数、界面特性和器件结构对电池性能的影响, 从而指导实验设计, 减少试错成本, 避免材料浪费.

在众多模拟工具中, 太阳能电池电容模拟器 (SCAPS-1D) 因其对多层异质结器件的精确模拟

* 国家自然科学基金 (批准号: 12364025, 62065001) 和云南省中青年学术和技术带头人后备人才项目 (批准号: 202205AC160001) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: bzhou3@163.com

能力, 被广泛应用于 PSCs 的性能预测与优化研究. 相较于其他仿真软件, SCAPS-1D 具有界面态模拟灵活, 参数设置直观, 计算效率高的优势, 能有效模拟载流子运输、复合机制及能带匹配等关键物理过程. 2021 年, Bhavsar 等^[12] 使用 SCAPS-1D 软件针对不同的电子传输层对不同的 PSCs 进行建模, 发现以 SnO_2 为电子传输层 (electron transport layer, ETL) 的光电转换效率 (power conversion efficiency, PCE) 高达 21%. 2023 年, Hossain 等^[13] 研究了 CsPbI_3 作为钙钛矿层材料的潜力, 效率可达 18.17%, 但是考虑到环境污染, 研究人员积极探索无铅替代品^[14]. 目前, 已经探明多种元素可作为替代 Pb^{2+} 的有效替代者, 其中包括 Ge^{2+} , Sn^{2+} , Pt^{4+} 等. 然而, Ge^{2+} 和 Sn^{2+} 容易被氧化, 导致电池稳定性降低^[14]. 相比之下, Pt^{4+} 具有较高的化学稳定性, 不仅能有效维护电池内部晶格的完整结构, 还能显著降低因结构与畸变带来的不利影响, 为电池性能的持久稳定提供了有力保障. Mustafa 等^[15] 对 $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ 进行了数值模拟, 模拟结果显示了良好的效率和稳定性, 展示了 $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ 钙钛矿在太阳能电池技术中的潜力. 2024 年, Uddin 等^[16] 以 Cu_2O 为空穴传输层, 使用 SCAPS-1D 对电池的各层厚度和缺陷态密度优化, 获得可 25.16% 的理论 PCE.

基于以上, 本文通过在同一配置下, 以 SnO_2 为 ETL, Cu_2O 为 HTL, 采用 7 种不同无铅和含铅的材料作为钙钛矿层, 进行器件模拟研究并优化钙钛矿层厚度、ETL 厚度、HTL 厚度、界面缺陷态密度、载流子密度、温度对太阳能电池性能的影响, 为实现钙钛矿的高效率和高稳定性开展工作.

2 仿真方法和模型

SCAPS-1D 是比利时根特大学 Marc Burgelman 教授等开发的一维太阳电池模拟软件^[17]. 其通过求解 3 个半导体基本方程组, 得出电池 $I-V$ 特性、光谱响应以及电场分布等相关信息. 这 3 个方程即泊松方程 (1) 以及电子 (2) 和空穴 (3) 的连续性方程, 如下所示^[18,19]:

$$\frac{d}{dx} \left[\varepsilon(x) \frac{d\varphi}{dx} \right] = q[p(x) - n(x) + N_D^+(x) - N_A^-(x) + P_t(x) - n_t(x)], \quad (1)$$

$$\frac{1}{q} \frac{dJ_p}{dx} + R_p(x) - G(x) = 0, \quad (2)$$

$$-\frac{1}{q} \frac{dJ_n}{dx} + R_n(x) - G(x) = 0, \quad (3)$$

式中, ε 为介电常数; φ 为静电势; q 为电子电荷; $p(x)$, $n(x)$, $P_t(x)$, $n_t(x)$ 分别为自由空穴、自由电子、俘获空穴以及俘获电子; $N_D^+(x)$, $N_A^-(x)$ 分别是电离施主浓度和电离受主浓度; J_n 为电子电流密度, J_p 为空穴电流密度; $R_n(x)$ 和 $R_p(x)$ 分别为电子和空穴的复合率; $G(x)$ 为载流子净产生率; x 为位置坐标.

本研究利用 SCAPS-1D 对不同钙钛矿基太阳能电池进行对比分析, SCAPS 软件支持 7 层异质结构太阳能电池结构, 并且支持在不同入射光谱下模拟. 研究的钙钛矿太阳能电池结构为 FTO/ SnO_2 /Perovskite/ Cu_2O /Au, 图 1 所示为模拟 PSCs 的结构. 其中, SnO_2 和 Cu_2O 分别作为电子传输层和空穴传输层, 不同的无铅钙钛矿层材料作为吸收层, FTO 和 Au 分别作为前电极和金属背电极, 功函数分别设置为 4.1 eV 和 4.7 eV^[20], 电池参数配置如表 1 所列^[1,13,15,21-26]. 此外, 各层材料的电子和空穴热速度都设置为 10^7 cm/s^[27], 此模拟中的电池层不考虑表面和界面处的光反射率, 表面和界面处理对电池的光学性能很小, 可以被忽略. 缺陷能级位于中心带隙具有高斯分布和 0.1 eV 的能量. 在 AM1.5G 频谱的照射下和 300 K 工作温度进行模拟, 且假设电阻为 $2.00 \Omega \cdot \text{cm}^2$.

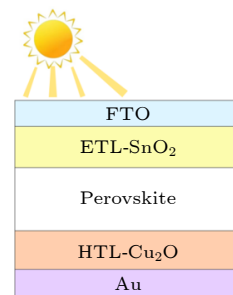


图 1 用于仿真的太阳能电池模型
Fig. 1. Solar cell model used for simulation.

3 结果和讨论

3.1 钙钛矿层厚度对 PSCs 的影响

本研究根据从不同理论和实验论文收集的材料参数, 对钙钛矿太阳能电池进行数值模拟.

