

$\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 能带结构及作为窗口层的 CdTe 薄膜太阳电池的 SCAPS 仿真应用

何旭^{1,2}, 任胜强¹, 李春秀¹, 武莉莉¹, 张静全¹, 都政³

(1. 四川大学 材料科学与工程学院, 成都 610065; 2. 成都纺织高等专科学校, 成都 611731; 3. 国家超级计算深圳中心, 深圳 518055)

摘要: 采用第一性原理广义梯度近似+ U (GGA+ U)方法计算了纤锌矿结构 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ (ZMO)($0 \leq x \leq 0.25$)合金的能带结构。计算表明: 随着 Mg 组分增加, ZMO 化合物的导带底及费米能级均向真空能级方向移动, 带隙增宽。基于理论计算得到 ZMO 的能带结构参数, 使用 SCAPS 软件对 ZMO 作窗口层的 CdTe 薄膜太阳电池的性能进行了仿真模拟, 并将研究结果与 CdS 作窗口层的 CdTe 太阳电池的性能进行了比较。结果表明: Mg 在 ZMO 中的含量 $0 \leq x \leq 0.125$ 时, ZMO/CdTe 太阳电池具有比 CdS/CdTe 太阳电池更高的开路电压和短路电流密度; ZMO 的导带底高出 CdTe 导带底约 0.13 eV 时, CdTe 薄膜太阳电池的转换效率最高, 达到 18.29%。这些结果为高效率碲化镉薄膜太阳电池的结构设计和器件制备提供了理论指导。

关键词: $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$; 能带结构; 薄膜太阳电池; 转换效率

中图分类号: O447 文献标识码: A

$\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$: Band Structure and Simulation as Window Layer for CdTe Solar Cell by SCAPS Software

HE Xu^{1,2}, REN Sheng-Qiang¹, LI Chun-Xiu¹, WU Li-Li¹, ZHANG Jing-Quan¹, DU Zheng³

(1. College of Materials Science and Engineering, Sichuan University, Chengdu 610065, China; 2. Chengdu Textile College, Chengdu 611731, China; 3. National Supercomputing Center in Shenzhen, Shenzhen 518055, China)

Abstract: In this paper, the band structure of $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ (ZMO) alloy with different Mg compositions by using first-principles calculations with GGA+ U method was studied. The calculation results show that position of conduction band offset and Fermi level of $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ move towards the vacuum level while the band gap becomes wider with the increasing Mg concentration. Based on theoretical calculation results of ZMO, ZMO/CdTe, CdS/CdTe solar cells were modeled using SCAPS software and its device performances were simulated and analyzed in detail. The results indicate that the conversion efficiency of CdTe solar cell with ZMO is higher than that of solar cell with CdS due to the high open circuit voltage and short circuit current density when x in $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ is in the range of 0–0.125. Efficiency of CdTe solar cells with ZMO reaches 18.29% because the recombination decreases obviously resulting from appropriate conduction band offset about 0.13 eV at ZMO/CdTe interface. These data provide a theoretical guidance for design and fabrication of high efficiency CdTe solar cells.

Key words: $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$; band structure; solar cell; conversion efficiency

收稿日期: 2017-07-20; 收到修改稿日期: 2017-10-13

基金项目: 国家高技术研究发展计划(2015AA050610) National High Technology Research and Development(2015AA050610)

作者简介: 何旭(1980–), 女, 博士研究生. E-mail: hexu1225@126.com

通讯作者: 武莉莉, 教授. E-mail: wulili@scu.edu.cn

ZnO 是典型的宽禁带半导体, 禁带宽度为 3.37 eV, 室温下的激子束缚能高达 60 meV^[1], 在薄膜太阳能电池及光电设备的透明电极等方面取得了广泛的应用^[2]。要实现 ZnO 在光电器件上的全面应用重点是通过掺杂改变 ZnO 的禁带宽度。实验研究^[3]发现: Mg 掺入 ZnO 形成的固溶体 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ (ZMO) 是一种带隙较宽、电子学性质可调控的新型半导体材料。Kumar 等^[4]通过研究发现: 当 $0 \leq x \leq 0.3$ 时 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 合金保持纤锌矿结构不变, 其禁带宽度可达到 4.06 eV。由于 Mg^{2+} 离子半径 (0.057 nm) 和 Zn^{2+} 离子半径 (0.060 nm) 较为接近, Mg 掺入 ZnO 后晶格常数的变化仅在 1% 左右^[5]。目前, 第一性原理计算 Mg 掺杂 ZnO 电子结构和光学性质的文献报道很多^[6-8], 大多采用密度泛函理论下 GGA 或 LDA 方法, 得到 ZnO 的带隙值在 0.50~1.08 eV^[9-10], 远低于 ZnO 的实验带隙值 3.37 eV^[11]。

