

纳米硅 (nc-Si: H) / 晶体硅 (c-Si) 异质结太阳能电池 的数值模拟分析^{*}

胡志华¹⁾²⁾ 廖显伯¹⁾ 曾湘波¹⁾ 徐艳月¹⁾ 张世斌¹⁾ 刁宏伟¹⁾ 孔光临¹⁾

¹⁾(中国科学院半导体研究所, 凝聚态物理中心, 表面物理国家重点实验室, 北京 100083)

²⁾(云南师范大学太阳能研究所, 昆明 650092)

(2002 年 5 月 14 日收到; 2002 年 6 月 19 日收到修改稿)

运用美国宾州大学发展的 AMPS 程序模拟分析了 n 型纳米硅 (n⁺-nc-Si: H) / p 型晶体硅 (p-c-Si) 异质结太阳能电池的光伏特性. 分析表明, 界面缺陷态是决定电池性能的关键因素, 显著影响电池的开路电压 (V_{oc}) 和填充因子 (FF), 而电池的光谱响应或短路电流密度 (J_{sc}) 对缓冲层的厚度较为敏感. 对不同能带补偿 (bandgap offset) 的情况所进行的模拟分析表明, 随着 ΔE_c 的增大, 由于界面态所带来的开路电压和填充因子的减小逐渐被消除, 当 ΔE_c 达到 0.5 eV 左右时界面态的影响几乎完全被掩盖. 界面层的其他能带结构特征对器件性能的影响还有待进一步研究. 最后计算得到了这种电池理想情况下 (无界面态、有背面场、正背面反射率分别为 0 和 1) 的理论极限效率 $\eta_{max} = 31.17\%$ (AM1.5, 100 mW/cm², 0.40—1.10 μ m 波段).

关键词: nc-Si: H / c-Si 异质结, 太阳能电池, 计算机模拟

PACC: 7340L, 8630J, 6185

1. 引 言

晶体硅太阳能电池具有转换效率高, 生产技术成熟的优点, 一直以来占据太阳能电池世界总产量的绝大部分. 但传统晶体硅太阳能电池生产中的高温 (900 °C 以上) 扩散制结工艺又限制了生产效率的提高和产品成本的进一步降低^[1]. 多年来各国科学家一直在努力研究探索低成本高产量的高效薄膜太阳能电池制造技术. 氢化非晶硅 (a-Si: H) 太阳能电池生产工艺温度较低 (400 °C 以下), 便于大规模生产, 因此受到各国科学家的普遍重视并得到迅速发展^[2]. 但是, 氢化非晶硅 (a-Si: H) 太阳能电池的光致退化 (Staebler-Wronski 效应)^[3,4] 问题始终没有得到很好的解决, 同时其光电转换效率还有待进一步提高^[5]. 一条可行的途径是用宽带隙的 a-Si 合金作为窗口层或发射极, 单晶硅^[6]、多晶硅片作衬底^[7,8], 形成所谓的异质结太阳能电池. 这种电池既利用了薄膜制造工艺优势同时又发挥了晶体硅和非晶硅的材料性能特点, 具有实现高效低成本硅太阳能电池的发展前景.

Hamakawa^[9] 等率先报道了采用这种结构获得的 12% (nip-a-Si: H / mp-c-Si 叠层结构) 的光电转换效率, Tanaka 等还创下这种电池光电转换效率 18.1% 的最高记录 (p-a-Si: H / a-Si: H / n-c-Si 结构)^[10].

氢化纳米硅薄膜作为一种有望实现硅基光电集成的低维量子功能材料近年来成为研究的热点^[11,12]. 这种材料由纳米尺度的硅晶粒和作为晶粒间界的非晶硅相组成, 又称为双相 (diphase) 结构, 本质上属于非晶/微晶相变过渡区材料. 由于量子尺寸效应, 这种材料的有效带隙接近甚至高于非晶硅的光学带隙. 其光电特性依赖于结晶比和晶粒的大小以及氢原子含量. 典型的氢化纳米硅 (结晶比接近 50%) 光敏性较差, 光暗电导比小, 一般被认为不能作为光伏器件的活性层, 因此也很少有这方面的研究报告^[13]. 然而我们认为, 这种材料相比非晶硅而言具有结构稳定性好、电导率高以及带隙可剪裁的优点, 容易实现规模生产 (制备方法有 PECVD, ECR-CVD, HW-CVD, VHF-CVD, 溅射等), 是理想的太阳能电池掺杂窗口层材料. 甚至还可以通过控制结晶比、平均晶粒尺寸以及氢原子含量等来获得可用于光伏器

^{*} 国家重点基础研究发展规划 (973) (批准号: G2000028201) 资助的课题.