在 FTO/SnO₂/钙钛矿层/Cu₂O/Au 器件结构中, 其他参数保持不变的情况下, 采用控制变量的方法, 改变钙钛矿层材料, 对太阳能电池模型进行模拟实验, 以获得每种情况下的优化结果. 钙钛矿层作为太阳能电池的核心部分, 其性质直接决定了整

个器件的性能. 通过改变钙钛矿的厚度来研究其对器件性能的影响. 在保持温度等参数不变的情况下, 将钙钛矿层厚度在 100—2000 nm, 间隔 100 nm 范围内变化, 以便进行对比分析. 图 2(a)—(d) 分别是钙钛矿层厚度变化对电池性能开路电压

表 1 模拟研究中使用的 PSCs 物理参数
Table 1. Physical parameters of PSCs used in simulation studies.

Parameter	SnO ₂	Cu ₂ O	Cs ₂ BiAgI ₆	CsPbI ₃	Cs ₂ PtI ₆	CsGeI ₃	PeDA ₂ MA ₅ Pb ₆ I ₁₉	MASnI ₃	FAMAPbI ₃
Layer thickness/nm	100	100	100	100	100	100	100	100	100
Bandgap/eV	3.3	2.17	1.6	1.694	1.37	1.6	1.6	1.35	1.53
Electron affinity/eV	4	3.2	3.9	3.95	4.3	3.52	3.98	4.17	4
Relative permittivity	9	6.6	6.5	6	4.8	18	25	6.5	9
Effective conduction band density/(10 ¹⁷ cm ⁻³)	2.2	2500	100	1100	0.003	10	7.5	10	100
Effective valence band density/(10 ¹⁷ cm ⁻³)	2.2	2500	100	800	1	100	18	100	50
Electron mobility/(cm ² ·V ⁻¹ ·s ⁻¹)	20	80	2	25	62.6	20	1.4	1.6	5
Hole mobility/(cm ² ·V ⁻¹ ·s ⁻¹)	10	80	2	25	62.6	20	0.3	1.6	3
Donor concentration/(10 ¹⁷ cm ⁻³)	10	0	0	0.01	0.00001	1	0	0	0.2
Acceptor concentration/(10 ¹⁷ cm ⁻³)	0	30	10	0	0.01	1	0	10	0.2
Density of defect state/(10 ¹⁴ cm ⁻³)	1	10	1	1	1000	1	2.5	1	0.1
Refs.	[1]	[15]	[21]	[13]	[22]	[23]	[24]	[25]	[26]

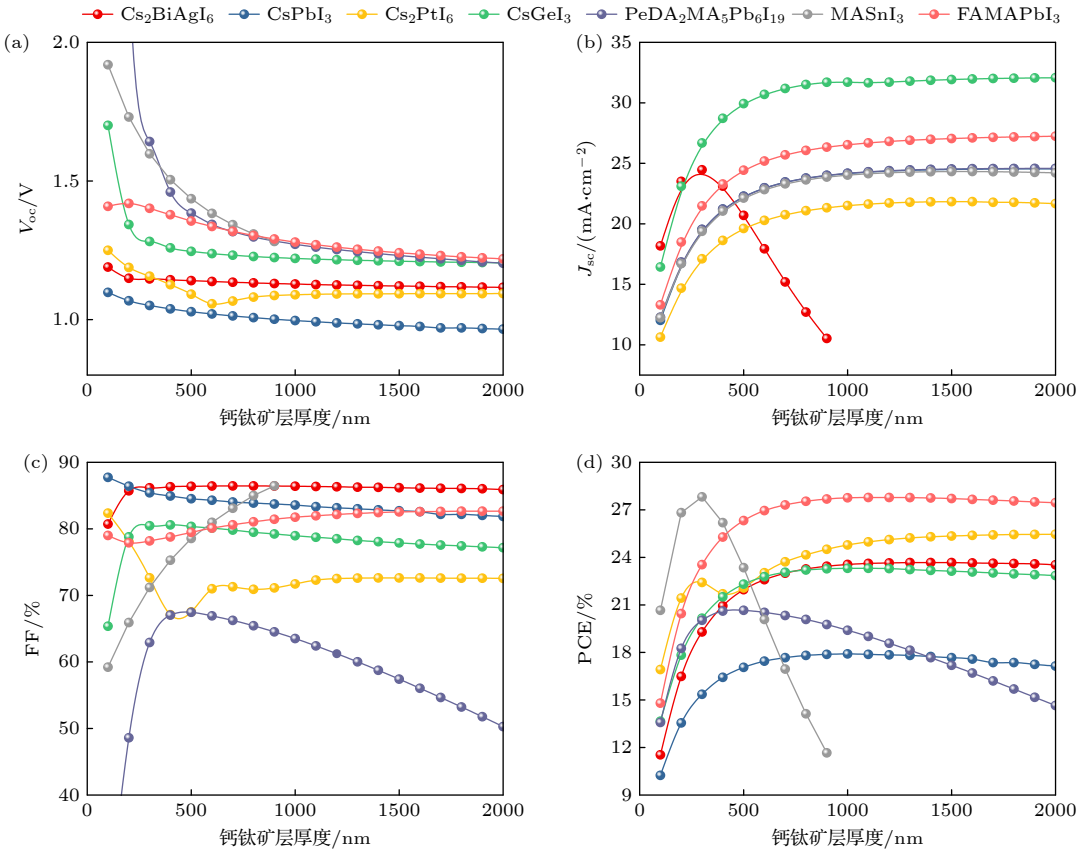


图 2 钙钛矿层厚度对 FTO/SnO₂/钙钛矿层/Cu₂O/Au 性能参数的影响 (a) V_{oc} ; (b) J_{sc} ; (c) FF; (d) PCE

Fig. 2. Effect of perovskite layer thickness on the performance parameters of FTO/SnO₂/Perovskite Layer/Cu₂O/Au: (a) V_{oc} ; (b) J_{sc} ; (c) FF; (d) PCE.

