

固态染料敏化太阳能电池的模拟研究

程友良^{1,2}, 张忠宝^{1,2}

(1.华北电力大学动力工程系, 河北 保定 071003; 2.华北电力大学河北省低碳高效发电技术重点实验室, 河北 保定 071003)

摘 要:为解决染料敏化太阳能电池(DSSC)液态电解质有机溶剂易挥发、稳定性差、易泄漏等问题,采用固态电解质取代液态电解质,增强 DSSC 的稳定性和耐用性。基于 SCAPS-1D 软件建立了以 ZnO、PEDOT:PSS 分别为电子传输层和空穴传输层、N719 为光敏层的固态 DSSC 结构,主要研究了电池各层厚度、工作温度、串并联电阻、背接触金属类型对 DSSC 光电参数的影响。结果表明:随着光敏层厚度增大,电池性能显著提高,继续增加厚度时,开路电压(V_{oc})、短路电流密度(J_{sc})和光电转换效率(PCE)增长速率变慢,光敏层的最佳厚度为 500 nm;工作温度升高, V_{oc} 、 J_{sc} 、PCE 逐渐下降,在 300 K 时有最高 PCE 为 15.17%;串联电阻(R_s)和并联电阻(R_{sh})对电池性能有重要影响, R_s 增加对 V_{oc} 和 J_{sc} 变化较小,但 PCE 和填充因子(FF)显著下降, R_s 应尽量小, R_{sh} 增加对 J_{sc} 几乎无影响, V_{oc} 和 FF 得到改善,PCE 提高, R_{sh} 应尽可能高;背接触金属功函数值增大,光电性能得到增强,当背接触金属为 Au 时 PCE 最高。该工作为提高固态 DSSC 的光电性能提供了理论指导,有助于固态 DSSC 的进一步发展。

关键词:染料敏化太阳能电池;固态电解质;SCAPS-1D;串并联电阻;背接触金属;光电转换效率

中图分类号: TM914.4+2 文献标志码: A 文章编号: 0454-5648(2025)04-0948-10

网络出版时间: 2025-02-19



染料敏化太阳能电池(DSSC)是一种将太阳能转化为电能的光伏器件,因其低成本、重量轻、原材料丰富等优势,DSSC 成为具有广泛适用性的其他太阳能电池的可行替代品^[1]。DSSC 中常用的电解质为液态电解质,三碘离子和碘离子是常用的液态电解质氧化还原电子对,其具有电子交换速率快、与电子复合速率慢等优点。然而,液态电解质对可见光的吸收能力有限,并且具有一定的腐蚀性,这些因素被认为是影响 DSSC 长期使用的主要障碍^[2]。固态电解质由于能克服传统液态电解质有机溶剂易挥发、稳定性差、易泄漏等问题而备受关注^[3-4]。在 DSSC 中引入固态电解质后,显著提升了其稳定性,这一改进不仅简化了制造过程,还结合了更高的耐用性和潜在的效率,从而提升了设备的整体性能^[5]。此外,固态 DSSC 的可扩展性和多功能性使其在商业和住宅设施中都具有潜在的开发和应用价值。

理论模拟已渗透在电池设计和生产过程中,为复杂太阳能电池的分析提供了有价值的见解,提升了实验数据的准确性,并节省了时间和制造成本。

SCAPS-1D 是一个广泛使用的光伏器件模拟工具,可用于分析固态染料敏化太阳能电池的光学性能。Ojotu 等^[6]利用 SCAPS-1D 软件对聚 3-己基噻吩(P3HT)为电解质的 DSSC 进行建模分析,优化器件设置后的光电转换效率为 4.90%。Noorasod 等^[7]使用 SCAPS-1D 软件对由 CuI 组成的固态 DSSC 建模分析,由于电解质厚度较低,设计的有背接触的器件比没有背接触的器件性能更好。Song 等^[8]利用聚(3,4-乙烯二氧噻吩)-聚苯乙烯磺酸(PEDOT:PSS)与 Au 纳米结构结合,电学特性、光吸收和稳定性得到增强,获得的最高光电转换效率为 19.20%,证明其 PEDOT:PSS 适合用作空穴传输层。Korir 等^[9]利用 SCAPS-1D 软件开发了固态电解质组成的 DSSC,优化了 PC₆₁BM 作为光阳极的性能参数,光电转换效率达到了 5.38%。Shum 等^[10]以 TiO₂ 为电子传输层、N719 为光敏层的 DSSC 的光电转换效率为 8.50%。然而,TiO₂ 具有电子迁移率低、电导率低等缺点,而且由于长时间的紫外线照射和氧空位的存在,TiO₂ 材料会随着时间的推移而降解,从而导致 TiO₂ 结构和晶体质量,阻碍电子的有效传输,影响电池

收稿日期: 2024-09-19。 修订日期: 2024-12-24。

基金项目: 保定市科技计划基础研究专项(2372P014)。

第一作者: 程友良(1963—),男,博士,教授。

Received date: 2024-09-19. Revised date: 2024-12-24.

First author: CHENG Youliang (1963—), male, Professor.

E-mail: ylcheng@ncepu.edu.cn

的电流输出^[11-12]。ZnO 材料因其具有高电子迁移率和透明度而被用作 TiO₂ 的替代品, 同时它是一种低成本的宽带隙半导体材料^[12]。

本工作采用 ZnO、PEDOT:PSS 分别为电子传输层和空穴传输层, N719 为光敏层, 基于 SCAPS-1D 软件建立了氟掺杂氧化锡 (FTO)/ZnO/N719/PEDOT:PSS/Au 的固态染料敏化太阳能电池结构。研究电池各层厚度、工作温度、串并联电阻、背接触金属类型对 DSSC 电流密度-电压(J - V)、开路电压(V_{oc})、短路电流密度(J_{sc})、填充因子(FF)、光电转换效率(PCE)的影响。

1 物理模型与材料参数

SCAPS-1D 是由比利时根特大学 Marc Burgelman 教授及其同事在电子和信息系统 (ELIS) 系开发的一维太阳能电池数值模拟软件^[13]。SCAPS-1D 已被证明是利用异质结技术模拟薄膜光伏组件电性能的强大工具, 图 1a 为软件模拟的基本步骤。所研究的固态 DSSC 器件结构为 FTO/ZnO/N719/PEDOT:PSS/Au, 如图 1b 所示。采用 AM1.5G 太阳光谱在 300 K 温度下对器件建模, 入射光功率为 100 mW/cm²。

SCAPS-1D 程序通过 Gummel-type 迭代和 Newton-Raphson 微分方法求解一维半导体方程, 从而有效地计算所设计的太阳能电池的性能参数。涉及的半导体方程为: 式(1)为 Poisson 方程, 式(2)和式(3)分别为电子、空穴连续性方程, 式(4)和式(5)分别