件活性层的高稳定、高光暗电导比的可用于硅基薄膜太阳能电池活性层的纳米硅薄膜材料,这方面的研究正在进行之中,研究进展将另文报道。

界面问题是异质结构的核心,其中有不少实验现象和基本物理问题还有待进一步研究,如异质结器件中 $J-V$ 曲线拐点现象^[14] (Rollover 或 S-shape 现象)、能带补偿以及电子输运过程等. 对异质结界面的分析有助于工艺的改进和器件质量的提高。

本文运用美国宾州大学发展的 AMPS 程序系统分析了 $n^+nc\text{-Si}; H/p\text{-c-Si}$ 异质结太阳能电池中界面缺陷态、能带补偿 (band offset) 以及本征非晶硅缓冲层的厚度对电池光伏特性的影响. 最后还给出了这种电池 31.17% ($J_{sc}=41.537\text{mA}/\text{cm}^2$, $FF=0.868$, $V_{oc}=0.864\text{V}$) 的理论效率极限 (AM1.5, $100\text{mW}/\text{cm}^2$, 0.40—1.10 μm 波段)。

2. 物理模型及模拟方法

2.1. 器件结构

模拟分析的太阳能电池结构如图 1 所示,衬底为 250 μm 厚的 p-型晶体硅 (掺杂浓度为 $1.0 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$), n^+ -型纳米硅厚度为 10nm (掺杂浓度为 $1.0 \times$

10^{19}cm^{-3}), n^+ -型纳米硅和晶体硅间的本征非晶硅缓冲层 (buffer) 厚度在 5—120nm 之间变化。

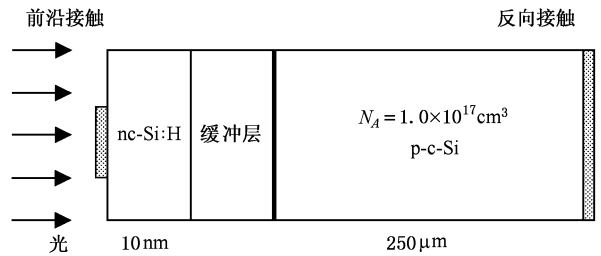


图 1 模拟器件的结构示意图

除理论极限效率计算之外,正背面反射率分别为 0.1 和 0,无陷光结构和背场 (BSF)。

我们知道,影响异质结器件光电特性的核心问题是界面缺陷电子态. 我们在 $n^+nc\text{-Si}; H(a\text{-Si}; H)$ 和 $c\text{-Si}$ 之间引入一层“界面层”,厚度为 1nm (约 4 个原子层),悬键态体密度约在 $10^{15} - 10^{19}\text{cm}^{-3}$ 之间 (由此可推算出界面态面密度 N_{it} 为 $10^8 - 10^{12}\text{cm}^{-2}$ 之间),在带隙中呈双 Gaussian 分布,电子空穴俘获截面分别为 $1 \times 10^{-14}\text{cm}^2$, $1 \times 10^{-15}\text{cm}^2$ (类施主态) 和 $1 \times 10^{-15}\text{cm}^2$, $1 \times 10^{-14}\text{cm}^2$ (类受主态)^[15]。