(open-circuit voltage, V_{oc})、短路电流密度 (short-circuit current density, J_{sc})、填充因子 (fill factor, FF)、PCE 的影响. 可以看出: 在计算范围内, 随着厚度的增大, V_{oc} 减小后几乎保持不变; J_{sc} 和 PCE 随厚度变化的曲线几乎相同, 随厚度的增大而增大, 到达最优值后逐渐减小或趋于稳定; 但不同钙钛矿材料的 PCE 达到最大值的最佳厚度不同, 在 100—500 nm 之间; 随着钙钛矿层厚度的增大, 器件中的光吸收会更强, 这意味着产生了更多的光生载流子, 最终导致 J_{sc} 和 PCE 的提高. 然而, 厚度的进一步增大会超过这些材料的载流子扩散长度, 未收集的载流子会因复合而损失, 导致 V_{oc} 和 J_{sc} 下降, 最终降低电池效率. 如图 2(c) 所示, MASnI_3 在计算范围内 FF 急剧上升, $\text{Cs}_2\text{BiAgI}_6$, CsPbI_3 , Cs_2PtI_6 , CsGeI_3 四种材料的稳定性较高并且在 400 nm 后逐渐趋于稳定, 是因为 Cs^+ 有较大的离子半径和较高的离子极性, 能形成稳定的晶格结构, 稳定性强. 而 $\text{PeDA}_2\text{MA}_5\text{Pb}_6\text{I}_{19}$ 在厚度超过 500 nm 后由于符合损失导致生成的电子-空穴对

无法有效贡献给电池的输出电流, FF 呈下降趋势. 在 PSCs 研究中, 发现吸收层厚度对电池性能的影响规律在含铅和无铅中呈现显著差异. 以本文的无铅钙钛矿 MASnI_3 为例, 模拟结果显示出其 PCE 表现出非常规的结果, 当钙钛矿层厚度增至 300 nm 时, J_{sc} 和 PCE 达到最大值; 当厚度超过 300 nm 后, 过厚的钙钛矿层会显著增大器件的串联电阻, 同时, 无铅钙钛矿固有的低载流子迁移率导致电荷扩散长度受限, 使载流子在传输至背接触界面过程中发生非辐射复合, 导致 J_{sc} 衰减; 在厚度超过 1000 nm 后, 因为 Sn^{2+} 的易氧化而发生严重的界面缺陷.

3.2 L1/L2 缺陷态密度对 PSCs 的影响

界面缺陷态密度是影响太阳能电池性能的重要参数. L1 和 L2 这两个界面层的形成是由于界面缺陷的存在所致. 当界面态密度过大时, 界面处的载流子复合过多, 进入吸收层进行复合的载流子减少, 空穴和电子无法通过吸收层高效地传输, 影响

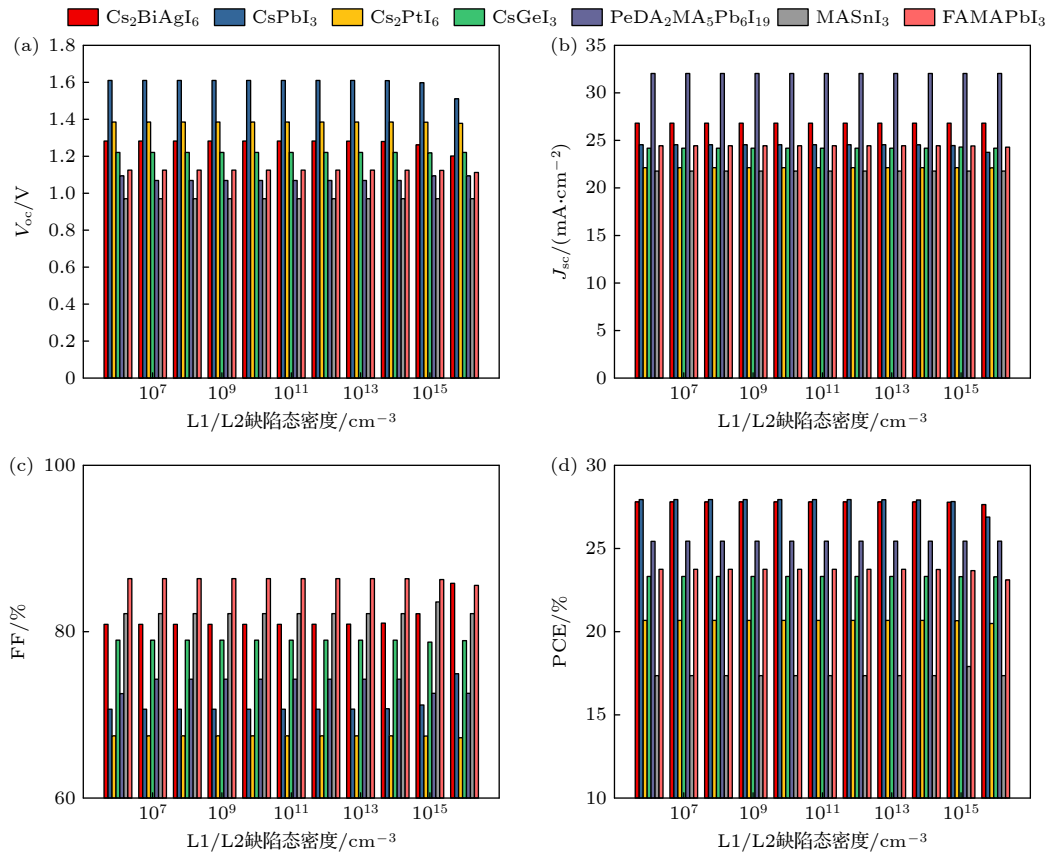


图 3 L1/L2 缺陷态密度对 FTO/SnO₂/钙钛矿层/Cu₂O/Au 性能参数的影响 (a) V_{oc} ; (b) J_{sc} ; (c) FF; (d) PCE

Fig. 3. Influence of L1/L2 defect state density on the performance parameters of FTO/SnO₂/Perovskite Layer/Cu₂O/Au: (a) V_{oc} ; (b) J_{sc} ; (c) FF; (d) PCE.