Takashi 等^[12]研究了 ZMO/CIGS 导带偏移对 CIGS 太阳能电池的转换效率的影响。同样, 对 CdTe 太阳能电池, 尝试用 ZMO 代替 CdS 作其窗口层。一方面, 可以避免因 CdS 带隙 (2.42 eV) 过小而引起对光的紫外吸收, 另一方面, 通过改变 Mg 在 ZMO 中的组分, 使 ZMO/CdTe 有合适的导带偏移, 降低 ZMO/CdTe 界面的缺陷复合, 提高 CdTe 电池的转换效率。本文采用广义梯度近似+U 方法对密度泛函理论低估能隙的问题进行了修正, 计算了合金 ZMO 的能带结构, 根据理论计算得到数值, 结合 CdTe 的相关参数, 给出了 ZMO/CdTe 界面处的能带结构图, 采用 SCAPS 软件对 ZMO/CdTe 电池的输出特性进行了数值模拟, 结果对实验探索 CdTe 太阳能电池器件的窗口层、提高器件的光电转换效率具有十分重要的理论指导意义。

1 理论模型和计算方法

1.1 理论模型

理想 ZnO 呈六方纤锌矿结构, 本文所有计算都基于超晶胞 ($2 \times 2 \times 2$) 模型, 如图 1 所示。用 Mg^{2+} 代替 ZnO 超晶胞 ($2 \times 2 \times 2$) 中的 Zn^{2+} , 形成相应的 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 。Mg 掺杂组分 x 取值分别为 0, 0.0625, 0.125, 0.1875, 0.25。对于一个特定的掺杂体系, 等价替位掺杂存在多种可能性, 不同的掺杂构型计算结果可能不同。然而, 晶体结构存在着空间对称性, 利用对称性以及周期性平移条件, 可以找到合金替位掺杂的不等价构型, 对不同的构型进行结构优化, 得到最稳定的构像, 进行能带结构的计算。

CdTe 太阳能电池的模型结构如图 2 所示, 从右到左依次为前金属电极/FTO/CdS(ZMO)/CdTe/背接触层 ZnTe:Cu/背接触极。规定前金属电极处为零, 背电极处为 $x=d$ (d 是电池厚度), 电极厚度忽略不计。每层薄膜设置一种缺陷状态, 载流子浓度及各层薄膜的电学和光学相关参数见表 1, 表中各参数分别为: 相对介电常数 (ϵ/ϵ_0), 导带有效态密度 (N_c), 价带有效态密度 (N_v), 电子迁移率 (μ_n), 空穴迁移率 (μ_p), 膜厚 (Thickness), 载流子浓度 (N_A)。数据主要来源于理论、文献及估算等^[13]。SCAPS 模拟电池性能时, 以 CdS/CdTe 作为基础模型, 用 ZMO 替换 CdS, 不改变电池结构中其它各层的结构及参数设置。

1.2 计算方法

本文计算采用的软件是基于密度泛函理论 (DFT) 框架下的 CASTEP 软件包^[14]。电子间交换关联能用广义梯度近似+U 的 PBE^[15]泛函描述, 电子和离子间的相互作用采用超软赝势, 几何优化法采用了 BFGS 算法^[16]。布里渊区求和采用的是 $4 \times 4 \times 2$ 的 Monkhorst-Pack 型 k 点网格, 平面波截断能为 480 eV, 自洽场和能带的收敛精度皆设为 1.0×10^{-6} eV/atom。密度泛函理论采用 LDA 或 GGA