正背面电极为欧姆接触,纳米硅、非晶硅和晶体硅的材料参数以及欧姆接触的载流子界面复合速率

表 1 模拟计算中所用参数

| 参数 | nc-Si; H | i-a-Si; H | c-Si |
|--------------------------------------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|
| 厚度 /nm | 10 | 0—120 | 250000 |
| 电子亲和势 χ/eV | 3.45—4.00 | 3.45—4.00 | 4.05 |
| 迁移率带隙 /eV | 1.80 | 1.80 | 1.12 |
| 光学带隙 /eV | 1.60 | 1.72 | 1.12 |
| 相对介电常数 ϵ | 11.90 | 11.90 | 11.90 |
| 有效态密度 N_C , | 2.5×10^{20} | 2.5×10^{20} | 2.8×10^{19} |
| $N_V /(\text{cm}^{-3} eV^{-1})$ | 2.5×10^{20} | 2.5×10^{20} | 1.04×10^{19} |
| 电子迁移率 $\mu_n /(\text{cm}^2 V^{-1} s^{-1})$ | 20 | 1.0 | 1350 |
| 空穴迁移率 $\mu_p /(\text{cm}^2 V^{-1} s^{-1})$ | 2.0 | 0.1 | 450 |
| 带尾态密度 $/\text{cm}^{-3} eV^{-1}$ | 10^{21} | 10^{21} | 10^{14} |
| Urbach 尾宽 /eV | $0.05(E_D) \cup 0.03(E_A)$ | $0.05(E_D) \cup 0.03(E_A)$ | $0.01(E_D) \cup 0.01(E_A)$ |
| 电子俘获截面 $/\text{cm}^{-2}$ | 1×10^{-17} | 1×10^{-17} | 1×10^{-17} |
| 空穴俘获截面 $/\text{cm}^{-2}$ | 1×10^{-15} | 1×10^{-15} | 1×10^{-15} |
| 隙间定域态分布 | 9.5×10^{18} 双高斯分布 | 5×10^{16} 双高斯分布 | 10^{12} 平均分布 |
| 电子俘获截面 $/\text{cm}^{-2}$ | 1×10^{-15} | 1×10^{-15} | 1×10^{-15} |
| 空穴俘获截面 $/\text{cm}^{-2}$ | 1×10^{-14} | 1×10^{-14} | 1×10^{-14} |
| 掺杂浓度 $/\text{cm}^{-3}$ | $N_D = 1 \times 10^{19}$ | | $N_A = 1 \times 10^{17}$ |

等模拟参数见表 1. 模拟光照条件为 AM1.5, 100mW/cm², 有效波段范围 0.4—1.1 μ m (如不考虑声子助光吸收扩展, 硅的长波光吸收限为 1.107 μ m).

2.2 Poisson 方程和连续性方程

任何双端光电子器件, 无论是简单的肖特基二极管还是更为复杂的多层结构, 只要正确标识了其各层半导体的能带结构和电子态密度分布(DOS)以及电子亲和势, 在稳定条件下载流子服从 Fermi-Dirac 统计分布规律. 自由载流子浓度 ($n(x)$, $p(x)$), 受陷电子和受陷空穴浓度 ($n_t(x)$, $p_t(x)$) 以及电离施主和电离受主浓度 (N_D^+ , N_A^-) 等空间电荷的一维空间分布可表示为

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

(1) 式为变形的一维 Poisson 方程^[13], 式中 Ψ 是某点单位正电荷静电势 (Ψ') 的负值 (或单位负电荷的静电势 $-\Psi'$), 电场强度 ξ 自然就等于 $d\Psi/dx$ (而不是一 $d\Psi'/dx$), 这是 AMPS 程序为了数值计算方便根据相应的边界条件所做的变形. 计算中 Ψ 总是器件中各点的真空能级 (和费米能级间通过功函数 W 或与导带间通过电子亲和势 χ 联动) 相对于器件右端欧姆接触面真空能级的差值, 单位为 eV.