开路电压, 导致电池性能下降. 当界面缺陷态密度数量级低于 10^9 cm^{-3} 时, $J-V$ 特性曲线基本保持不变. 因工艺的限制, 很难做到使界面缺陷态密度的数量级低于 10^9 cm^{-3} , 而较小的界面缺陷的填充因子也会变小, 极不稳定. 考虑电池性能参数表现和工艺实现, 如图 3 所示, 通过改变界面层缺陷态密度, 对电池性能的影响几乎保持不变. 相比于传统硅太阳能电池, 钙钛矿材料本身就具有很低的缺陷态密度, 这是钙钛矿材料能够实现高效率的重要原因. 因此进一步降低界面缺陷的影响通常是有限的.

3.3 载流子密度对 PSCs 的影响

为了找到 ETL 最佳的施主掺杂浓度 (donor concentration, N_D), SnO_2 的 N_D 从 10^{15} cm^{-3} 提高到 10^{21} cm^{-3} . V_{oc} , J_{sc} , FF 和 PCE 的变化如图 4(a)–(d) 所示. 随着 N_D 从 10^{15} cm^{-3} 提高到 10^{21} cm^{-3} , 除 CsGeI_3 外, 其他结构的电池性能参数基本没有变化, 这是因为电子传输层的能级结构与钙钛矿层已经很好地匹配, 稍微改变掺杂浓度不会显著影响能级结构和电荷分离. CsGeI_3 的稳定性和 PCE 较

高, SnO_2 与 CsGeI_3 之间能形成致密、平整的界面, 降低电荷复合, 提高电池稳定性, 掺杂浓度的变化会影响 SnO_2 的费米能级位置, 可以更好地实现与钙钛矿层的能级匹配, 优化电荷分离和注入过程. 较高的 N_D 值使得在 ETL/钙钛矿界面上更容易提取和传输电荷 [28]. 高浓度的 N_D 会分别在 $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 和 $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 导致 $\text{Cs}_2\text{BiAgI}_6$ 和 Cs_2PtI_6 的晶格发生严重畸变, 破坏原有的电池结构.

HTL 受主掺杂浓度 (acceptor concentration, N_A) 的变化对 PSCs 的性能有重大影响. 浓度的微小变化导致 PSCs 稳定性的变化. 为了获得最优 N_A 值, 使 N_A 在 10^{15} – 10^{21} cm^{-3} 之间变化. 随着 HTL 受主掺杂浓度的增大, 如图 5 所示, V_{oc} 和 J_{sc} 基本没有变化. $\text{Cs}_2\text{BiAgI}_6$, CsPbI_3 , CsGeI_3 , FAMAPbI_3 , MASnI_3 的 FF 和 PCE 也基本没有发生变化, 而 Cs_2PtI_6 和 $\text{PeDA}_2\text{MA}_5\text{Pb}_6\text{I}_{19}$ 的 PCE 和 FF 显著提升, PCE 分别从 21.41% 提高到 27.95%, 从 18.85% 提高到 22.78%, FF 分别从 61.38% 提高到 80.53%, 从 55.47% 提高到 72%. 因为不同的钙钛矿材料具有不同的电荷传输机制, 掺杂浓度的变化不足以改

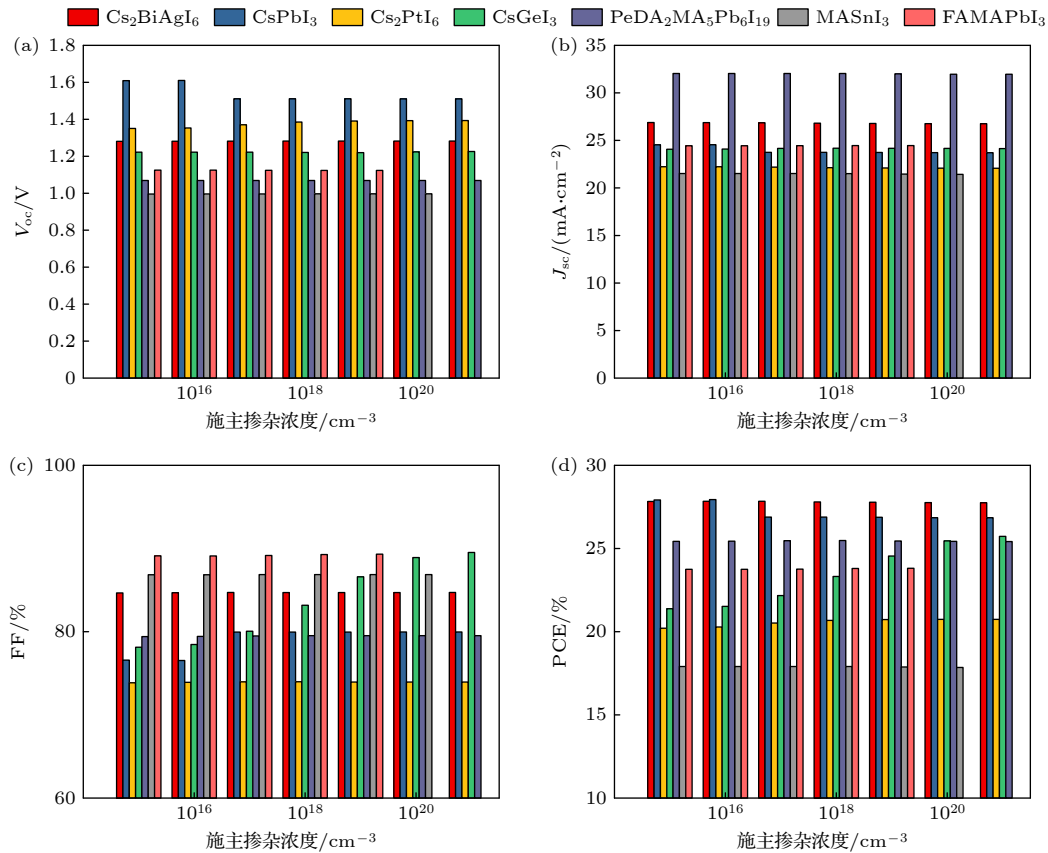


图 4 N_D 对 FTO/ SnO_2 /钙钛矿层/ Cu_2O /Au 的性能参数的影响 (a) V_{oc} ; (b) J_{sc} ; (c) FF; (d) PCE

Fig. 4. Effect of N_D on the performance parameters of FTO/ SnO_2 /Perovskite Layer/ Cu_2O /Au: (a) V_{oc} ; (b) J_{sc} ; (c) FF; (d) PCE.