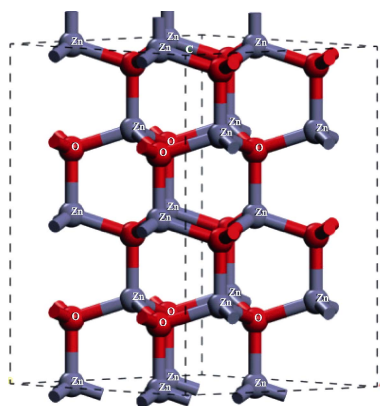


图 1 ZnO ($2 \times 2 \times 2$) 超晶胞模型

Fig. 1 Crystal structure of pure wurtzite bulk material ZnO supercell

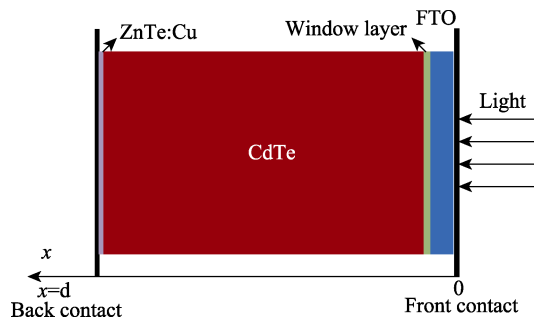


图 2 SCAPS 中 CdTe 电池结构图

Fig. 2 Device structure of CdTe solar cells for the device simulations

表 1 CdTe 电池材料的参数设置
Table 1 Simulation parameters for the model of CdTe solar cells

Layer properties	FTO	CdS	$\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$					CdTe	ZnTe:Cu
			$x=0$	$x=0.0625$	$x=0.125$	$x=0.1875$	$x=0.25$		
$\varepsilon/\varepsilon_0$	8.9	9.0	9.0	9.0	9.0	9.0	9.0	10.0	10.1
$N_{\text{c}}/\text{cm}^{-3}$	5.2×10^{18}	2.2×10^{18}	4.0×10^{18}	10^{17}	9.0×10^{16}	10^{16}	10^{15}	9.2×10^{17}	1.5×10^{18}
$N_{\text{v}}/\text{cm}^{-3}$	10^{19}	1.80×10^{19}	9.00×10^{18}	10^{18}	9.00×10^{17}	10^{17}	10^{16}	5.20×10^{18}	1.16×10^{19}
$\mu_{\text{n}}/(\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	100	340	50	50	50	50	50	400	400
$\mu_{\text{p}}/(\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	25	50	20	20	20	20	20	60	50
$N_{\text{A}}/\text{cm}^{-3}$	10^{20}	10^{17}	5.0×10^{17}	10^{16}	9.0×10^{15}	10^{15}	9.0×10^{14}	1.5×10^{14}	1.5×10^{20}
Thickness/nm	3.5×10^2	10^2	10^2	10^2	10^2	10^2	10^2	5.0×10^3	70.0

对过渡金属氧化物和氮化物等强关联体系进行相关计算时,往往存在低估能隙的问题^[17],尤其是对强关联体系的能带结构计算时不能给出正确的结果^[18]。为了计算的准确性,本文参照文献^[19]中对 Zn-3d 与 O-2p 电子分别加上相应的 U 值: $U_{\text{d}}=10.5 \text{ eV}$, $U_{\text{p}}=7.0 \text{ eV}$,修正电子之间的库仑占位势。计算得到 ZnO 原胞的带隙为 3.32 eV,与实验值一致^[20]。

CdS/CdTe 和 ZMO/CdTe 电池的模拟计算采用的是比利时 Gent 大学的 Burgelman 等^[21-22]开发的 SCAPS 软件,该软件基本原理是根据建立的电池结构模型和输入的材料参数求解这些约束条件下的泊松方程和电流的连续方程,如式(1)~(3)所示:

$$\nabla \cdot \varepsilon \nabla \varphi = -q(p - n) + N_{\text{D}} - N_{\text{A}} \tag{1}$$

$$\nabla \cdot \vec{J}_{\text{n}} = q(R - G) + q \frac{\partial n}{\partial t} \tag{2}$$

$$-\nabla \cdot \vec{J}_{\text{p}} = q(R - G) + q \frac{\partial p}{\partial t} \tag{3}$$

其中, ε 表示材料的介电常数, φ 表示电势, q 为电子的电量, p 和 n 分别为自由载流子空穴和电子的浓度, N_{D} 和 N_{A} 分别为电离施主和受主的浓度, \vec{J}_{n} 和 \vec{J}_{p} 为电子电流密度和空穴电流密度, R 和 G 分别为电子空穴对的复合速率和产生速率。SCAPS 软件通过数值计算求解上述方程,从而得到太阳能电池的相关特性。

2 计算结果与讨论

2.1 能带结构

图 3 为 ZnO 原胞的能带结构图。由图可知, ZnO 价带顶与导带底间最可能的光跃迁出现在布里渊区 Γ 点位置,属于直接带隙半导体。计算得到 ZnO 原胞的带隙宽度为 3.32 eV,与实验结果相符合^[20]。

采用磁控溅射方法在室温下制备含不同 Mg 组分的 ZMO 薄膜,用日本理学 RIGAKU ZSX Primus 型号的 X 射线荧光光谱仪测量 Mg 组分 x ,用 PerkinElmer 的 Lambda 950 型号的分光光度计测量