AMPS 可以在态密度 (DOS) 和少子寿命 (lifetime) 两种半导体电子学描述模式下对器件进行直流模拟. 我们在模拟中用的是 DOS 模式. 这种模式下, 半导体的电子态分为导带 (价带) 扩展态, 导带 (价带) 带尾定域态以及隙间定域态. 带尾定域态主要由于键角畸变引起, 隙间定域态主要由悬键造成. 带尾定域态密度用指数函数描述, 隙间定域态密度呈双高斯函数分布, 分别对应类施主态和类受主态, 二者呈正相关关系, 也就是说类施主态在下, 类受主态在上. 对隙间定域态密度, AMPS 还提供了一种平均分布的背景模式. 对于非晶硅, 我们用指数函数和双高斯分布函数分别描述带尾定域态和隙间定域态. 对于晶体硅和晶粒尺寸大于 1cm ($\gg 250\mu$ m) 的浇铸多晶硅, 我们用指数函数的带尾定域态和平均分布的隙间定域态 (也分类施主和类受主) 分布模式来描述缺陷和杂质所带来的影响. 施主和受主掺杂全电离, 即 $N_D^+ = N_D$, $N_A^- = N_A$.

(1) 式中各项可表示为

$$n(x) = N_C F_{1/2} \left[\frac{E_F - E_C}{kT} \right],$$

$$p(x) = N_V F_{1/2} \left[\frac{E_V - E_F}{kT} \right],$$

$$n_t(x) = \int_{E_V}^{E_C} g_A(E) f_A(E) dE,$$

$$p_t(x) = \int_{E_V}^{E_C} g_D(E) f_D(E) dE.$$

式中 N_C 和 N_V 为导带底和价带顶的有效态密度, $F_{1/2}$ 为费米积分, $g_D(E)$ ($g_A(E)$) 为 E_V , E_C 之间类施主定域态 (类受主定域态) 总的分布函数, 包括前面所提到的指数分布、平均分布和高斯分布. $f_D(E)$ ($f_A(E)$) 代表电子 (空穴) 占据能量为 E 的类施主定域态 (类受主定域态) 的概率.

为了得到器件的 $J-V$ 特性, 必须计算器件在各种电压偏置条件下的电流输出, 对太阳能电池还要计算光照条件下的电流输出. 根据电子输运理论, 电子空穴电流密度可表示为

$$J_n(x) = q \mu_n n(x) \left[\frac{dE_{F_n}}{dx} \right],$$

$$J_p(x) = q \mu_p p(x) \left[\frac{dE_{F_p}}{dx} \right],$$

式中 E_{F_n} 和 E_{F_p} 分别为电子和空穴的准费米能级. 同时还有

$$\frac{1}{q} \left[\frac{dJ_n}{dx} \right] = -G_{\text{op}}(x) + R(x), \quad (2)$$

$$\frac{1}{q} \left[\frac{dJ_p}{dx} \right] = G_{\text{op}}(x) - R(x). \quad (3)$$

(2) 式和 (3) 式称为连续性方程, 式中 $G_{\text{op}}(x)$ 表示光生载流子产生速率. $G_{\text{op}}(x)$ 表示为

$$G_{\text{op}}(x) = -\frac{d}{dx} \sum_i \Phi_i^{\text{FOR}}(\lambda_i) + \frac{d}{dx} \sum_i \Phi_i^{\text{REV}}(\lambda_i),$$

其中

$$\begin{aligned} \Phi_i^{\text{FOR}}(\lambda_i) &= (1 - R_F) \Phi_{0i}(\lambda_i) \{ \exp[-\alpha(\lambda_i)x] \\ &\quad + R_F R_B \exp[-2\alpha(\lambda_i)L \\ &\quad - \alpha(\lambda_i)x] + \dots \}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Phi_i^{\text{REV}}(\lambda_i) &= R_B \Phi_{0i}(\lambda_i) \{ \exp[-\alpha(\lambda_i)L] \\ &\quad \times \exp[-\alpha(\lambda_i)(L-x)] + \dots \} \end{aligned}$$

表示入射和背反射单色光 λ_i 在 x 点的光子通量, $\alpha(\lambda_i)$ 为光吸收系数, R_F 为正面光反射率, R_B 为背面光反射率. 在我们的模拟计算中, 除理论极限效率计算之外, R_F 和 R_B 分别取值 0.1 和 0.