为电子、空穴漂移扩散方程。

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} = \frac{q}{\epsilon_0\epsilon_r} [p(x) - n(x) + N_d - N_a + \rho_p - \rho_n] \quad (1)$$

$$\frac{dJ_n}{dx} = G - R \quad (2)$$

$$\frac{dJ_p}{dx} = G - R \quad (3)$$

$$J_n = D_n \frac{dn}{dx} + \mu_n n \frac{d\Phi}{dx} \quad (4)$$

$$J_p = D_p \frac{dp}{dx} + \mu_p p \frac{d\Phi}{dx} \quad (5)$$

式中: Φ 为静电场; ϵ_0 为真空介电常数; ϵ_r 为相对介电常数; q 为电子电荷; $p(x)$ 和 $n(x)$ 分别为空穴和电子浓度; N_d 和 N_a 分别为供体和受体电离浓度; ρ_p 和 ρ_n 分别为空穴和电子分布密度; J_n 和 J_p 分别为电子和空穴的电流密度; D_n 和 D_p 分别为电子和空穴扩散系数; μ_n 和 μ_p 分别为电子和空穴迁移率; G 为载流子生成速率; R 为载流子重组速率。

采用控制变量法对电池参数进行模拟, DSSC 各层的材料参数如表 1 所示^[14-23], 部分参数采用软件默认数值。其中, SCAPS-1D 计算机给出了重组模型, 该模型包括俄歇重组、辐射重组和肖克利-里德-霍尔重组(SRH)。在 DSSC 中, SRH 重组模式占主导地位, 它通常发生在电子被困在电池禁止区域的能量状态时。因此材料缺陷设置为中性缺陷, 使该缺陷导致 SRH 复合而不产生空间电荷。此外, 电子和空穴热速率为 $1 \times 10^7 \text{ cm} \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ 。

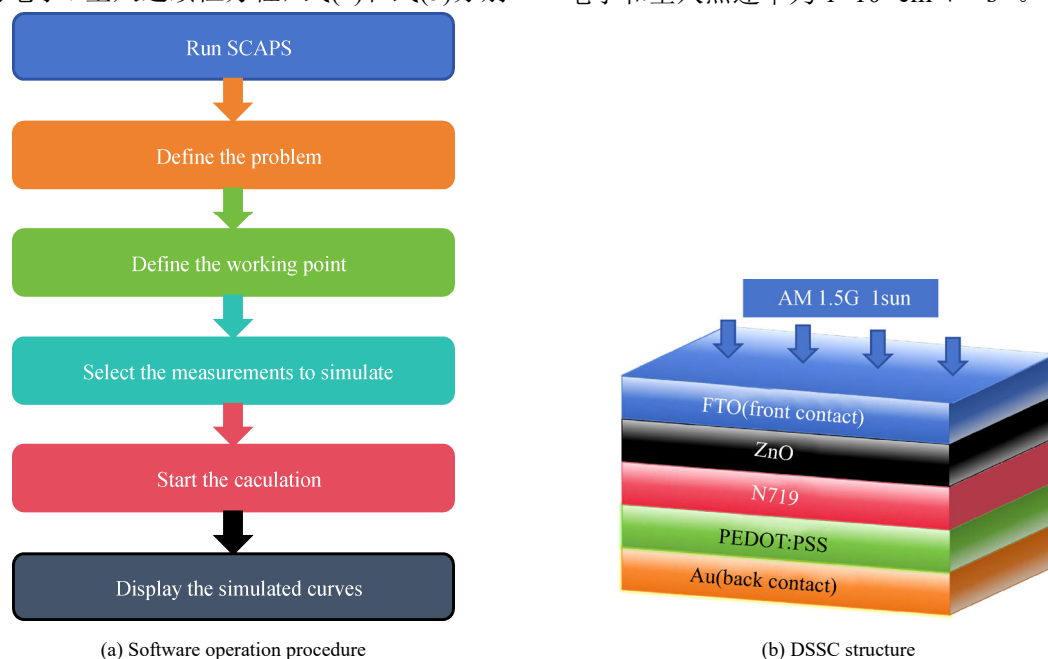


图 1 SCAPS-1D 模拟的基本步骤及固态 DSSC 器件结构
Fig. 1 Basic steps of SCAPS-1D simulation and solid state dye-sensitized solar cell (DSSC) device structure

表 1 模拟中 DSSC 各层的材料参数

Table 1 Material parameters of each layer of DSSC in simulation

Layer	Thickness/ nm	Band gap/eV	Affinity/ eV	Permittivity	Effective conduction band density/cm ⁻³	Effective valence band density/cm ⁻³	Electron mobility/ (cm ² ·V ⁻¹ ·s ⁻¹)	Hole mobility/ (cm ² ·V ⁻¹ ·s ⁻¹)	Donor doping concentration/ cm ⁻³	Acceptor doping concentration/ cm ⁻³	Defect density/ cm ⁻³
ZnO ^[14–17]	0.01	3.2	4.21	9	2.2×10^{18}	1.8×10^{19}	100	25	1.0×10^{18}	0	1.0×10^{14}
N719 ^[18–20]	0.20	1.6	3.9	30	2.4×10^{20}	2.5×10^{20}	5	5	0	1.0×10^{17}	1.0×10^{14}
PEDOT: PSS ^[21–23]	0.10	1.5	3.4	3	1.7×10^{19}	2.5×10^{21}	100	4	0	1.0×10^{18}	1.0×10^9

2 结果与讨论

2.1 模型验证

为验证模型程序的准确性，对文献[19]中的 FTO/TiO₂/N719/PEDOT:PSS/Au 结构进行建模，通过求解上述模型方程并代入文献中的材料参数，模拟得到了对应的 J - V 曲线。图 2 为模拟结果与文献数据的对比图。由图 2 可见，模拟结果与文献数据非常接近，最大误差为 0.013，在可接受的范围内，证明了模型的准确性。

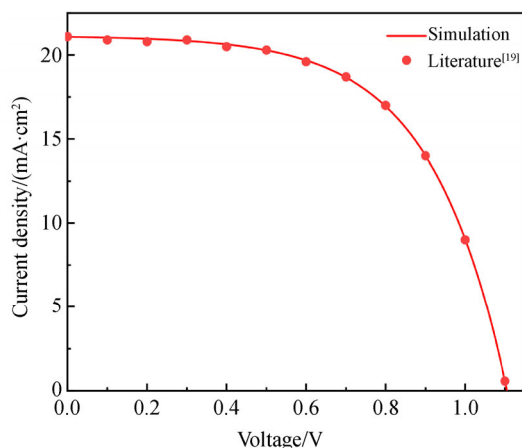


图 2 模拟结果与文献数据的对比

Fig. 2 Comparison between simulation results and literature data

2.2 电池层厚度对 DSSC 光电性能的影响

染料的主要功能是吸收光子并产生电子，其厚度对 DSSC 光电转化效率有着重要影响，将 N719 层厚度从 100 nm 变化至 1000 nm，保持其他参数不变，研究其如何影响器件光电参数。图 3a~图 3d 为 V_{oc} 、 J_{sc} 、FF、PCE 随 N719 层厚度变化，当 N719 层厚度从 100 nm 增加到 500 nm 时， V_{oc} 、 J_{sc} 、PCE 均显著增加，这是因为染料厚度增加时，染料吸收更多的光，染料受光激发产生的电子-空穴对增多，光电参数提高。随着 N719 层厚度从 500 nm 增加到 1000 nm，载流子到达电极的时间变长，且载流子的