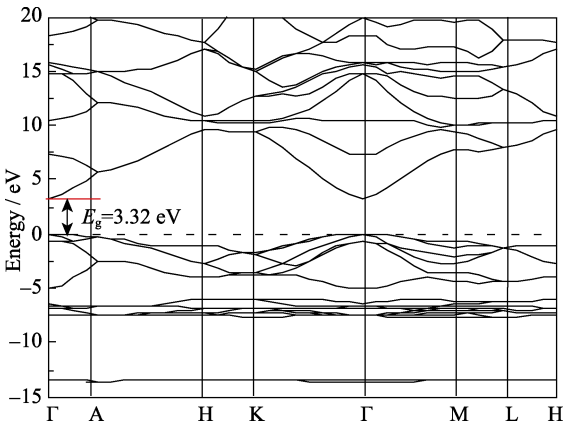


图 3 本征半导体 ZnO 能带结构
Fig. 3 Calculated band structure of pure ZnO

薄膜的透过率,如图 4(a)所示,由于 ZMO 为直接带隙半导体,根据透过率曲线计算 ZMO 薄膜的吸收系数,进而根据公式(4)做出 Tauc 曲线,如图 4(b)所示。

$$(\alpha h\nu)^2 = A(h\nu - E_{\text{g}}) \tag{4}$$

其中, α 表示光吸收系数, $h\nu$ 为入射光子能量, h 是普朗克常数, A 是比例系数, E_{g} 是 ZMO 薄膜的光学禁带宽度。将图 4(b)中曲线的线性部分延长与横坐标相交,交点对应的能量即为 ZMO 薄膜的光学禁带宽度 E_{g} 。

本文采用 GGA+ U 的方法计算得到的 ZMO 在不同 x 值下的带隙与实验测量值进行了比较,如图 5 所示,其中的红色曲线为实验测量值,黑色曲线表示计算结果。从图 5 可以看出,计算结果与实验结果之间的差异很小(在 $x=0.1875$ 和 0.25 两点二者几乎相等),且光能隙的变化趋势一致,都随 x 值的增大而增大。

2.2 光伏应用

2.2.1 ZMO/CdTe 异质结能带结构

对物质进行掺杂其真空能级并不发生改变 (ZnO 的真空能级取值为 7.85 eV ^[23]),根据 2.1 部分的计算,可以得到 ZMO 薄膜在不同 x 值时的导带底

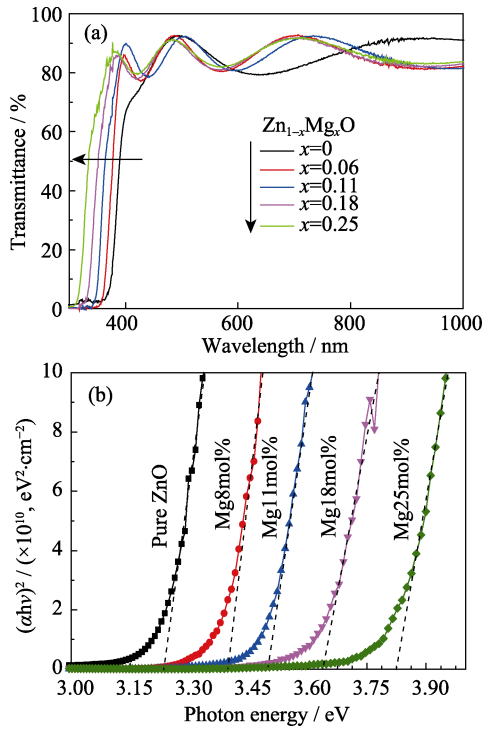


图 4 不同 Mg 含量下的 ZMO 薄膜透过光谱图(a)和光学带隙图谱(b)
Fig. 4 Optical transmittance spectra (a) and band-gap (b) of ZMO films

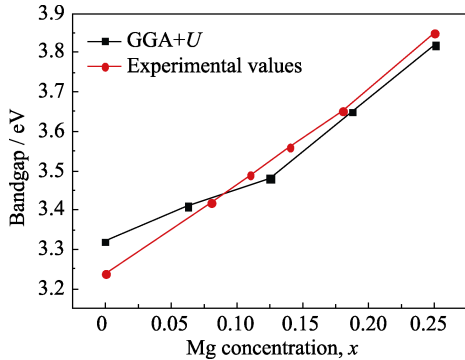


图 5 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 带隙值随 x 变化的关系曲线
Fig. 5 The bandgaps of wurtzite $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ alloy as a function of Mg concentration x