(2) 式和 (3) 式中的 $R(x)$ 表示载流子复合速率. AMPS 同时考虑了直接复合 R_D (又称 band-to-

band 或 intrinsic 复合)和间接复合 R_I (又称 shockley-read-hall 俘获发射复合)两种基本的复合机制^[6]。

2.3 边界条件和数值计算方法

Poisson 方程(1)和连续性方程(2), (3)式是相互关联的非线性微分方程组, 一般难予分析求解, 但在确定的边界条件下可以通过数值计算求解出 $\Psi(x)$, E_{F_n} 和 E_{F_p} (或 $\Psi(x)$, $n(x)$ 和 $p(x)$), 由此可以求出器件的各种工作参数. AMPS 将器件分成若干个计算单元(Δc^X), 并保证每一界面处计算单元(ΔX)不大于 0.2nm, 运用 Newton-Raphson 方法进行数值计算. 边界条件为^[16]

$$\begin{aligned} \Psi(0) &= \Psi_0 - V, \\ \Psi(L) &= 0, \\ J_p(0) &= -qS_{p0}[p_0(0) - p(0)], \\ J_p(L) &= qS_{pL}[p(L) - p_0(L)], \\ J_n(0) &= qS_{n0}[n(0) - n_0(0)], \\ J_n(L) &= -qS_{nL}[n_0(L) - n(L)]. \end{aligned}$$

式中 V 为偏置电压, S_{n0} , S_{p0} , S_{nL} 和 S_{pL} 分别表示电子和空穴在左($x=0$)右($x=L$)电极界面的表面复合速率.

在我们的计算中左电极界面(也就是 n^+ 型纳米硅一侧的电极界面)的电子空穴界面复合速率设定为 $1 \times 10^5 \text{ cm/s}$, 右电极界面(也就是 p 型晶体硅一侧的电极界面)的电子空穴界面复合速率设定为 $1 \times 10^7 \text{ cm/s}$.

3. 结果分析与讨论

3.1 界面态对光伏特性的影响

通过插入模拟界面层, 图 2 所示为计算所得不同界面态密度情况下, $n^+nc\text{-Si}:H/p\text{-c-Si}$ 太阳电池在 AM1.5, 100mW/cm^2 模拟光照条件下的 $J-V$ 特性曲线. 可以看出, 界面态对光伏特性的影响很大, 尤其是填充因子(FF)和开路电压(V_{oc}). 在不考虑界面态时, 电池效率和填充因子分别高达 19%和 0.841(无陷光结构和背场). 随着界面态密度的增加, 除短路电流以外, 电池性能急剧下降, 界面态密度为 $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 时, 电池效率和填充因子分别下降为 6.6%和 0.618, 开路电压却只有 0.323V. 这主要是由于界面缺陷态引起耗尽区的产生复合电流增

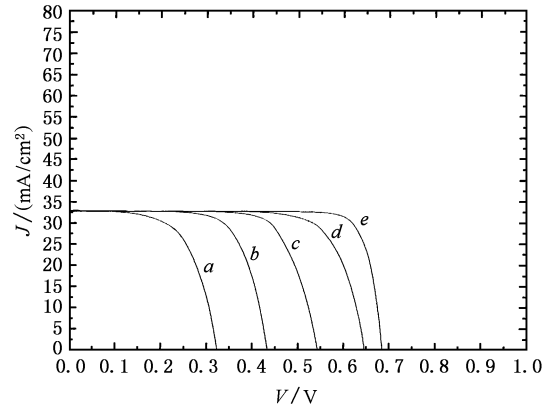


图2 不同界面态密度的太阳电池 $J-V$ 曲线 曲线 a: $N_{INT}=5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ($\eta = 6.6\%$, $FF = 0.618$, $V_{oc} = 0.323\text{V}$); b: $N_{INT}=5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ($\eta = 10.1\%$, $FF = 0.710$, $V_{oc} = 0.433\text{V}$); c: $N_{INT}=5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ ($\eta = 13.2\%$, $FF = 0.740$, $V_{oc} = 0.544\text{V}$); d: $N_{INT}=5 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ ($\eta = 16.0\%$, $FF = 0.753$, $V_{oc} = 0.646\text{V}$); e: With no interface states ($\eta = 19.0\%$, $FF = 0.841$, $V_{oc} = 0.684\text{V}$)