扩散速率和生成速率都相应地降低，同时电荷复合变多，导致 V_{oc} 和 J_{sc} 增长缓慢。当 N719 层厚度为 1000 nm 时，最大的 V_{oc} 和 J_{sc} 分别为 0.896 V 和 23.97 mA/cm²。然而，当 N719 层厚度从 100 nm 增加至 1000 nm 时，FF 先降低后升高。从 100 nm 时的 0.782 下降到 300 nm 时的 0.731，继续增加 N719 层厚度至 1000 nm，FF 升高到 0.768。这是因为初期染料厚度增加时光的吸收效率和电荷传输效率之间的不平衡，导致 FF 下降，当厚度增加到一定程度后，优化的光吸收和电荷传输路径可能会改善 FF，使其回升。因此，考虑到制造成本和效率等因素，N719 层的最佳厚度为 500 nm。

电子传输层和空穴传输层是促进电子和空穴从染料层向电极提取和传输的关键组成部分，其性能主要取决于二者的厚度。ZnO 和 PEDOT:PSS 具有较好的光学和电学特性，在一定程度上可以提高电极上电荷的传输和收集效率，故选择这 2 种材料分别作为电子传输层和空穴传输层。研究了 ZnO 层的厚度从 10 nm 变化至 50 nm，其光电参数的影响如图 4a 所示。ZnO 厚度增加时， V_{oc} 下降，表明电子传输层厚度增加时增大了电子在传输过程中的复合几率，使暗电流和表面电流增大，导致 V_{oc} 的下降^[24]。 J_{sc} 先升高后降低，这是因为初期厚度增加提高了光子的吸收量，使得 J_{sc} 呈现增大的趋势，继续增加厚度时，光子的吸收达到了饱和以及电荷的传输效率降低，导致 J_{sc} 减少。FF 显著提高，从 0.739 升高到 0.755。PCE 先升高后降低，当 ZnO 层厚度为 20 nm 时，PCE 最高。

为分析空穴传输层 PEDOT:PSS 对 DSSC 的光电性能影响，模拟该层厚度从 50 nm 变化至 100 nm，其结果如图 4b 所示。随着 PEDOT:PSS 层厚度增大， V_{oc} 、 J_{sc} 、PCE 均呈增大趋势，其中 V_{oc} 从 0.875 V 升高到 0.876 V， J_{sc} 从 21.35 mA/cm² 升高到 21.80 mA/cm²，PCE 从 14.29% 提升到了 14.60%。厚度增加提高了 PEDOT:PSS 层的电荷分离能力和传输效率，提供了更稳定的电荷载体，同时减少了

电荷的复合。然而,随着空穴传输层厚度的增大,FF 降低,表明电解质厚度增加可能导致电荷传输路径变长,增加了电荷传输过程中的电阻,因为电阻引起的能量损失较大,从而 FF 降低。所以在优化

固态染料敏化太阳能电池时,需要平衡电解质厚度、开路电压、短路电流密度以及填充因子之间的关系,为获得较好的电池性能,PEDOT:PSS 层最佳厚度为 100 nm。

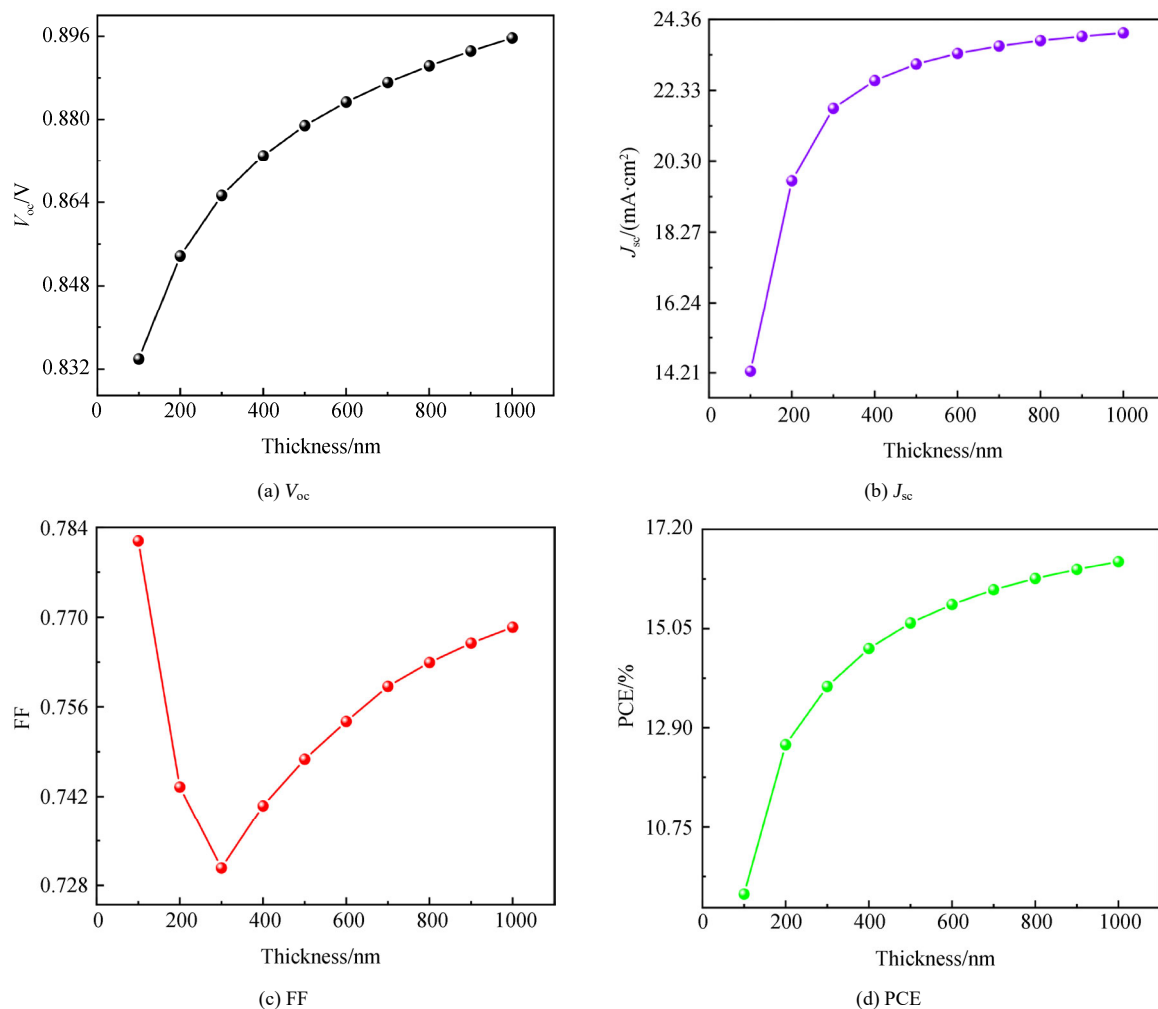


图 3 不同 N719 层厚度对 V_{oc} 、 J_{sc} 、FF、PCE 的影响

Fig. 3 Influence of thickness of different N719 layers on open circuit voltage (V_{oc}), short-circuit current density (J_{sc}), fill factor (FF), photoelectric conversion efficiency (PCE)