E_c 和费米能级 E_f 的位置(以价带顶 E_v 所在位置为 0 参考点), 再根据公式 $\chi = E_0 - E_c$ 和 $\phi = E_0 - E_f$ 计算出了 ZMO 薄膜的电子亲和势 χ 和功函数 ϕ 的值, 如表 2 所示。由表 2 中所给 ZMO 在不同 χ 值下的能带参数和 CdTe 的能带参数^[24](电子亲和势取值 4.50 eV, 禁带宽度 $E_g = 1.5$ eV, 价带顶到费米能 $E_{VBM} = 0.3$ eV), 画出了 ZMO/CdTe 异质结的能带结构图, 如图 6 所示。其中 χ_1 、 χ_2 、 χ_3 及 ϕ_1 、 ϕ_2 、 ϕ_3 分别表示 $x=0$ 、0.125、0.25 时 ZMO 的电子亲和势和功函数。ZMO/CdTe 异质结达到平衡时, 由于二者的电子亲和势和功函数不同, 在界面连接处导带发生弯曲, 并形成势垒尖峰 $\Delta E_c = \chi_{\text{CdTe}} - \chi_{\text{ZMO}}$ 。随着 Mg 含量的逐渐增加, ZMO 电子亲和势 χ 值不断减小, 因此, 势垒尖峰

表 2 ZMO 在不同 x 值下的带隙、费米能级、电子亲和势与功函数的值						
Table 2 Bandgap, Fermi level, electron affinity and work function of ZMO with different x						
x	$\Delta E_c/\text{eV}$	E_g/eV	E_f/eV	χ/eV	ϕ/eV	
0	-0.03	3.32	2.48	4.53	5.31	
0.0625	0.06	3.41	2.53	4.44	5.18	
0.125	0.13	3.48	2.86	4.37	4.99	
0.1875	0.29	3.65	2.91	4.21	4.84	
0.25	0.47	3.82	3.02	4.03	4.83	

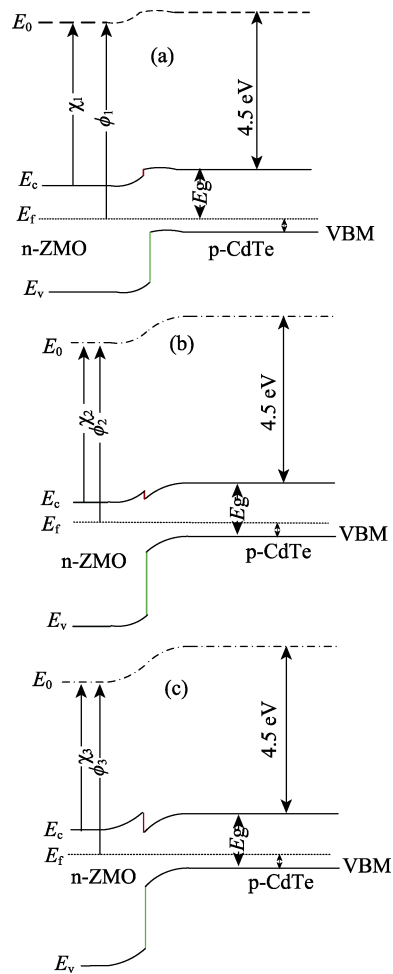


图 6 ZMO/CdTe 异质结能带结构
Fig. 6 Schematic energy band diagram of ZMO/CdTe Layers (a) $x=0$; (b) $x=0.125$; (c) $x=0.25$

ΔE_c 会从 $x=0$ 时的 -0.03 eV 增加到 $x=0.25$ 时的 0.47 eV, 具体数值见表 2。

2.2.2 ZMO/CdTe 电池输出特性

在太阳能电池器件中 p-n 结界面处的势垒对载流子的传输和复合有重要影响, 薄膜材料中的电子和空穴越过势垒后在界面处复合。实验结果^[12]表明: ZMO 作为 CIGS 太阳能电池的窗口层, 当 ZMO/CIGS 导带底差值为 $0.3 \sim 0.4$ eV 时, 界面处的缺陷复合最低, CIGS 电池的转换效率达到最高。为了研究