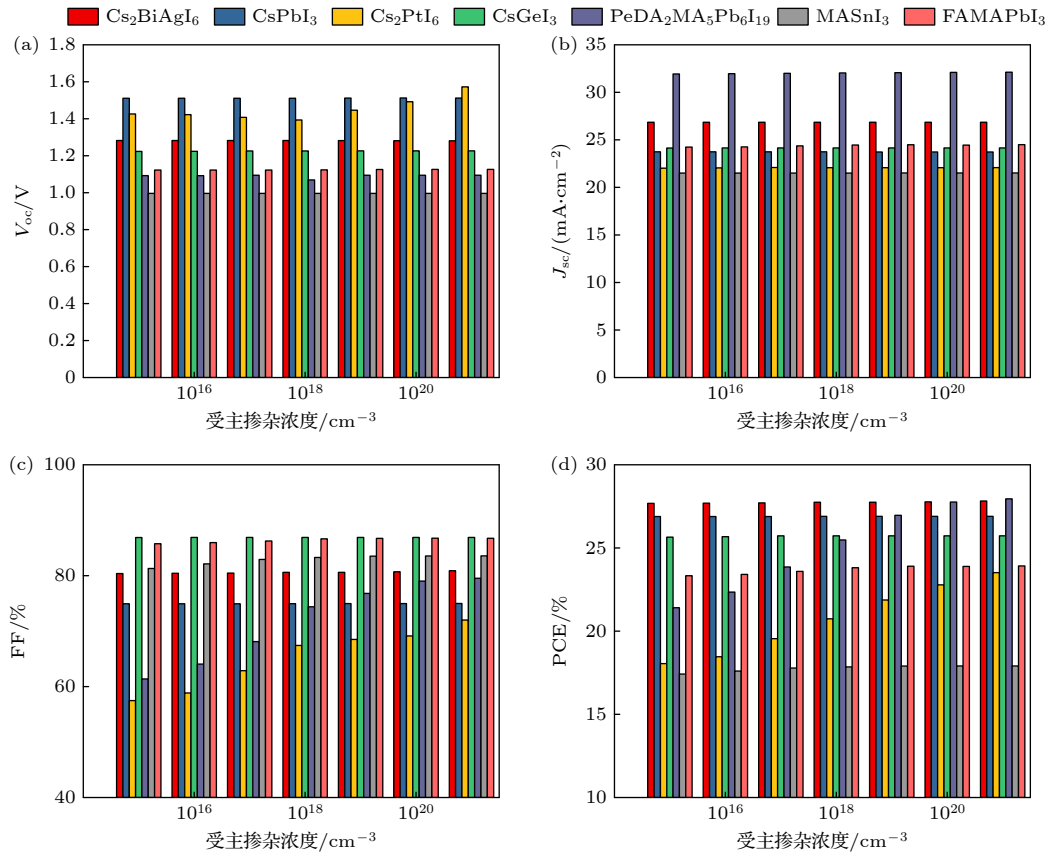


图 5 N_A 对 FTO/SnO₂/钙钛矿层/Cu₂O/Au 性能参数的影响 (a) V_{oc} ; (b) J_{sc} ; (c) FF; (d) PCE

Fig. 5. Effect of N_A on the performance parameters of FTO/SnO₂/Perovskite Layer/Cu₂O/Au: (a) V_{oc} ; (b) J_{sc} ; (c) FF; (d) PCE.

变材料的电荷传输路径, 因此 Cs₂BiAgI₆, CsPbI₃, CsGeI₃, FAMAPbI₃, MASnI₃ 的 FF 和 PCE 变化不明显. 对于 Cs₂PtI₆ 和 PeDA₂MA₅Pb₆I₁₉, N_A 值越高, PSCs 层之间的界面电场产生就越高, 促进光生载流子的有效分离, FF 和 PCE 上升. 然而, 过高的 N_A 值可能会加剧电荷载流子在界面及体相中的复合过程, 从而不利于 FF 和 PCE 的提升^[29].

经过优化, 每种钙钛矿太阳能电池的性能如表 2 所列, 通过对这些模型的数值模拟, 所有的

电池结构的 PCE 均有提升, 在所有钙钛矿的结构中, Cs₂BiAgI₆ 的 PCE 增幅最大, 由 11.54% 提升至 23.9%, 基于 Cs₂PtI₆ 的 PSCs 的 PCE 最高可达 27.95%, 在保持高效率的同时, 稳定性也达到了 80.53%.

3.4 PSCs 的温度测试

温度对太阳能电池的效率和稳定性都有影响. 温度上升, 电子的能量相应增大, 电子与空穴之间的复合速率增大, 从而降低电荷载流子的寿命. 在太阳能电池中, Au 电极通常是用作电子的收集和导出层, 而空穴则通过其他材料进行传输. 太阳能电池的一般应用场景为地球和空间站, 所对应温度为 300—600 K. 如图 6(b), 在 300—600 K, 钙钛矿太阳能电池的 PCE 随着温度的升高而降低; 而不同材料对温度的稳定性不同, MASnI₃, CsGeI₃ 和 PeDA₂MA₅Pb₆I₁₉ 在较低的温度范围内 (300—350 K), 可能存在热激活过程, 这个过程涉及材料内部缺陷的重排、载流子迁移率的提高以及界面复合速率的降低, 从而暂时性地提高了 FF, 随着温度

表 2 优化前后的电池性能对比

Table 2. Comparison of solar cell performance before and after optimization.