2.3 温度对 DSSC 光电性能的影响

固态染料敏化太阳能电池中材料的导电性、介电常数和其他电学性质会随温度变化而变化,从而进一步影响 DSSC 的光电转化效率和稳定性。研究温度对固态染料敏化太阳能电池的影响,有助于开发适应不同环境的太阳能电池,帮助优化电池的设计,提高其在实际应用中的表现和耐久性。为了解温度对太阳能电池光电参数的影响,在 AM1.5G 的照明下,模拟了 300~360 K 区间内温度对 V_{oc} 、 J_{sc} 、FF、PCE 的变化,模拟结果如图 5 所示。

图 5a 中 DSSC 的 V_{oc} 随温度升高逐渐降低,从 300 K 时的 0.879 V 下降到 360 K 时的 0.827 V,

温度的升高使激子热能增加,载流子输运增强,内置电压降低,同时温度升高使材料带隙变窄,在界面和层内加速了电荷复合,导致 V_{oc} 减少。然而,随着温度升高 J_{sc} 逐渐增大,图 5b 中温度从 300 K 变化到 360 K 时, J_{sc} 从 23.08 mA/cm^2 升高到 23.27 mA/cm^2 。材料带隙变窄增强了载流子迁移率,有更多载流子从价带向导带移动,产生更多的光电流,导致 J_{sc} 增大。图 5c 和图 5d 展示了 FF 和 PCE 随温度的变化。温度升高时二者均降低,FF 从 0.748 下降到 0.732, PCE 从 15.17% 下降到 14.08%。这是因为温度升高加速了 DSSC 的降解,如染料降解、电解质分解等,从而改变了

DSSC 材料的光学特性,如染料吸收光谱和载流子传输,导致 FF 和 PCE 降低。同时温度升高时反向饱和电流增加,而 V_{oc} 与反向饱和电流成反比,导致 FF 和 PCE 降低^[25]。综上,温度对固态染料

敏化太阳能电池的影响涉及材料性质、电池稳定性等多个方面,对温度管理可以提高 DSSC 的整体性能和寿命。在 DSSC 的工作温度为 300 K 时,电池性能达到最佳。

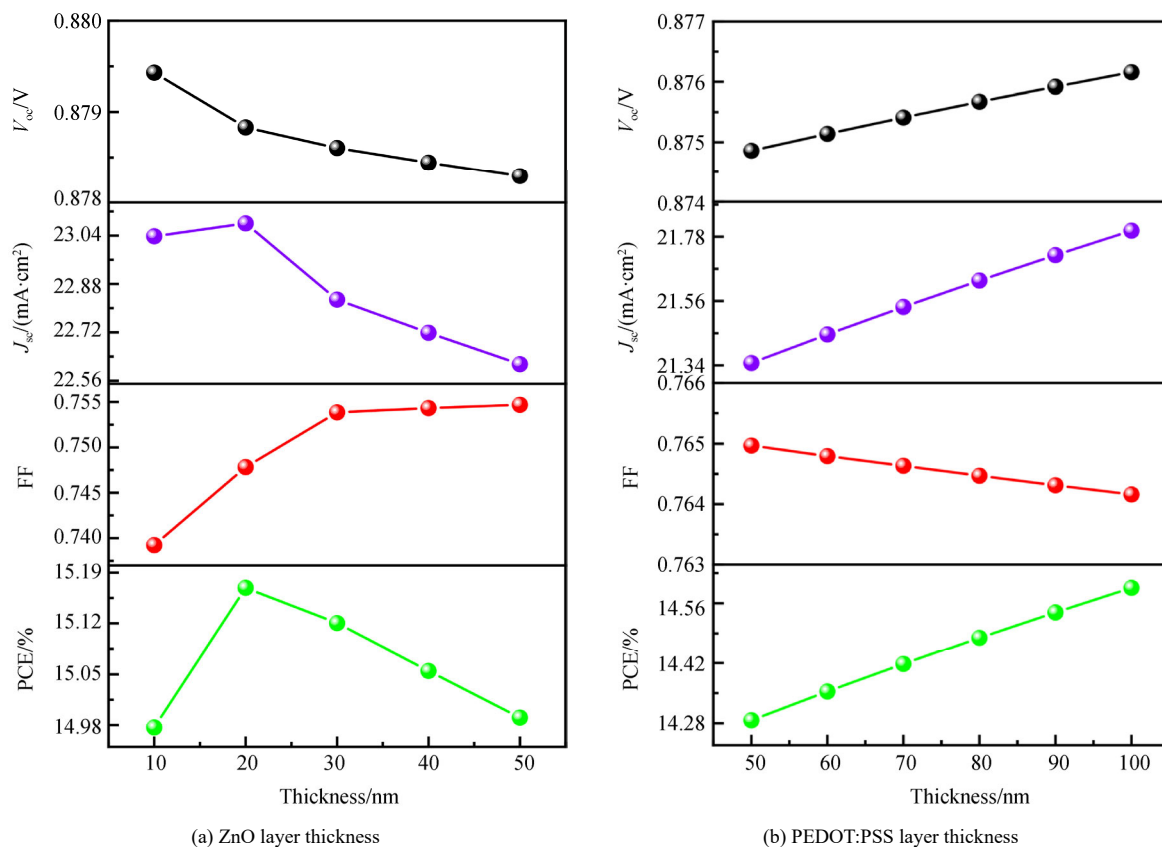


图 4 不同 ZnO 层厚度和不同 PEDOT:PSS 层厚度对 V_{oc} 、 J_{sc} 、FF、PCE 的影响
Fig. 4 Effects of different thickness of ZnO layer and PEDOT:PSS layer on V_{oc} , J_{sc} , FF and PCE

2.4 串、并联电阻对 DSSC 光电性能的影响

了解电阻对电池性能的影响,可以帮助设计更高效的电池结构。DSSC 的电阻由串联电阻(R_s)和并联电阻(R_{sh})组成, R_s 为串联电阻的总和,包括 TCO 衬底、电极材料、界面和金属背接触电阻, R_s 增大会导致电压和功率的下降,最小化串联电阻对于提高 DSSC 效率至关重要。 R_{sh} 主要与载流子复合损失有关,即电流损失, R_{sh} 增大会更有交流电流路径和更优越的电池性能。因此,在实际生产中,通过研究 R_s 和 R_{sh} 对 DSSC 的影响是非常必要的。

R_s 对 DSSC 光电性能的影响如图 6 所示,改变 R_s 值从 0~5 $\Omega \cdot cm^2$ 之间变化研究其对 $J-V$ 、 V_{oc} 、 J_{sc} 、FF、PCE 的影响。 R_s 是由 $J-V$ 曲线电压端的斜率测量的,如图 6a 所示,当 R_s 增加时, $J-V$ 曲线下降。 R_s 增加对 V_{oc} 变化较小,因为 V_{oc} 为 DSSC 在没有外部负载情况下的电压,主要由半导体材料能级差以及电荷转移过程决定,较少受 R_s 的影响。当 R_s 从 0