ZMO/CdTe 导带底差值为多少电子伏时, CdTe 电池的光电转换效率最高, 本文采用 SCAPS 软件对 ZMO/CdTe 太阳电池的输出特性进行了模拟计算。器件的性能参数见表 3, 器件的光照 $J-V$ 特性如图 7 所示。其中, CdS/CdTe 电池转换效率为 15.06%, 与本课题组的近期实验结果^[25]接近, 同其他文献^[26]中采用 SCAPS 计算的结果也几乎相同, 表明对薄膜的各项参数和缺陷的设置比较合理。为了研究 ZMO 用作 CdTe 窗口层的效果和作用, 保持电池的其它各膜层结构及参数不变, 仅用 ZMO 替代 CdS。从表 3 中的结果可以看出, 开路电压 V_{oc} 随着 Mg 组分 x 的增加而逐渐升高, 当 $x=0.25$ 时, V_{oc} 高达 928 mV。分析认为, ZMO 中 Mg 浓度的增加导致其费米能级向真空能级移动, 功函数减小, 与 CdTe 功函数的差异增大, 有利于提高器件的开路电压。然而, 短路电路密度与 x 却不是呈单调规律变化, 当 $0 \leq x \leq 0.125$, 短路电流密度 J_{sc} 从 27.88 mA/cm² 增加到 28.36 mA/cm², 填充因子 FF 也从 75.08% 增加到 77.02%, 使得电池的转换效率在 $x=0.125$ 时达到 18.29%。当 x 进一步增加到 0.1875 时, 电池的短路电流密度开始减小, 填充因子也急剧下降到 53%, 使得转换效率下降到 12.42%。尤其需要注意的是当

x 增加到 0.25 时, 电池的 J_{sc} 剧烈下降两个数量级, 仅为 0.2 mA/cm², FF 仅有约 8%, 使得电池效率低至 0.01%。

为了更细致地分析电池输出特性变化的根本原因, 对比分析表 3 中 6 种电池器件对应的光谱响应曲线, 如图 8 所示。由图 8 可知, 有 ZMO($0 \leq x \leq 0.1875$) 的 CdTe 电池在 300~500 nm 范围的光谱响应明显高于 CdS/CdTe 结构的电池, 并且光谱响应随着 x 的增加而略有增大; 但当 $x=0.1875$ 时, 光谱响应显著降低, 尤其当 x 为 0.25 时, 减小到几乎为零。这个变化规律与电池的光照短路电流密度的变化规律完全一致。

结合前面 ZMO/CdTe 异质结的能带图, 进一步分析器件性能变化的内在原因和机制。对于 CdTe 薄膜太阳电池, 器件对光子的吸收分离能力既与窗口层的带隙有关, 还与窗口层材料和 CdTe 在导带连接处的导带差密切相关。窗口层的带隙越宽越有利于短波光子的收集利用; 而 ZMO/CdTe 在导带连接处形成的势垒尖峰 ΔE_c 不仅会影响光生载流子在界面处的复合, 还会影响 CdTe 内的电子向 ZMO 的输运。 ΔE_c 如果太高(>0.2 eV)则对于 CdTe 内的电子是势垒, 会影响光生电子向 ZMO 的正常输运, 使电池的等效串联电阻增加, 短路电流密度下降(对应 $x>0.1875$ 的情况); 如果 ΔE_c 较低(<0.1 eV) 则会增加电子和空穴在界面处的复合几率, 降低开路电压(对应 $x<0.125$ 的情况)。适当的导带差应既能降低光生电子在 ZMO/CdTe 界面的复合, 同时对电子的传输亦无明显阻碍作用。因此结合器件的 $J-V$ 特性得出, ZMO/CdTe 界面形成适当的导带偏移量(约 0.13 eV) 对制备高效率的 CdTe 薄膜太阳电池起着至关重要的作用。

表 3 SCAPS 模拟 CdS/CdTe 和 ZMO/CdTe 电池的输出参数
Table 3 Performances of the CdS/CdTe and ZMO/CdTe solar cells with SCAPS

	CdS	Zn _{1-x} Mg _x O				
		$x=0$	$x=0.0625$	$x=0.125$	$x=0.1875$	$x=0.25$
V_{oc}/mV	821	825	829	837	838	928
$J_{sc}/(\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2})$	24.34	27.88	28.22	28.36	27.95	0.20
$FF/\%$	75.32	75.08	76.77	77.02	53.05	8.27
$\eta/\%$	15.06	17.28	17.98	18.29	12.42	0.01

