

缺陷与掺杂调控对CsPbI₃钙钛矿太阳能电池光电性能的影响

王希^{1*}, 陈金耀¹, 陈卓妍¹, 丁熙娅¹, 张馨¹, 刘邦震¹, 王传坤^{1,2#}

¹兴义民族师范学院, 物理与工程技术学院, 贵州 兴义

²黔西南州微纳功能材料重点实验室, 贵州 兴义

收稿日期: 2026年2月28日; 录用日期: 2026年3月10日; 发布日期: 2026年4月15日

摘要

利用SCAPS-1D软件构建glass/FTO/PCBM/CsPbI₃/GO/Au钙钛矿太阳能电池结构。通过该软件研究了钙钛矿层缺陷密度, GO掺杂浓度以及GO/CsPbI₃、CsPbI₃/PCBM界面缺陷对器件性能的影响。优化后器件的光电转换效率为24.79%, 通过理论研究为提高钙钛矿太阳能电池的光电效率提供了理论支持。

关键词

钙钛矿层, 掺杂浓度, 界面缺陷, SCAPS-1D软件

Effects of Defect and Doping Regulation on the Optoelectronic Performance of CsPbI₃ Perovskite Solar Cells

Xi Wang^{1*}, Jinyao Chen¹, Zhuoyan Chen¹, Xiya Ding¹, Xin Zhang¹, Bangzhen Liu¹, Chuankun Wang^{1,2#}

¹College of Physics and Engineering Technology, Minzu Normal University of Xingyi, Xingyi Guizhou

²Key Laboratory for Micro-Nano Functional Materials of Qianxinan, Xingyi Guizhou

Received: February 28, 2026; accepted: March 10, 2026; published: April 15, 2026

Abstract

The glass/FTO/PCBM/CsPbI₃/GO/Au perovskite solar cell structure was constructed by the SCAPS-

*第一作者。

#通讯作者。

文章引用: 王希, 陈金耀, 陈卓妍, 丁熙娅, 张馨, 刘邦震, 王传坤. 缺陷与掺杂调控对 CsPbI₃ 钙钛矿太阳能电池光电性能的影响[J]. 电力与能源进展, 2026, 14(2): 86-93. DOI: 10.12677/aepe.2026.142010

1D software. The effects of defect density of the perovskite layer, GO doping concentration, and interfacial defects at GO/CsPbI₃ and CsPbI₃/PCBM on the device performance were systematically investigated via this software. The optimized device achieves a photoelectric conversion efficiency (PCE) of 24.79%. This theoretical study provides a reliable theoretical basis for the efficiency enhancement of perovskite solar cells.

Keywords

Perovskite Layer, Doping Concentration, Interfacial Defect, SCAPS-1D Software

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

钙钛矿太阳能电池(PSCs)具有较高的光电转换效率、材料易溶液处理以及制作成本低等特点,使其成为最有前途的下一代光伏器件[1]。PSCs是第三代太阳能电池,钙钛矿材的分子通式为 ABX_3 ,其中A是 $CH_3NH_3^+$ 或者 $CH_3(NH_2)^{2+}$ 等离子,B是 Pb^{2+} , Sn^{2+} , Ge^{2+} 等[1]-[4],X是I、Br、Cl等离子。随着新材料出现和制备工艺的提升,钙钛矿太阳能电池的光电转换效率由3.8%到26.2%的突破[5]。钙钛矿太阳能电池的结构由电子传输层、空穴传输层、钙钛矿光吸收层、阳极和阴极组成。钙钛矿太阳能电池可以分为传统的n-i-p或倒型p-i-n结构[6]。

碘化铯铅($CsPbI_3$)与甲基铵碘化铅($MAPbI_3$)相比,该材料具有更好的热稳定性,以及理想的光学带隙(1.7 eV),适合用于串联太阳能电池,进一步提升器件的光电性能。这有助于实现钙钛矿太阳能电池的商业应用,并提供参考[7]。