变化至 5 $\Omega \cdot cm^2$ 时, J_{sc} 下降较少, FF 和 PCE 显著下降, J_{sc} 从 23.08 mA/cm^2 下降到 22.87 mA/cm^2 , FF 从 0.748 下降到 0.653, PCE 从 15.17% 降低至 13.13% (图 6b)。主要原因是 R_s 增加限制了电路中的电流流动,电压损失增加,电池整体效率下降。一般地, R_s 取决于电解质中离子的扩散电阻、后接触金属触点和电解质界面的电荷转移电阻等^[26]。因此 R_s 值应尽可能低,减少 DSSC 内部对电流的阻力,提高光电转化效率。

图 7 为 R_{sh} 对 DSSC 光电性能的影响, R_{sh} 值从 200~1000 $\Omega \cdot cm^2$ 变化,分析其对 $J-V$ 、 V_{oc} 、 J_{sc} 、FF、PCE 的影响。结果表明,增大 R_{sh} 改善了 DSSC 的 $J-V$ 曲线,因为 R_{sh} 由 $J-V$ 曲线电流端的斜率测量。然而 J_{sc} 几乎不变, V_{oc} 、FF、PCE 均增加。 R_{sh} 由 200 $\Omega \cdot cm^2$ 升高至 1000 $\Omega \cdot cm^2$ 时, V_{oc} 从 0.867 V 升高到 0.877 V, FF 从 0.622 上升到 0.723, PCE 从 12.45% 提高到 14.62%。增加 R_{sh} 减少了电池中电荷