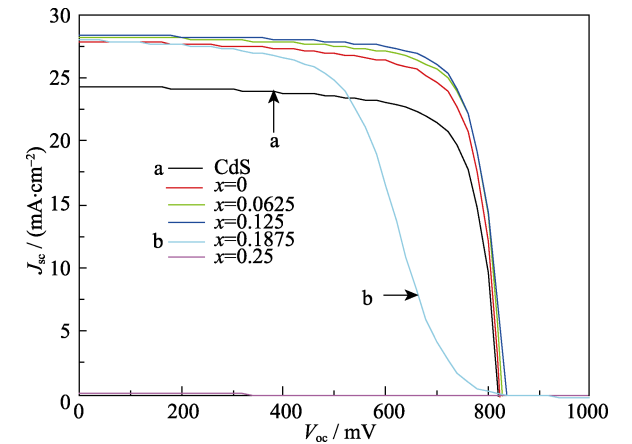


图 7 CdS/CdTe 和 ZMO/CdTe 电池的 $J-V$ 特性曲线
Fig. 7 $J-V$ curves of CdTe solar cells with CdS and ZMO as window layers

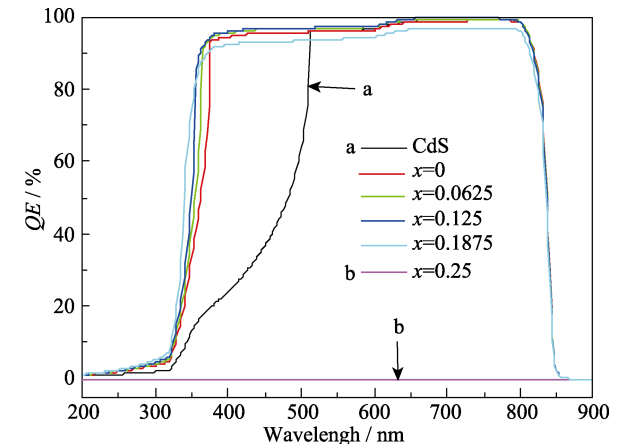


图 8 CdS/CdTe 和 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ /CdTe 电池的量子效率
Fig. 8 Quantum efficiency of CdTe solar cells with CdS and $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ as window layers

3 结论

采用第一性原理广义梯度近似+ U 方法计算了纤锌矿结构 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ ($0 \leq x \leq 0.25$) 合金的能带结构, 结果表明: 通过改变 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 中 Mg 组分 x 可以实现对其能带结构进行有效调制。随着 Mg 掺杂浓度的增加, ZMO 带隙增宽, 由 $x=0$ 时的 3.32 eV 增加到 $x=0.25$ 时的 3.82 eV。SCAPS 模拟 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 用在 CdTe 太阳能电池窗口层中的计算结果表明: 当 Mg 在 $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ 中的组分 $x=0.125$ 即 ZMO/CdTe 导带差约为 0.13 eV 时, CdTe 太阳能电池的光电转换效率最高, 达到 18.29%。因此, 在 CdTe 太阳能电池中, 窗口层材料的带隙及窗口层与 CdTe 层界面之间的导带偏移量对其光电转换效率有着重要的影响, 带隙越宽越有利于短波光子的收集, 合适的导带偏移量既能降低界面之间的缺陷复合又不影响载流子的运输。模拟计算结果为实验制备高效率的 CdTe 太阳能电池提供了理论指导和优化方向。

参考文献:

- [1] T MAKINO T, Y SEGAWA Y, M KAWASAKI M, *et al.* Band gap engineering based on $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ and $\text{Cd}_y\text{Zn}_{1-y}\text{O}$ ternary alloy film. *Appl. Phys. Lett.*, 2001, **78**(9): 1237–1239.
- [2] OZGUR U, ALIVOV YA I, LIU C, *et al.* A comprehensive review of ZnO materials and devices. *Appl. Phys. Lett.*, 2005, **98**(4): 1–11.
- [3] OHTOMO A, KAWASAKI M, KOIDA T, *et al.* $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ as a II–VI widegap semiconductor alloy. *Appl. Phys. Lett.*, 1998, **72**(19): 2466–2468.
- [4] KUMAR P, MALIK H K, GHOSH A, *et al.* Bandgap tuning in highly c -axis oriented $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ thin films. *Appl. Phys. Lett.*, 2013, **102**(22): 1–5.
- [5] HUANG D, SHANG Y Z, CHEN D H. First-principles calculation on the electronic structure and absorption spectrum of the wurtzite $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ alloys. *Acta Phys. Sin.*, 2008, **57**(02): 1078–1083.
- [6] ZHANG X D, GUO M L, LIU C L, *et al.* First-principles investigation of electronic and optical properties in wurtzite $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$. *Eur. Phys. B*, 2008, **62**(4): 417–421.
- [7] BAI L N, LING J S, JIANG Q. Optical and electronic properties of wurtzite structure $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ alloys. *Chin. Phys. Lett.*, 2011, **28**(11): 1–4.
- [8] THANGAVEL R, PRATHIBA G, NAANCI B A, *et al.* First principle calculations of the ground state properties and structural phase transformation for ternary chalcogenide semiconductor under high pressure. *Computational Materials Science*, 2007, **40**(2): 193–200.
- [9] FAN X F, SUN H D, SHEN Z X. A first-principle analysis on the phase stabilities, chemical bonds and band gaps of wurtzite structure $\text{A}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ alloys ($\text{A} = \text{Ca}, \text{Cd}, \text{Mg}$). *Condens. Matter. Phys.*, 2008, **20**(23): 221–235.
- [10] WENG Z Z, ZHANG J M, HUANG Z G, *et al.* Effect of oxygen vacancy defect on the magnetic properties of Co-doped ZnO. *Chin. Phys. Lett.*, 2011, **20**(2): 422–427.
- [11] CHO J Y, KIM I K, JUNG I O, *et al.* Effects of Mg doping concentration on the band gap of $\text{ZnO}/\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ multilayer thin films prepared using pulsed laser deposition method. *Journal of Electroceramics*, 2009, **23**(2/3/4): 442–446.
- [12] TAKASHI MINEMOTO, YASUHIRO HASHIMOTO, TAKUYA SATOH, *et al.* Cu(In, Ga)Se₂ solar cells with controlled conduction band offset of window/ Cu(In,Ga)Se₂ layers. *Journal of Applied Physics*, 2001, **89**(12): 8327–8330.
- [13] 张静全. 硫化镉及相关化合物多晶薄膜与碲化镉太阳能电池研究. 成都: 四川大学博士学位论文, 2002.
- [14] SEGALL M D, LINDAN P J D, PROBERT M J, *et al.* First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code. *Phys. Condens. Matter.*, 2002, **14**: 2717–2744.
- [15] ZHAO Y, TRUHLAR D G. Construction of a generalized gradient approximation by restoring the density gradient expansion and enforcing a tight Lieb–Oxford bound. *The Journal of Chemical Physics*, 2008, **128**(18): 1–8.
- [16] FISCHER T H, ALMLOF J. General methods for geometry and wave function optimization. *Journal of Physical Chemistry. Chem.*, 1992, **96**(24): 9768–9774.
- [17] HE X, HE L, TANG M J, *et al.* Effects of the vacancy point-defect on electronic structure and optical properties of LiF under high pressure: a first-principles investigation. *Acta Phys. Sin.*, 2010, **60**(2): 2–10.
- [18] ODAKA H, IWATA S, TAGA N, *et al.* Study on electronic structure and optoelectronic properties of indium oxide by first-principles calculations. *Japanese Journal of Applied Physics*, 1997, **36**(36): 5551–5554.
- [19] SHEETZ R M, PONOMAREVA I, RICHTER E, *et al.* Defect-induced optical absorption in the visible range in ZnO nanowires. *Physical Review B Condensed Matter.*, 2009, **80**(19): 195314–1–4.
- [20] SHUKLA G, KHARE A. Effect of Mg doping and substrate temperature on the properties of pulsed laser deposited epitaxial $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ thin films. *Appl. Phys. A*, 2009, **96**(3): 713–719.
- [21] USUDA M, HAMADA N, KOTANI T, *et al.* All-electron GW calculation based on the LAPW method: application to wurtzite ZnO. *Phys. Rev. B*, 2002, **66**(12): 1–10.
- [22] BURGELMAN M, NOLLET P, DEGRAVE S. Modelling polycrystalline semiconductor solar cells. *Thin Solid Films*, 2000, **362**(99): 527–532.
- [23] HENINI M. Semiconductors: Data Handbook: Otfried Madelung(ed.); Springer, ISBN3-540-40488-0. *Microelectronics Journal*, 2004, **35**(8): 685.
- [24] GUO J, WANG W, LIU G, *et al.* Investigation of CdTe/CdS heterojunction characteristics. *Acta Energetica Solaris Sinica*, 2003, **24**(2): 269–272.
- [25] CHEN Y L, WANG F G, WU L L. Properties of indium doped CdS thin films and their photovoltaic application in CdTe solar cells. *Chalcogenide Letters*, 2017, **14**(1): 1–9.
- [26] HUANG C H, CHUANG W J. Dependence of performance parameters of CdTe solar cells on semiconductor properties studied by using SCAPS-1D. *Vacuum*, 2015, **118**: 32–37.