石墨烯及其衍生物具有独特的材料结构和光电性质,作为潜在的电子传输层或空穴传输层用于新型钙钛矿太阳电池。石墨烯作为空穴传输材料应用时,研究者更多关注石墨烯衍生物——氧化石墨烯(Graphene Oxide, GO)。GO作为空穴传输层材料,具有较好的透光性合适功函数(~4.9 eV)及易于溶液加工等优点。此外,GO拥有两亲性,可以作为表面活性剂用于钙钛矿太阳电池,以提高界面润湿性。范[8]等人采用喷涂工艺将三种不同直径的单分散多级结构 SnO_2 微球分别制备成电子传输层薄膜基于石墨烯量子点掺杂的钙钛矿太阳能电池的效率从未掺杂的16.28%提升到17.72%。此外,石墨烯量子点的掺杂抑制了晶格中的离子迁移,减小了电池的回滞现象,反向和正向扫描得到的光电转换效率分别为17.72%和17.30%。Xu [7]等人利用分子层沉积方法单脉冲修饰石墨烯的方法,利用乙二醇处理后的石墨烯复合薄膜在薄膜物理表征面有着更低的方阻、更平滑的粗糙度以及更高的透过率;在光学方面,用该方法处理的复合薄膜其功函数与下一层的电子注入层更加匹配,PSCs的光电转换效率增加了133.9%。

本研究构建结构为glass/FTO/PCBM/ $CsPbI_3$ /GO/Au钙钛矿太阳能电池,研究钙钛矿层缺陷密度,GO掺杂浓度以及GO/ $CsPbI_3$ 、 $CsPbI_3$ /PCBM界面缺陷对器件性能的影响。

2. 物理模型与材料参数

SCAPS-1D软件采用一维扩散模型来解决泊松方程和连续性方程。该方法能够精确地描绘电池内部的电场和载流子的行为并能够精确地计算太阳能电池的各项性能如电流和(J-V)、电容和电压曲线(C-V)、电容和频率曲线(C-f)和量子效率(QE)等。

该软件利用三个半导体基本方程(泊松方程(1)和电子(2)与空穴(3)连续性方程)的数值解[9],对钙钛矿器件进行计算,公式如下所示。

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

$$\frac{1}{q} \frac{dJ_n}{dx} + R_n(x) - G(x) = 0 \quad (2)$$

$$\frac{1}{q} \frac{dJ_p}{dx} + R_p(x) - G(x) = 0 \quad (3)$$

其中: ϵ 为介电常数; ψ 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; $N_D^+(x)$ 、 $N_A^-(x)$ 分别为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。

研究过程中构建 glass/FTO/PCBM/CsPbI₃/GO/Au 钙钛矿太阳能电池结构如图 1 所示,其中 PCBM 和 GO 分别作为电子传输层和空穴传输层, CsPbI₃ 作为钙钛矿层, Au 作为后接触电极,功函数 5.1000 eV, 光线从 FTO 端入射。材料的基本参数如表 1。

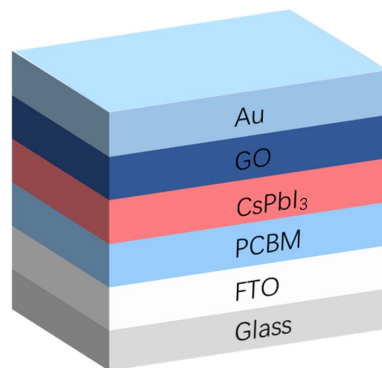


Figure 1. Structure of perovskite solar cells
图 1. 钙钛矿太阳能电池结构

Table 1. Simulation parameters of materials [10]-[13]

表 1. 材料仿真参数[10]-[13]

参数	FTO	PCBM	CsPbI3	GO
Thickness/nm	100	100	500	200
Band gap/eV	3.5	2.1	1.7	2.5
Electron affinity/eV	4	3.9	3.95	2.3
Dielectric permittivity (relative)	9	4	6	10
Effective conduction band density/cm ⁻³	2.2 × 10 ¹⁸	1 × 10 ²¹	1 × 10 ²⁰	2.2 × 10 ¹⁸
Effective valence band density/cm ⁻³	1.8 × 10 ¹⁹	2 × 10 ²⁰	8 × 10 ¹⁹	1.8 × 10 ¹⁹
Electron mobility/(cm ² ·V ⁻¹ ·s ⁻¹)	20	0.02	16	26
Hole mobility/(cm ² ·V ⁻¹ ·s ⁻¹)	10	0.02	16	123
Donor doping concentration/cm ⁻³	2 × 10 ¹⁹	1 × 20		0
Acceptor doping concentration/cm ⁻³	1 × 10 ¹⁵	0	1 × 10 ¹²	2 × 10 ¹⁸