钙钛矿层材料	优化前		优化后	
	FF/%	PCE/%	FF/%	PCE/%
Cs ₂ BiAgI ₆	80.72	11.54	86.73	23.90
CsPbI ₃	87.73	10.24	83.58	17.91
Cs ₂ PtI ₆	78.00	16.92	80.53	27.95
CsGeI ₃	65.37	13.66	86.90	25.73
PeDA ₂ MA ₅ Pb ₆ I ₁₉	21.99	13.58	72.00	23.52
MASnI ₃	59.22	20.66	74.99	26.90
FAMAPbI ₃	79.00	14.80	80.89	27.82

进一步升高, 热激活效应逐渐减弱, 材料本身的热稳定性开始占据主导地位, 导致 FF 下降. $\text{Cs}_2\text{BiAgI}_6$, $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$, Cs_2PtI_6 和 FAMAPbI_3 四种材料在整个温度范围内的 FF 都表现出下降趋势. 7 种结构的钙钛矿太阳能电池的温度稳定性不同, 在 600 K 的极端温度条件下, CsPbI_3 的 PCE 仅为在 300 K 室温条件下的 5%, 而 MASnI_3 电池性的 PCE 保持室温条件下的 82%, 电池器件稳定.

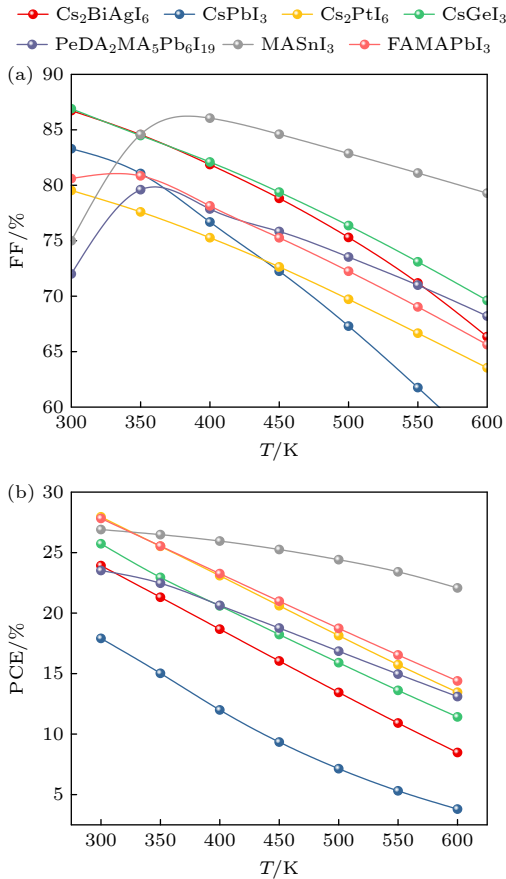


图 6 (a) 温度对 FF 的影响; (b) 温度对 PCE 的影响
 Fig. 6. (a) Effect of temperature on FF; (b) effect of temperature on PCE.

3.5 优化后 PSCs 的 $J-V$ 曲线分析

在优化条件下, 各种钙钛矿材料在光照条件下的 $J-V$ 特性如图 7 所示. 从图 7 可以看出, 与初始模型相比, 优化后的最终模型在电流-电压 ($J-V$) 特性上表现出显著提升. 通过分析 $J-V$ 特性曲线, 可以评估 PSCs 的性能参数. 所有器件均显示出非常好的 $J-V$ 特性. Cs_2PtI_6 具有最窄的带隙, 具有最宽的吸收光谱, 而 CsPbI_3 的带隙最宽, 其他材料则介于两者之间. 窄带隙的钙钛矿材料具有更强的光学吸收能力和更宽的光谱吸收范围, 这是由于

较低的带隙能够促进更宽波长范围内光子的有效吸收, 从而产生光生载流子. 这一性质使更多的太阳光谱能量转化成电能, 最终显著提升 PSCs 的 PCE.

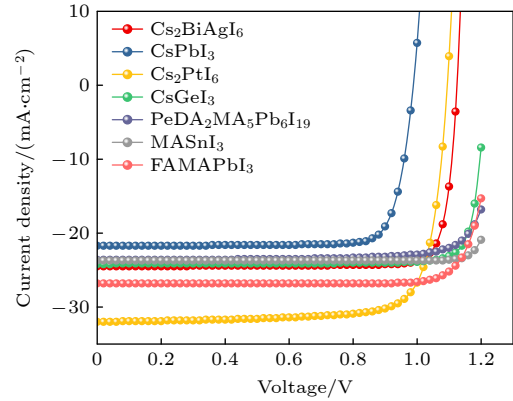


图 7 不同钙钛矿材料优化后的太阳能电池的 $J-V$ 特性
 Fig. 7. $J-V$ characteristics of solar cells optimized with different perovskite materials.

3.6 优化后 PSCs 的 QE 曲线分析

量子效率 (quantum efficiency, QE) 是衡量太阳能电池从入射光子中成功产生电荷载体 (电子-空穴对) 能力的物理量. 其定义为在特定波长下, 太阳能电池产生的电子-空穴对数量与入射光子数量之比. 实验数据分析表明, 通过对 PSCs 器件结构进行优化, 可以显著提升钙钛矿层的光生载流子产生率, 增强整体电池性能. 通过图 8 基于不同钙钛矿材料的 PSCs 的量子效率的分析, 发现以 $\text{Cs}_2\text{BiAgI}_6$, CsPbI_3 , Cs_2PtI_6 , CsGeI_3 , $\text{PeDA}_2\text{MA}_5\text{Pb}_6\text{I}_{19}$, FAMAPbI_3 作为钙钛矿层的电池均表现出优异的量子效率特性, 这些材料在最大量子效率处表现出最低的能量损失, 表明其具有良好的光电转

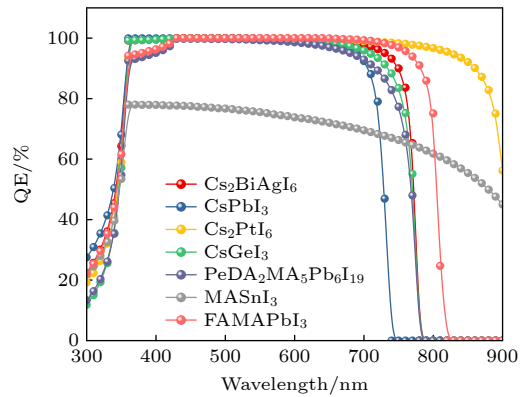


图 8 不同钙钛矿材料优化后的 QE 曲线
 Fig. 8. QE curves of solar cells optimized with different perovskite materials.