的复合损耗和泄漏电流, 提高了光电转化效率。DSSC 的组成材料、结构及制造方法等因素都会影

响器件的 R_{sh} , 较低的分流电阻会有更多的分流路径, 降低光电转化效率, 因此 R_{sh} 值应尽可能高。

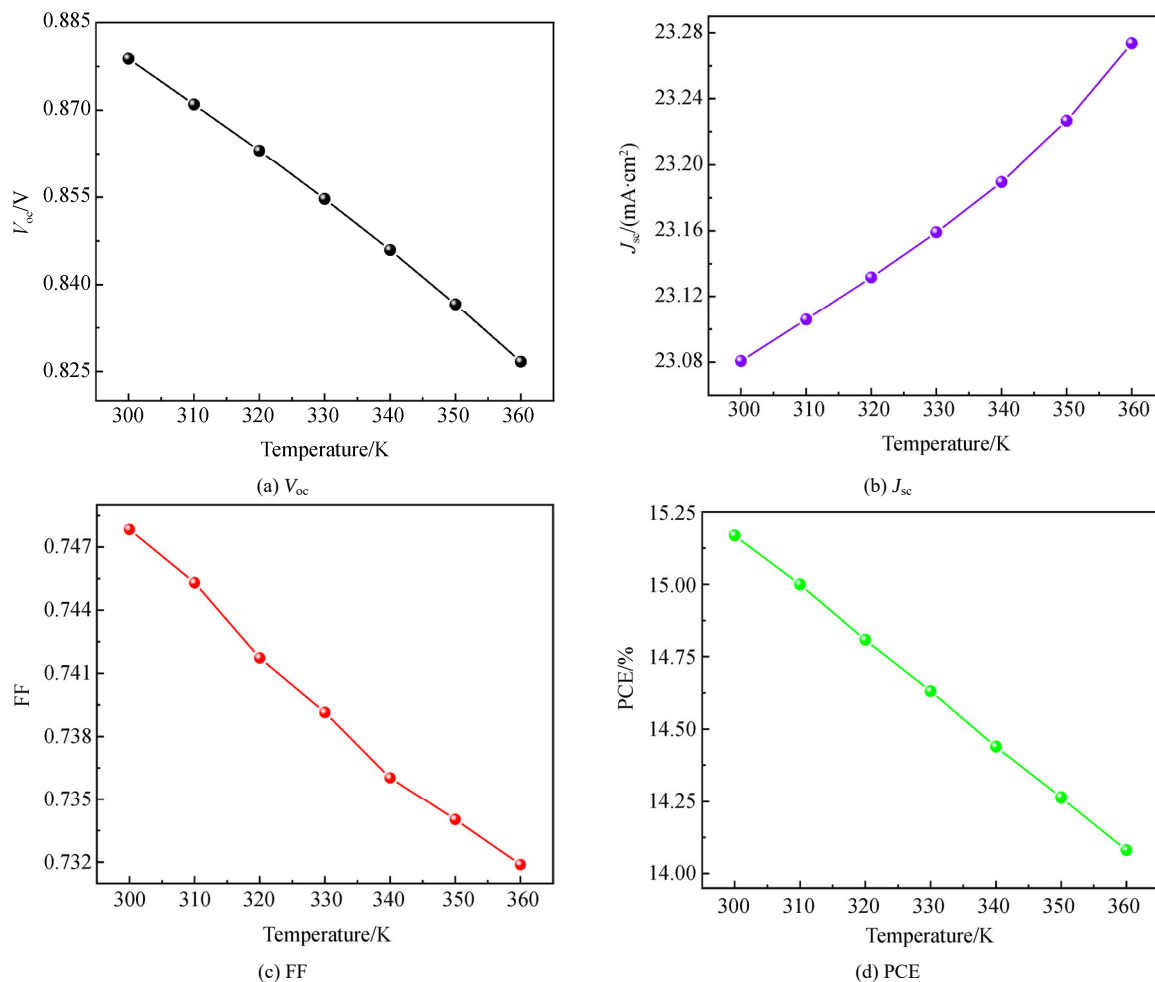


图 5 不同温度对 V_{oc} 、 J_{sc} 、FF、PCE 的影响

Fig. 5 Effects of different temperatures on V_{oc} , J_{sc} , FF and PCE

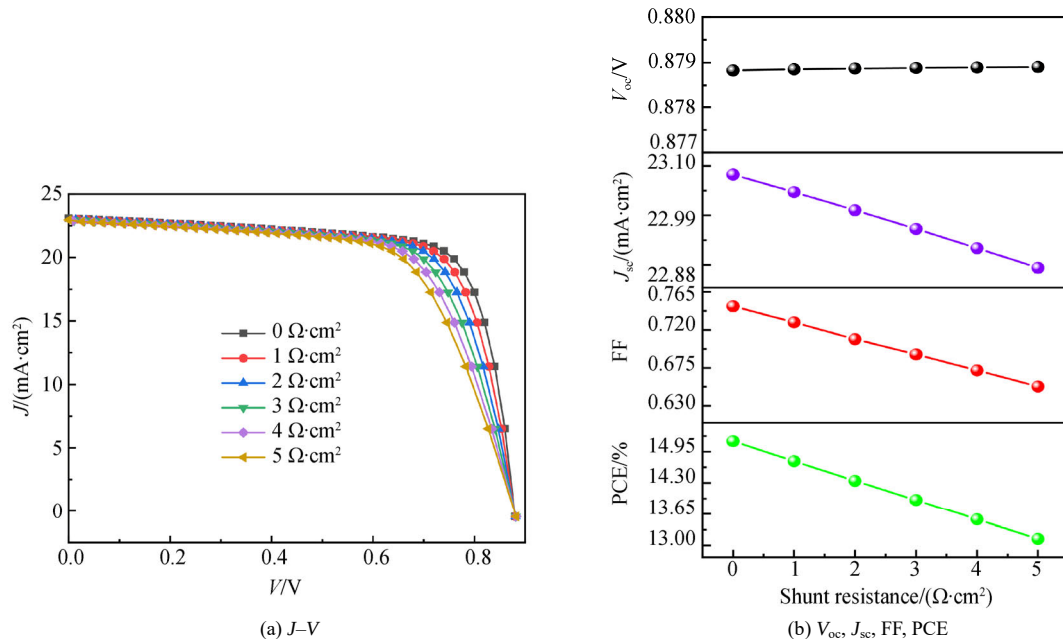
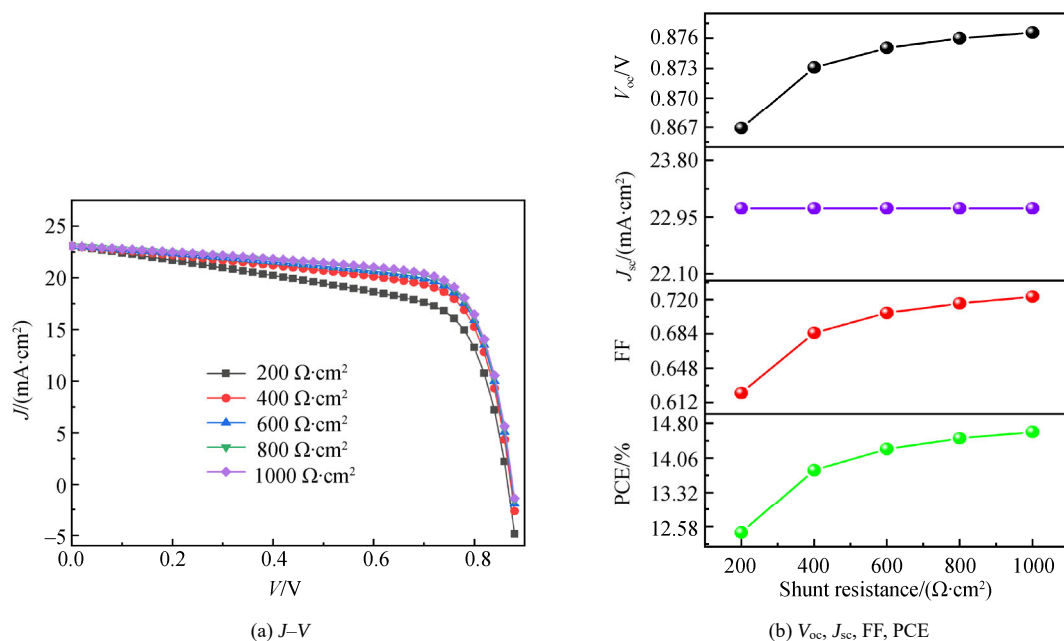


图 6 不同 R_s 对 $J-V$ 、 V_{oc} 、 J_{sc} 、FF、PCE 的影响

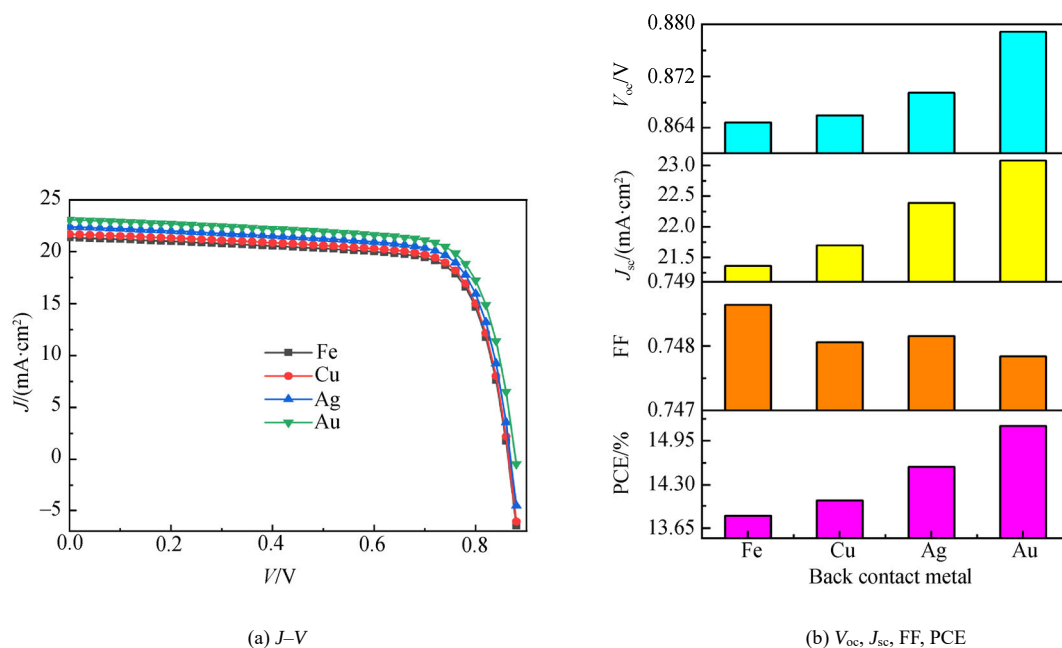
Fig. 6 Influence of different series resistance (R_s) on current density-voltage ($J-V$), V_{oc} , J_{sc} , FF and PCE

图7 不同 R_{sh} 对 J - V 、 V_{oc} 、 J_{sc} 、FF、PCE 的影响Fig. 7 Influence of different shunt resistance (R_{sh}) on J - V , V_{oc} , J_{sc} , FF and PCE

2.5 背接触金属对 DSSC 光电性能的影响

背接触点的电学性能在 DSSC 的光电转化中起到重要的作用, 负责在外部电路中传导载流子。背接触金属功函数是将电子从金属表面移动到真空中所需的最小能量, 功函数值增加可以提高光伏电池的效率, 这是因为大多数载流子的势垒高度随功函数值增加而降低, 从而形成欧姆接触^[27]。通过改变背接触金属类型研究对 DSSC 光电性能的影响,

模拟材料有 Fe、Cu、Ag、Au, 其功函数值分别为 4.50、4.65、4.70、5.10 eV。图 8 为 4 种背接触金属对 J - V 、 V_{oc} 、 J_{sc} 、FF、PCE 的影响。由图 8 可见, 当功函数值增加时, J - V 、 V_{oc} 、 J_{sc} 、PCE 均提高, V_{oc} 从 0.865 V 升高到 0.879 V, J_{sc} 从 21.36 mA/cm^2 升高到 23.08 mA/cm^2 , PCE 从 13.83% 提高到 15.17%。这是因为功函数值增加时, 电导率提高, 提升了电荷收集效率, 同时改善电荷转移