3. 结果与讨论

基于表 1 参数进行器件仿真, 在初始条件下, 钙钛矿太阳能电池的电压和电流密度曲线如图 2(a)所示, 其开路电压(V_{oc})为 1.27 V, 短路电流密度(J_{sc})为 19.65 mA/cm², 填充因子(FF)为 89.38%, 光电转换效率为(PCE) 22.35%。图 2(b)是器件的量子效率随波长变化关系。可以看出在波长 350 nm~650 nm 范围内, 器件具有较高的量子效率。通过初试参数对器件性能影响的研究, 为进一步优化其它参数对性能影响奠定了基础。

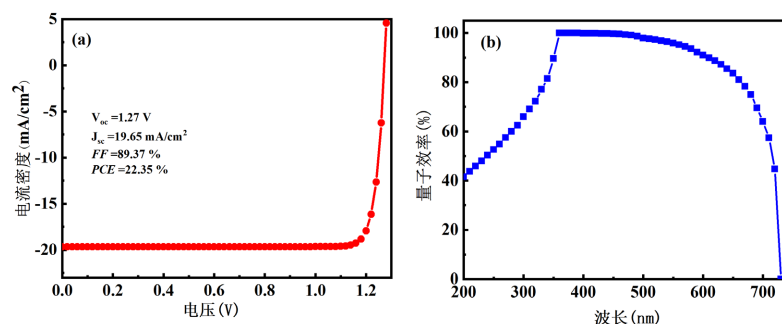


Figure 2. Photovoltaic curve (a) and quantum efficiency (b) of perovskite solar cells
图 2. 钙钛矿太阳能电池光伏曲线(a)与量子效率(b)

3.1. 钙钛矿层缺陷密度对器件性能的影响

钙钛矿层缺陷密度对太阳能电池性能具有重要的影响, 主要体现在主载流子复合、电荷传输效率和器件稳定性等方面。研究过程中, 钙钛矿材料 CsPbI₃ 缺陷密度的变化范围为 $1.0 \times 10^5 \sim 1.0 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, 研究 CsPbI₃ 缺陷密度对器件性能的影响。从图 3(a)~(d)可以看出, CsPbI₃ 缺陷密度在 $1.0 \times 10^5 \sim 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ 时, V_{oc} 、 J_{sc} 、 FF 、 PCE 几乎未变化, 随着 CsPbI₃ 缺陷密度的增加, 载流子复合中心将会增加, 同时导致载流子复合增强, 进一步降低了载流子的收集效率[14]。

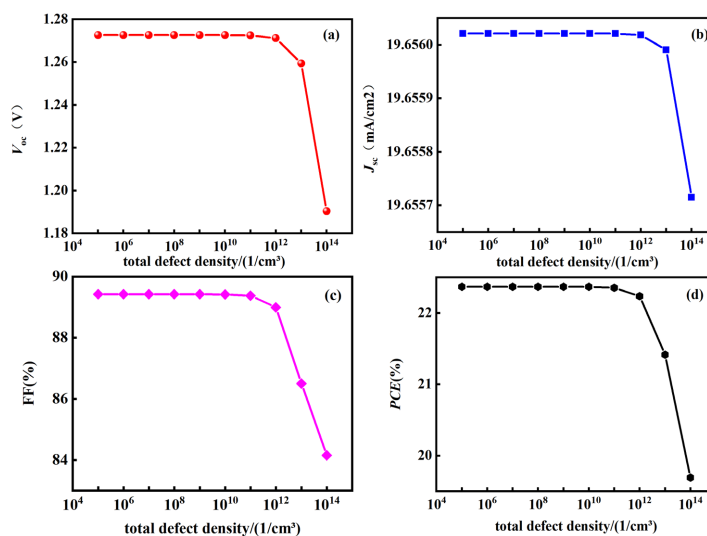


Figure 3. The influence of defect density of the perovskite layer on the performance of perovskite solar cells