换特性. 在短波长区域 (300—500 nm) 观察到较高的 QE 值, 主要是因为高能光子能够有效克服材料的带隙能量, 促进价带电子向导带的跃迁, 从而实现高效的光生载流子产生与收集, 这一现象也反映了器件前表面钝化处理的良好效果. 在长波长区域 (>600 nm), Cs₂PtI₆ 基器件表现出更好的量子效率响应, 表明该材料对长波长光子具有更强的吸收和利用能力. 这种增强的红外响应特性直接导致了器件 J_{sc} 的显著提升, 为开发高效宽光谱响应的钙钛矿太阳能电池提供了重要的材料选择依据.

4 结 论

本文利用 SCAPS-1D 对基于 FTO/SnO₂/钙钛矿层/Cu₂O/Au 型太阳能电池进行建模和性能分析. 采用 Cs₂BiAgI₆, CsPbI₃, Cs₂PtI₆, CsGeI₃, PeDA₂MA₅Pb₆I₁₉, MASnI₃, FAMAPbI₃ 材料作为钙钛矿层, 改变 ETL、HTL 和钙钛矿层厚度、缺陷态密度、载流子密度等参数对这 7 种模型进行参数优化. 通过对这些模型的数值模拟, 在所有钙钛矿的结构中, 发现基于 Cs₂PtI₆ 的器件显示出了最高的 PCE, 达到了 27.95%, 钙钛矿层厚度在 200 nm 处最佳, PCE 在 200 nm 处最大值为 25.43%, 薄的钙钛矿层厚度可以为钙钛矿模型提供良好的效率. 缺陷态密度对 PSCs 的性能没有显著影响. 随着载流子的变化, 电池性能逐步呈现提升趋势, 当 ETL 施主密度达到 10^{18} cm^{-3} 时, 获得了 25.48% 的最高 PCE——这也是数值模拟中得到的最佳结果, 这是因为更高的 N_D 能促进电荷向 ETL/钙钛矿层的传输. HTL 的最佳受主浓度确定为 10^{21} cm^{-3} , 此时器件的最高 PCE 达到 27.95%. 经过全面优化后, 该钙钛矿太阳能电池的转换效率从初始的 16.92% 最终提升至 27.95%.

参考文献

- [1] Prasanna J L, Kumar A, Ravi Kumar M, Gayathri K, Santhosh C, Kumer S, Mohan E, Udayakumar S 2024 *Int. J. Energy Res.* **2024** 3942154
- [2] Zhang N, Mi Q Y, Deng J J, Zhao X J 2024 *China Soft*

- Science*. **2** 1 (in Chinese) [张娜, 米倩玉, 邓嘉伟, 赵晓军 2024 中国软科学 **2** 1]
- [3] Soni A, Bhamu K, Sahariya J 2020 *J. Alloys Compd.* **817** 152758
- [4] Maho A, Lobet M, Daem N, Piron P, Spronck G, Loicq J, Cloots R, Colson P, Henrist C, Dewalque J 2021 *ACS Appl. Energy Mater.* **4** 1108
- [5] Wang Y D, Duan J L, Yang X Y, Liu L Q, Zhao L L, Tang Q W 2020 *Nano Energy* **69** 104418
- [6] Brenner T M, Egger D A, Kronik L, Hodes G, Cahen D 2016 *Nat. Rev. Mater.* **1** 15007
- [7] Miyata A, Mitiglu A, Plochocka P, Portugall O, Wang J, Stranks S, Snaith H, Nicholas R 2015 *Nat. Phys.* **11** 582
- [8] Song Z N, McElvany C, Phillips A, Celik I, Krantz P, Watthage S, Liyanage G, Apul D, Heben M 2017 *Energy Environ. Sci.* **10** 1297
- [9] Kim Y, Cho H, Heo J, Kim T, Myoung N, Lee C, Im S, Lee T 2015 *Adv. Mater.* **27** 1248
- [10] Dou L T, Yang Y, You J B, Hong Z R, Chang W H, Li G, Yang Y 2014 *Nat. Commun.* **5** 5404
- [11] Kojima A, Teshima K, Shira Y, Miyasaka T 2009 *J. Am. Chem. Soc.* **131** 6050
- [12] Bhavsar K, Lapsiwala P 2021 *Semicond. Phys. Quantum Electron. Optoelectron* **24** 341
- [13] Hossain M, Toki G, Alam I, Pandey R, Samajdar D, Rahman M, Islam M, Bencherif M, Madan J, Mohammed M 2023 *New J. Chem.* **47** 4801
- [14] Gatti T, Menna E, Meneghetti M, Maggini M, Petrozza A, Lamberti F 2017 *Nano Energy* **41** 84
- [15] Mustafa G M, Younas B, Saba S, Elqahtani Z B, Alwadaid N, Aftab S 2024 *RSC advances* **14** 18957
- [16] Uddin M, Mashud M, Toki G, Pandey R, Zulficar M, Saidani O, Chandran K, Ouladsmame M, Hossain M 2024 *J. Opt.* **53** 3726
- [17] Burgelman M, Nollet P, Degraeve S 2000 *Thin Solid Films* **361–362** 527
- [18] Singh A, Srivastava S, Mahapatra A, Baral J, Pradhan B 2021 *Opt. Mater.* **117** 111193
- [19] Hao L S, Li T, Ma X X, Wu J, Qiao L X, Wu X F, Hou G Y, Pei H N, Wang X B, Zhang X Y 2021 *Opt. Quant. Electron.* **53** 524
- [20] Rai S, Pandey B, Dwivedi D 2020 *Opt. Mater.* **100** 109631
- [21] Hossain M, Arnab A, Das R, Hossain K, Rubel M, Rahman M, Bencherif H, Emeter M, Mohammed M, Pandey R 2022 *RSC Adv.* **12** 35002
- [22] Amjad A, Qamar S, Zhao C C, Fatima K, Sultan M, Akhter Z 2023 *RSC Adv.* **13** 23211
- [23] Ahmad W, Noman M, Jan S, Khan A 2023 *Royal Soc. Open Sci.* **10** 211127
- [24] Schulte L, White W, Renna L, Ardo S 2021 *Joule* **5** 2380
- [25] ASiddique A, Helal S, Haque M 2024 *J. Ovonic Res.* **20** 187
- [26] Subudhi P, Punetha D 2023 *Sci. Rep.* **13** 19485
- [27] Jayan K D, Sebastian V, Kurian J 2021 *Solar Energy* **221** 99
- [28] Mohandes A, Moradi M, Nadgaran H 2021 *Opt. Quant. Electron.* **53** 319
- [29] Salah M, Abouelatta M, Shaker A, Hassan K, Saeed A 2019 *Semicond. Sci. Tech.* **34** 115009