图8 不同背接触金属对 J - V 、 V_{oc} 、 J_{sc} 、FF、PCE 的影响Fig. 8 Effects of different back contact metals on J - V , V_{oc} , J_{sc} , FF, PCE

效率和稳定性, 优化能级对齐。而 FF 的值先降低后升高再降低, 这可能与多种因素有关, 如背接触金属与 PEDOT:PSS 界面反应、金属的电导率和化学性质稳定性、界面接触质量等, 导致不同背接触金属对 DSSC 的 FF 影响不同。综上, 研究背接触金属有助于优化 DSSC 的电荷收集与传输、提高电池稳定性及兼容性, 并在材料选择和制造成本中找到平衡。通过 J - V 曲线和光电参数分析, Au 是更合适的背接触金属。

3 结论

对 FTO/ZnO/N719/PEDOT:PSS/Au 组成的固态染料敏化太阳能电池进行模拟, 研究了电池层厚度、工作温度、串并联电阻、背接触金属类型对 DSSC 光电性能的影响, 模拟结果的分析结论为:

1) N719 层厚度从 100 nm 增加至 500 nm, V_{oc} 、 J_{sc} 、PCE 均显著增加, 厚度继续增加至 1000 nm, 参数值增长缓慢, 而 FF 随着 N719 层厚度增加先降低后升高, 考虑制造成本及效率等因素, 光敏层最佳厚度为 500 nm; ZnO 层厚度增加时, V_{oc} 下降, J_{sc} 先升高后降低, FF 提高, PCE 先升高后降低, 当厚度为 20 nm 时, 有最高 PCE 为 15.17%; PEDOT:PSS 层厚度增加时, V_{oc} 、 J_{sc} 、PCE 均增加, FF 减少;

2) 温度从 300~360 K 变化时, V_{oc} 、FF 和 PCE 呈逐渐下降的趋势, 而 J_{sc} 随温度的升高而升高, 在 300 K 时有最高光电转化效率为 15.17%;

3) DSSC 器件的 R_s 增加时, V_{oc} 和 J_{sc} 变化较小, FF 和 PCE 显著下降, 同时 J - V 曲线下降, R_s 值应尽可能低; R_{sh} 增加时, J_{sc} 几乎不变, V_{oc} 、FF、PCE 和 J - V 均得到改善, 因此 R_{sh} 值应尽可能高;

4) 背接触金属功函数值增加时, V_{oc} 、 J_{sc} 、PCE 均增加, FF 先降低后升高再降低, 当背接触金属材料为 Au 时有最高光电转化效率。

基于 SCAPS-1D 器件模拟器对固态电解质组成的 DSSC 进行了模拟, 模拟结果和分析结论可对固态染料敏化太阳能电池的商业制造和应用提供有价值的参考, 使其开发具有成本效益和应用广泛的太阳能电池, 提高 DSSC 光电转化效率。

参考文献:

- [1] KHAN M, IQBAL M A, MALIK M, et al. Improving the efficiency of dye-sensitized solar cells based on rare-earth metal modified bismuth ferrites[J]. *Sci Rep*, 2023, 13(1): 3123.
- [2] NAJM A S, ALI ALWASH S, SULAIMAN N H, et al. N719 dye as a

sensitizer for dye-sensitized solar cells (DSSCs): A review of its functions and certain rudimentary principles[J]. *Env Prog And Sustain Energy*, 2023, 42(1): e13955.

- [3] YADAGIRI B, KUMAR KALIAMURTHY A, YOO K, et al. Molecular engineering of photosensitizers for solid-state dye-sensitized solar cells: Recent developments and perspectives[J]. *ChemistryOpen*, 2023, 12(12): e202300170.
- [4] 王艳香, 杨金芳, 范学运, 等. 染料敏化太阳能电池固态电解质研究进展[J]. *陶瓷学报*, 2020, 41(3): 334-342.
WANG Yanxiang, YANG Jinfang, FAN Xueyun, et al. *J Ceram*, 2020, 41(3): 334-342.
- [5] BARRIT D. *In situ* Investigation of the effect of solvation state of lead iodide and the influence of different cations and halides on the two-step hybrid perovskite solar cells formation[D]. Thuwal, Kingdom of Saudi Arabia: King Abdullah University of Science and Technology, 2019.
- [6] OJOTU K, BABAJI G. Simulation of an optimized poly 3-Hexylthiophene (P3HT) based solid state dye sensitized solar cell (ss-DSSC) using SCAPS[J]. *Int J Mod Res Eng Technol*, 2020, 5: 1-10.
- [7] NOORASID N S, ARITH F, FIRHAT A Y, et al. SCAPS numerical analysis of solid-state dye-sensitized solar cell utilizing copper (I) iodide as hole transport layer[J]. *Eng J*, 2022, 26(2): 1-10.
- [8] SONG J X, YIN X X, HU L, et al. Plasmon-coupled Au-nanochain functionalized PEDOT: PSS for efficient mixed tin-lead iodide perovskite solar cells[J]. *Chem Commun*, 2022, 58(9): 1366-1369.
- [9] KORIR B K, KIBET J K, NGARI S M. Simulated performance of a novel solid-state dye-sensitized solar cell based on phenyl-C61-butyric acid methyl ester (PC61BM) electron transport layer[J]. *Opt Quantum Electron*, 2021, 53(7): 368.
- [10] SHUM K, CHEN Z, QURESHI J, et al. Synthesis and characterization of CsSnI₃ thin films[J]. *Appl Phys Lett*, 2010, 96(22): 221903.
- [11] BEILEY Z M, MCGEHEE M D. Modeling low cost hybrid tandem photovoltaics with the potential for efficiencies exceeding 20%[J]. *Energy Environ Sci*, 2012, 5(11): 9173-9179.
- [12] MADAN J, GARG S, GUPTA K, et al. Numerical simulation of charge transport layer free perovskite solar cell using metal work function shifted contacts[J]. *Optik*, 2020, 202: 163646.
- [13] BURGELMAN M, DECOCK K, KHELIFI S, et al. Advanced electrical simulation of thin film solar cells[J]. *Thin Solid Films*, 2013, 535: 296-301.
- [14] AICHOUBA M. Solar cell parameters extraction optimization using Lambert function[J]. *Przeglad Elektrotechniczny*, 2019, 1(4): 229-233.
- [15] SHAFI M A, KHAN L, ULLAH S, et al. Novel compositional engineering for ~26% efficient CZTS-perovskite tandem solar cell[J]. *Optik*, 2022, 253: 168568.
- [16] GUPTA P. Band alignment studies of Zn_{1-x}Ni_xO/ZnO: As bilayer electron transport layer in perovskite solar cells[J]. *Opt Mater*, 2024, 150: 115305.
- [17] DINIZ ARAÚJO V H, NOGUEIRA A F, TRISTÃO J C, et al. Fullerene-C60 and PCBM as interlayers in regular and inverted lead-free PSCs using CH₃NH₃SnI₃: An analysis of device performance and defect density dependence by SCAPS-1D[J]. *RSC Adv*, 2024, 14(16): 10930-10941.
- [18] ALIYASELVAM O. Optimization of copper(I) thiocyanate as hole transport material for solar cell by scaps-1D numerical analysis[J]. *PRZEGŁAD ELEKTROTECHNICZNY*, 2022, 1(6): 133-137.