图 3. 钙钛矿层缺陷密度对钙钛矿太阳能电池性能的影响

3.2. 空穴传输层受主掺杂浓度对器件性能的影响

空穴传输层受主浓度对太阳能电池的性能具有重要的影响, 精确调控空穴传输层中受主浓度对设计和制备高效率、高稳定性的钙钛矿太阳能电池具有重要的参考价值。研究过程中 GO 掺杂浓度变化范围为 $2 \times 10^{15} \sim 2 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$, GO 掺杂浓度对器件性能的影响, 如图 4 所示。从图 4(a)~(d)可以看出, V_{oc} 随着掺杂浓度的增加而增加, J_{sc} 在 $2 \times 10^{15} \sim 2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 范围内, J_{sc} 数值减小幅度较大, 随之 GO 掺杂浓度的增加, J_{sc} 数值减小幅度变小。当 GO 掺杂浓度为 $2 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 时, FF 最大。PCE 随着掺杂浓度的增加而增加。

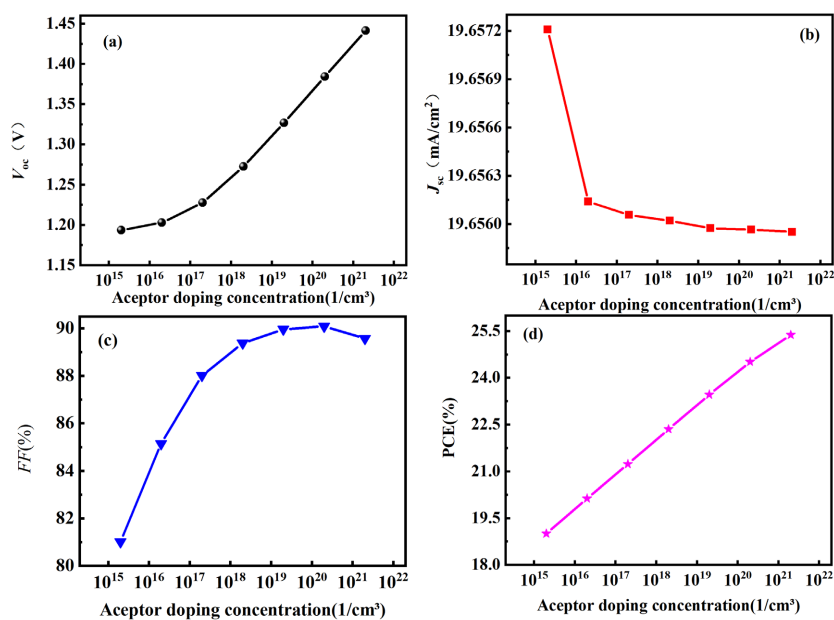


Figure 4. The influence of acceptor doping concentration of the hole transport layer on the performance of perovskite solar cells

图 4. 空穴传输层受主掺杂浓度钙钛矿太阳能电池性能的影响

3.3. 界面缺陷密度对器件性能的影响

材料间界面缺陷是器件固有的内部缺陷, 对器件性能产生显著影响[15][16]。较高的界面缺陷密度会降低界面质量进而增加载流子复合率。

研究过程中界面为 GO/CsPbI₃、CsPbI₃/PCBM, 分别定义为 IL1 和 IL2 界面。界面缺陷密度类型设置为中性。IL1 和 IL2 界面缺陷密度变化范围为 $10^9 \sim 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ 。界面缺陷密度对钙钛矿太阳能电池的影响如图 5 和图 6 所示。