大, 表现为反向漏电电流增大, 从图 3 可看出, 反向漏电电流随界面态密度增加而增加, 而且当界面态密度从 $5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 变为 $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 时, 反向漏电电流增长近三个数量级. 根据太阳电池的理想二极管模型, 开路电压与反向饱和电流 J_0 之间的关系为

$$V_{oc} = \frac{kT}{q} [\ln(J_{sc}/J_0) + 1].$$

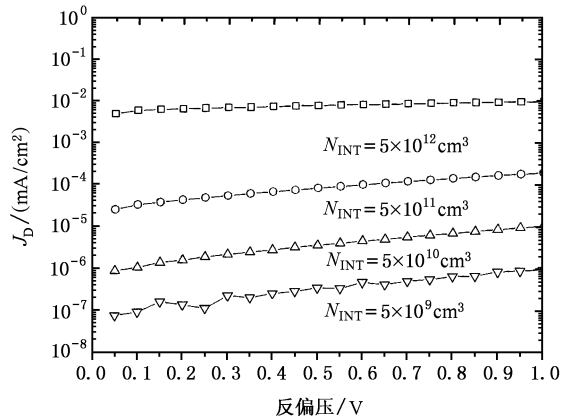


图3 不同界面态密度太阳电池的反向暗电流

填充因子 FF 与 J_0 间在串联电阻可以忽略的情况下也存在类似的关系式^[17]

$$FF \cong \left\{ 1 - \frac{1}{\ln(J_{sc}/J_0)} \right\} \left\{ 1 - \frac{\ln[\ln(J_{sc}/J_0)]}{\ln(J_{sc}/J_0)} \right\},$$

因此, 在 J_{sc} 不变时, J_0 的增大必然导致 V_{oc} 和 FF 的减小, 从而降低太阳电池的效率.

3.2 能带补偿(band-gap offset)的影响

异质结的能带图取决于材料对的电子亲合势、禁带宽度、导电类型、掺杂浓度以及界面态密度等多种因素。这给异质结带来了多样性,我们也因此不能像对待同质结那样,简单地由结两边费米能级的位置就能推断出能带图的主要特征。原因是界面处材料的电子亲合势不同,能带不再连续,同时界面态对结两边费米能级也有影响。

根据电子亲合势的定义,可以得到

$$\Delta E_c = \Delta \chi,$$

$$\Delta E_v = \Delta E_c - \Delta \chi.$$

$\Delta \chi$ 为 nc-Si: H(a-Si: H) 和 c-Si 的电子亲合势之差, ΔE_c 为 nc-Si: H(a-Si: H) 和 c-Si 的带隙宽度。虽然有不少关于非晶硅电子亲合势测量的报道^[9],但由于非晶硅、纳米硅薄膜的结构复杂性和多样性,使得这类参数具有一定程度的不确定性。而晶体硅参数相对比较确定,因此我们通过改变非晶硅电子亲合势来模拟能带补偿对器件光伏特性的影响。 ΔE_c 在 0.05—0.60eV 之间变化(晶体硅的电子亲合势为 4.05eV)。图 4 给出了 ΔE_c 为 0.10eV 和 0.30eV 的热平衡条件下的能带图。