- [19] JAHANTIGH F, SAFIKHANI M J. The effect of HTM on the performance of solid-state dye-sensitized solar cells (SDSSCs): A SCAPS-1D simulation study[J]. *Appl Phys A*, 2019, 125(4): 276.
- [20] KORIR B K, KIBET J K, NGARI S M. Computational simulation of a highly efficient hole transport-free dye-sensitized solar cell based on titanium oxide (TiO₂) and zinc oxysulfide (ZnOS) electron transport layers[J]. *J Electron Mater*, 2021, 50(12): 7259–7274.
- [21] ABDELAZIZ W, SHAKER A, ABOUELATTA M, et al. Possible efficiency boosting of non-fullerene acceptor solar cell using device simulation[J]. *Opt Mater*, 2019, 91: 239–245.
- [22] PATEL M J, GUPTA S K, GAJJAR P N. Electronic structure and optical properties of β -CuSCN: A DFT study[J]. *Mater Today Proc*, 2020, 28: 164–167.
- [23] HOSSAIN M K, MOHAMMED M K A, PANDEY R, et al. Numerical analysis in DFT and SCAPS-1D on the influence of different charge transport layers of CsPbBr₃ perovskite solar cells[J]. *Energy Fuels*, 2023, 37(8): 6078–6098.
- [24] 程友良, 集鑫锋, 刘萌. 染料敏化太阳能电池载流子传输的数值模拟[J]. *人工晶体学报*, 2022, 51(4): 687–694.
- CHENG Youliang, JI Xinfeng, LIU Meng. J Synth Cryst, 2022, 51(4): 687–694.
- [25] KARTHICK S, VELUMANI S, BOUCLÉ J. Chalcogenide BaZrS₃ perovskite solar cells: A numerical simulation and analysis using SCAPS-1D[J]. *Opt Mater*, 2022, 126: 112250.
- [26] AGRAWAL A, SIDDIQUI S A, SONI A, et al. Performance analysis of TiO₂ based dye sensitized solar cell prepared by screen printing and doctor blade deposition techniques[J]. *Sol Energy*, 2021, 226: 9–19.
- [27] DERRY G N, KERN M E, WORTH E H. Recommended values of clean metal surface work functions[J]. *J Vac Sci Technol A Vac Surf Films*, 2015, 33(6): 060801.

Simulation of Solid State Dye-Sensitized Solar Cells

CHENG Youliang^{1,2}, ZHANG Zhongbao^{1,2}

(1.Department of Power Engineering, North China Electric Power University, Baoding 071003, Hebei, China; 2.Key Laboratory of Low Carbon and Efficient Power Generation Technology, North China Electric Power University, Baoding 071003, Hebei, China)

Extended Abstract

Introduction Dye-sensitized solar cells (DSSC), as the third generation of solar cells, have the advantages of low cost, environmental protection, pollution-free, and abundant raw materials. Conventional liquid-state electrolyte of DSSC restricts an absorption capacity of visible light and is corrosive, which is considered as an obstacle to the long-term use of DSSC. Solid-state electrolyte has attracted much attention because it overcomes the shortcomings of liquid-state electrolyte (*i.e.*, volatile organic solvent, poor stability and easy leakage). TiO₂ is often used as a photoanode material for DSSC, and its conduction band can match the energy level of common dyes to accelerate electron transfer. However, TiO₂ has a low electron mobility, a low conductivity, a long-term ultraviolet irradiation and the existence of oxygen vacancy, which hinders the effective current output and reduces the photoelectric conversion efficiency. ZnO material can replace TiO₂ as a photoanode because of its high electron mobility and transparency, and it is also a wide-band gap semiconductor material. To improve the photoelectric conversion efficiency of DSSC and solve the problem of liquid-state electrolyte leakage, ZnO solid-state dye-sensitized solar cells were simulated by a software named SCAPS-1D, and the photoelectric performance of solid-state DSSC was analyzed.

Methods Based on FTO/ZnO/N719 / PEDOT: PSS/Au structure modeling by the software SCAPS-1D, a solid-state DSSC model in each layer material interface lose band gap, dielectric constant, mobility and other parameters, and inside layer and layer between the defects was set up under AM1.5G 1 standard solar lighting at an incident light power of 100 mW/cm². The material defect was set as a neutral defect to ensure that the defect could generate SRH recombination without generating space charge because the charge recombination mode of DSSC was mainly SRH. The Poisson equation, carrier continuity equation and carrier drift diffusion equation were numerically solved by the software of SCAPS-1D. The influences of material thickness, operating temperature, series parallel resistance and back contact metal type on the DSSC photoelectric parameters were simulated, and the internal mechanism of the influences of various factors on the DSSC was analyzed.

Results and discussion The open circuit voltage, short circuit current density and photoelectric conversion efficiency increase significantly, and the thickness continues to increase to 1000 nm, as well as the photoelectric parameters increase slowly when the thickness of the dye layer increases from 100 nm to 500 nm. The maximum photoelectric conversion efficiency can be obtained at the thickness of electron transport layer of 20 nm. The photoelectric conversion efficiency increases with the increase of hole transport layer thickness. The efficiency decreases with the increase of operating temperature, and the maximum photoelectric conversion efficiency is 15.17% at 300 K. The open circuit voltage and short circuit current density change little, and the filling factor and photoelectric conversion efficiency decrease when DSSC series resistance increases. The short circuit current density basically unchanged, and other parameters improve when the shunt resistance increases. The effect of changing the type of back contact metal on the photoelectric performance of DSSC is analyzed. The open circuit voltage, short circuit current density and photoelectric conversion efficiency all increase when the back contact metal work function value increases, and the maximum photoelectric conversion efficiency can be obtained when Au is used as the back contact metal.

Conclusions The optimal thickness of dye layer was 500 nm, and the maximum photoelectric conversion efficiency could be obtained at the thickness of electron transport layer of 20 nm, and the photoelectric conversion efficiency increased with the thickness of hole transport layer. The maximum photoelectric conversion efficiency was 15.17% at the operating temperature of 300 K. The series parallel resistance had an important effect on the photoelectric performance of DSSC. The smaller the series resistance was, the larger the parallel resistance could be, for the improvement of the photoelectric conversion efficiency of DSSC. The electrical conversion efficiency increased when the back contact metal work function value increased, and the maximum photoelectric conversion efficiency could be obtained as Au was used as the back contact metal.

Keywords dye-sensitized solar cells; solid electrolyte; SCAPS-1D; series parallel resistance; back contact with metal; photoelectric conversion efficiency