图 5 是 IL1 界面缺陷对器件性能的影响。从图 5(a)、图 5(d)可看出, V_{oc} 和 PCE 随着缺陷密度的增加而减小, 但 J_{sc} 在研究范围内几乎没有变化, 如图 5(b)所示。当界面密度为 10^{12} cm^{-2} 时, FF 具有最大值。然后, FF 随着界面缺陷的增加而减小。在 $10^9 \sim 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ 变化范围内, 器件的 PCE 从 25.59% 减小至 17.76%。由此, 可看出 IL1 界面缺陷密度对器件性能影响较大。

图 6 是 IL2 界面缺陷对器件性能的影响。从图 6 可看出, IL2 界面缺陷密度在 $10^9 \sim 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ 变化时, V_{oc} 、 J_{sc} 、FF、PCE 的数值几乎没有变化。当界面缺陷密度大于 10^{14} cm^{-2} 时, V_{oc} 、 J_{sc} 、PCE 在下降, 而 FF 上升。而 PCE 由最初的 22.35% 减小至 22.27%。由此, 可知 IL2 界面缺陷密度对器件性能影响较小。

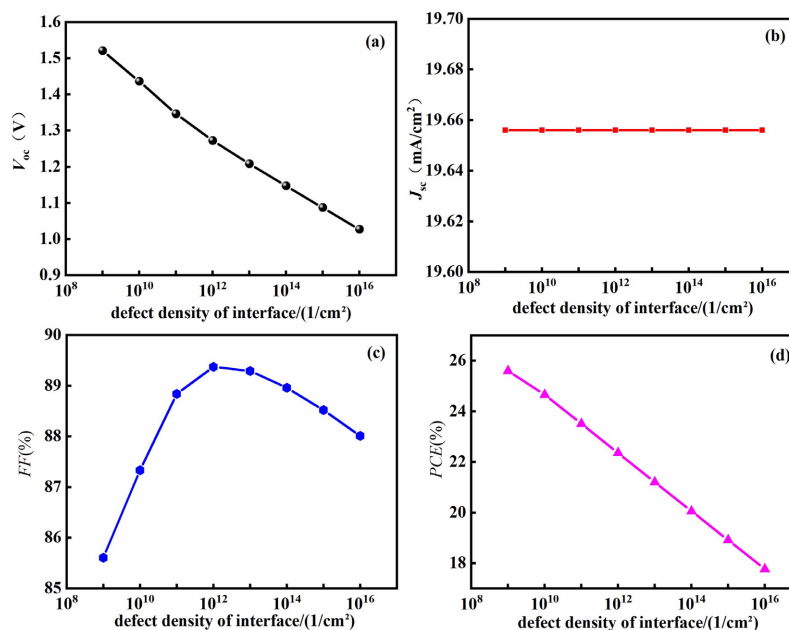


Figure 5. The influence of IL1 interface defect density on the performance of perovskite solar cells

图 5. IL1 界面缺陷密度对钙钛矿太阳能电池性能的影响

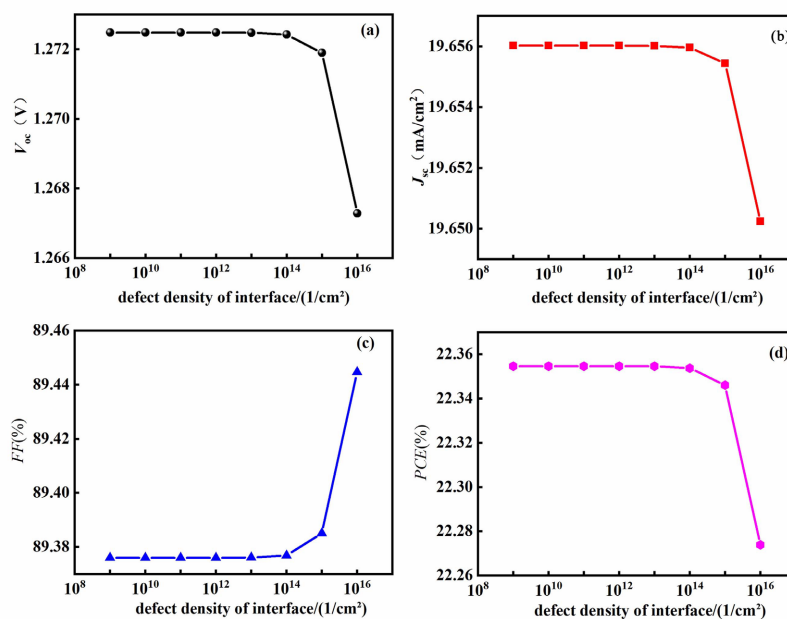


Figure 6. The influence of IL2 interface defect density on the performance of perovskite solar cells