Numerical simulation and comparative theoretical analysis of performance optimization for perovskite solar cells based on SCAPS-1D*

LI Shiwen¹⁾ ZHOU Bao^{1)†} ZHAO Qirong¹⁾ YANG Xiaobo²⁾
 XIE Zaixin¹⁾ DUAN Zhuoqi¹⁾ ZHAO Enming¹⁾ HU Yongmao¹⁾

¹⁾ (School of Engineering, Dali University, Dali 671000, China)

²⁾ (Kunming University of Science and Technology, Kunming 650500, China)

(Received 13 March 2025; revised manuscript received 30 April 2025)

Abstract

Perovskite solar cells have become a research hotspot in the photovoltaic field due to their excellent photoelectric performance and low-cost preparation processes. However, the environmental toxicity of traditional lead-containing perovskite materials and the optimization of device performance encounter key problems that limit their commercial applications. Numerical simulation methods provide an efficient and cost-effective approach for optimizing perovskite solar cell devices, allowing for rapid material screening and structural parameter optimization, thereby reducing experimental trial-and-error costs.

Based on SCAPS-1D, this work systematically investigates the performance of solar cells with the structure FTO/SnO₂/perovskite layer/Cu₂O/Au by using numerical simulation. Seven different lead-free and lead-containing perovskite materials are selected as the light-absorbing layer. By the comparative analysis of their photoelectric characteristics, this work explores the influences of perovskite layer thickness, electron transport layer thickness, hole transport layer thickness, interface defect state density, and carrier concentration on device performance. Furthermore, temperature testing and J - V and QE curve analyses are conducted on the optimized perovskite solar cells. The results indicate that excessive thickness of the perovskite layer increases carrier recombination rate, thereby reducing cell efficiency. The optimized Cs₂PtI₆-based perovskite solar cell exhibits the best performance, with a power conversion efficiency of 27.95%, which is much higher than those of other lead-free and some lead-containing perovskite devices. Under extreme temperature conditions of 600 K, the PCE of Cs₂PtI₆ remains around 50% of its value at room temperature (300 K). This study reveals the influences of different perovskite materials and device parameters on photovoltaic performance through systematic numerical simulation analysis, providing a theoretical basis for designing efficient and stable perovskite solar cells.

Keywords: perovskite solar cells, numerical simulation, parameter optimization, SCAPS

PACS: 77.84.Bw, 88.40.H-, 88.40.hj

DOI: 10.7498/aps.74.20250335

CSTR: 32037.14.aps.74.20250335

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12364025, 62065001) and the Yunnan Provincial Reserve Talents Project for Young and Middle-Aged Academic and Technical Leaders, China (Grant No. 202205AC160001).

† Corresponding author. E-mail: bzhou3@163.com



基于SCAPS-1D的钙钛矿太阳能电池性能的数值模拟与性能优化比较理论分析

李诗文 周豹 赵启融 杨小波 谢再新 段卓琦 赵恩铭 胡永茂

Numerical simulation and comparative theoretical analysis of performance optimization for perovskite solar cells based on SCAPS-1D

LI Shiwen ZHOU Bao ZHAO Qirong YANG Xiaobo XIE Zaixin DUAN Zhuoqi ZHAO Enming HU Yongmao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 127701 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250335

CSTR: 32037.14.aps.74.20250335

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250335>

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

基于双修饰策略制备高性能反式钙钛矿太阳能电池

Fabrication of high-performance inverted perovskite solar cells based on dual modification strategy

物理学报. 2024, 73(24): 248401 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20241238>

聚偏氟乙烯添加剂提高CsPbBr₃钙钛矿太阳能电池性能

Improvement of performance of CsPbBr₃ perovskite solar cells by polyvinylidene fluoride additive

物理学报. 2023, 72(16): 168101 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230636>

新型空间太阳能电池用的钙钛矿薄膜与器件的电子辐照效应

Effect of electron irradiation on perovskite films and devices for novel space solar cells

物理学报. 2024, 73(3): 036102 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231568>

甲脒碘化铅单晶基钙钛矿太阳能电池的研究

High performance perovskite solar cells synthesized by dissolving FAPbI₃ single crystal

物理学报. 2023, 72(1): 018801 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221461>

钙钛矿太阳能电池中缺陷及其钝化策略研究进展

Progress of defect and defect passivation in perovskite solar cells

物理学报. 2022, 71(16): 166801 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220359>

BaTiO₃掺杂调控内建电场提升钙钛矿太阳能电池性能

Improvement of performance of perovskite solar cells through BaTiO₃ doping regulated built-in electric field

物理学报. 2024, 73(3): 038801 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231139>