图 6. IL2 界面缺陷密度对钙钛矿太阳能电池性能的影响

3.4. 优化前后结果对比

通过对钙钛矿层缺陷密度，GO 掺杂浓度以及 GO/CsPbI₃、CsPbI₃/PCBM 界面缺陷参数的性能研究，

对器件进行优化。优化前与优化后的 J-V 的曲线如图 7 所示。器件优化后的性能参数 V_{oc} 为 1.33 V、 J_{sc} 为 20.76 mA/cm^2 、FF 为 89.88%、PCE 为 24.79%，与优化前相比， V_{oc} 提升了 0.06 V、 J_{sc} 提升了 1.11 mA/cm^2 、FF 提升了 0.5%、PCE 提升了 2.44%。

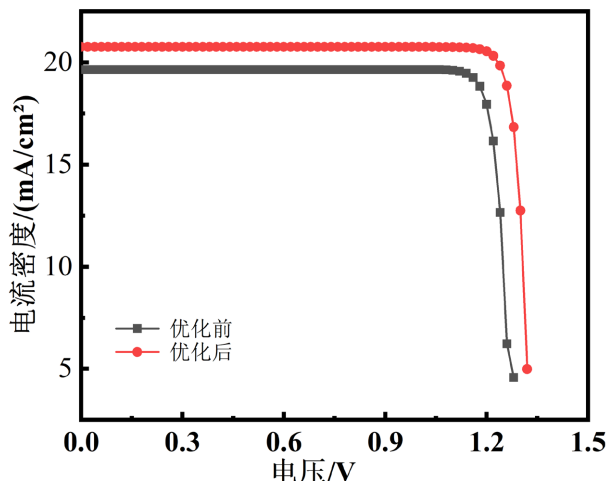


Figure 7. Comparison of J-V results
图 7. J-V 结果对比

4. 结论

本文构建全无机 CsPbI_3 的结构并进行优化，分析钙钛矿层缺陷密度，GO 掺杂浓度以及 GO/CsPbI_3 、 $\text{CsPbI}_3/\text{PCBM}$ 界面缺陷等关键参数对器件性能的影响。钙钛矿层 CsPbI_3 缺陷密度变化范围为 $1.0 \times 10^5 \sim 1.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ 时对电池影响甚微，而在大于 $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ 降低趋势较大。最佳缺陷密度为 $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ 。空穴传输层 GO 受主掺杂浓度在 $2 \times 10^{15} \sim 2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 时，器件的 PCE 随着掺杂浓度的增加而增加。器件的 PCE 随着 GO/CsPbI_3 界面缺陷密度增加而减小，但 $\text{CsPbI}_3/\text{PCBM}$ 界面缺陷密度在 $10^9 \sim 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ 时对 PCE 几乎没有影响，随着 $\text{CsPbI}_3/\text{PCBM}$ 界面缺陷密度的增加，PCE 呈现下降趋势。

基金项目

国家级大学生创新创业项目(2024106660802, 2024106660798, 202510666449)。

参考文献

- [1] Husainat, A., Ali, W., Cofie, P., Attia, J. and Fuller, J. (2019) Simulation and Analysis of Methylammonium Lead Iodide ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$) Perovskite Solar Cell with Au Contact Using SCAPS 1D Simulator. *American Journal of Optics and Photonics*, **7**, 33-40. <https://doi.org/10.11648/j.ajop.20190702.12>
- [2] Nalianya, M.A., Awino, C., Barasa, H., Odari, V., Gaitho, F., Omogo, B., *et al.* (2021) Numerical Study of Lead Free $\text{CsSn}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}\text{I}_3$ Perovskite Solar Cell by SCAPS-1D. *Optik*, **248**, Article ID: 168060. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2021.168060>
- [3] Sunny, A., Rahman, S., Khatun, M.M. and Ahmed, S.R.A. (2021) Numerical Study of High Performance HTL-Free $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ -Based Perovskite Solar Cell by SCAPS-1D. *AIP Advances*, **11**, Article ID: 065102. <https://doi.org/10.1063/5.0049646>
- [4] Karthick, K., Suresh, S., Hussain, M.M.M.D., Ali, H.M. and Kumar, C.S.S. (2019) Evaluation of Solar Thermal System Configurations for Thermoelectric Generator Applications: A Critical Review. *Solar Energy*, **188**, 111-142. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2019.05.075>
- [5] 索鑫磊, 刘艳, 张立来, 等. 基于氧化石墨烯空穴传输层的平面异质结构钙钛矿太阳能电池[J]. 材料导报, 2021,

- 35(6): 6015-6019.
- [6] 赵大伟, 李铭, 戴世杰, 等. 共轭聚合物-氧化石墨烯钝化材料改善钙钛矿太阳能电池性能[J]. 科学通报, 2020, 65(32): 3593-3601.
- [7] 许湘晨. 利用乙二醇修饰石墨烯应用于柔性钙钛矿太阳能电池[D]: [硕士学位论文]. 长春: 吉林大学, 2020.
- [8] 范心怡. 石墨烯修饰钙钛矿太阳能电池电极材料及其增效研究[D]: [硕士学位论文]. 上海: 上海工程技术大学, 2021.
- [9] Deepthi Jayan, K. and Sebastian, V. (2021) Comprehensive Device Modelling and Performance Analysis of MASnI₃ Based Perovskite Solar Cells with Diverse ETM, HTM and Back Metal Contacts. *Solar Energy*, **217**, 40-48. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2021.01.058>
- [10] Dhivya Bharathi, C. and Sriramalakshmi, P. (2025) Simulation of Lead Free Heterojunction N- FASnI₃/p-FrGeCl₃ Based Perovskite Solar Cell with ZnMgO as Electron Transport Layer and GO as Hole Transport Layer Using SCAPS-1D. *Results in Engineering*, **27**, Article ID: 106180. <https://doi.org/10.1016/j.rineng.2025.106180>
- [11] Zhang, A. and Duan, R. (2023) Design and Numerical Investigation of CsPbI₃/CsSn_{0.5}Ge_{0.5}I₃ Double-Absorption-Layer Heterojunction Perovskite Solar Cells Based on SCAPS-1D. *Physica Status Solidi (a)*, **220**, Article ID: 2300525. <https://doi.org/10.1002/pssa.202300525>
- [12] Hossain, M.K., Rubel, M.H.K., Toki, G.F.I., Alam, I., Rahman, M.F. and Bencherif, H. (2022) Effect of Various Electron and Hole Transport Layers on the Performance of CsPbI₃-Based Perovskite Solar Cells: A Numerical Investigation in DFT, SCAPS-1D, and wxAMPS Frameworks. *ACS Omega*, **7**, 43210-43230. <https://doi.org/10.1021/acsomega.2c05912>
- [13] 黄孝坤, 杨爱军, 黎健生, 等. 基于 CuS 空穴传输材料的钙钛矿电池的性能研究[J]. 人工晶体学报, 2023, 52(3): 485-492.
- [14] He, B., Xu, Y., Zhu, J. and Zhang, X. (2021) Effects of the Doping Density of Charge-Transporting Layers on Regular and Inverted Perovskite Solar Cells: Numerical Simulations. *Advanced Composites and Hybrid Materials*, **4**, 1146-1154. <https://doi.org/10.1007/s42114-021-00343-9>
- [15] 姚广平, 文超, 刘佳澎, 等. 缺陷对全无机钙钛矿太阳能电池性能的影响[J]. 发光学报, 2023, 44(11): 2033-2040.
- [16] 程友良, 寇雪宁, 张忠宝, 等. 以 CZTS 为空穴传输层的固态染料敏化太阳能电池的性能模拟与优化[J]. 复合材料学报, 2026, 43(4): 2173-2185.