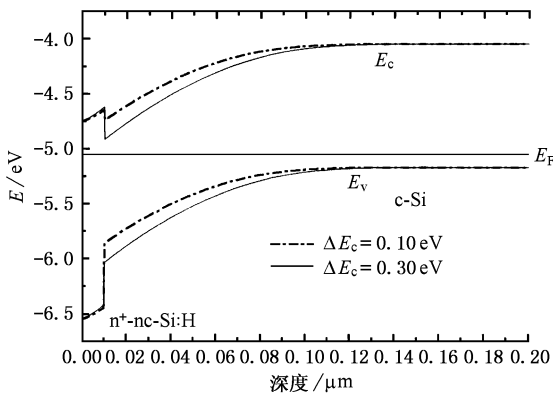


图 4 不同能带补偿情况下的能带图

平衡条件下,异质结两边空间电荷区内自建电势 V_b 可分别表示为

$$V_{bn} = \frac{qN_D x_n^2}{2\epsilon_c \epsilon_0},$$

$$V_{bc} = \frac{qN_A x_c^2}{2\epsilon_c \epsilon_0}.$$

式中 q 为电子电荷, N 为掺杂浓度, x 为空间电荷区厚度, ϵ 为介电常数,下标 n 表示纳米硅、非晶硅一

侧, c 表示晶体硅一侧。

两边空间电荷区受电中性条件的约束, $x_n N_D = x_c N_A$, 因而有

$$\frac{V_{bn}}{V_{bc}} = \frac{N_A \epsilon_c}{N_D \epsilon_n},$$

即两边的自建势反比于掺杂浓度和介电常数的乘积,低掺杂的晶体硅一侧自建势较高,空间电荷区也更厚。图 4 中可以看出,晶体硅一侧耗尽区较宽(近 150nm),能带弯曲或自建势主要在晶体硅一侧。

值得指出的是,由于异质结处存在能带不连续性,结区总的势垒高度并不等于空间电荷区自建电势之和。电流过程还应受到能带突变量,即能带补偿的影响。

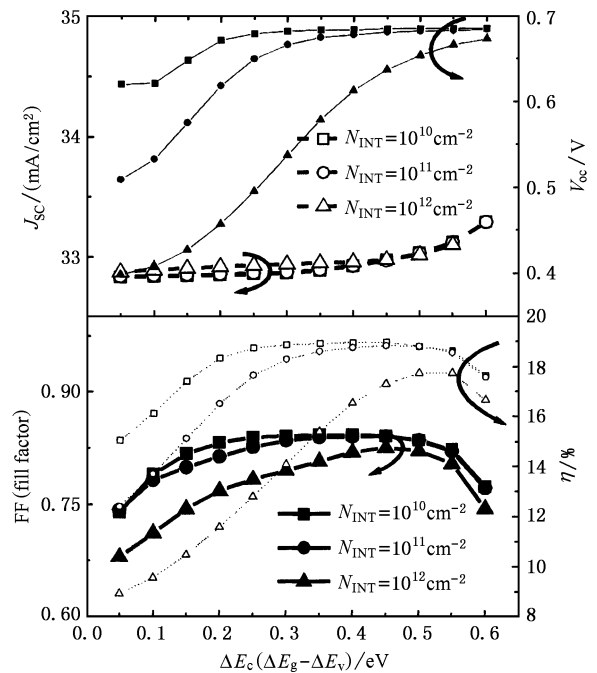


图 5 能带补偿对太阳能电池性能的影响

图 5 为计算所得光伏特性随能带补偿的变化曲线,可以看出,短路电流几乎不受能带补偿的影响,而开路电压和填充因子以及光电转换效率具有类似的变化规律。随着 ΔE_c 的增大,由于界面态所带来的开路电压和填充因子的减小逐渐被消除,当 ΔE_c 达到 0.5eV 左右时界面态的影响几乎完全被掩盖,电池参数又恢复到无界面态时的值($\eta \sim 19\%$, $V_{oc} \sim 0.68V$, $FF > 0.84$)。

随着 ΔE_c 的增大,在晶体硅一侧的模拟界面层内的费米能级由于能带弯曲而上升。当 ΔE_c 增大到 0.4—0.5eV 时,费米能级上升到远离禁带中心接近

导带底部, 界面态几乎全部饱和, 使得通过界面态的产生复合漏电流下降, 从而使光电转换效率、开路电压和填充因子重新得以恢复提高. 我们还对理想情况(即不考虑界面态)在不同的能带补偿情况下进行了模拟计算, 发现能带补偿对理想情况时短路电流、开路电压和填充因子均无影响, 说明能带补偿是通过界面态来对器件产生影响的.

关于 nc-Si:H/c-Si 异质结的能带补偿, 尚未见报道. 但对于 (a-Si:H)/c-Si 异质结, 内光发射测量结果支持能带主要补偿在价带的观点, 而根据非晶硅、纳米硅电子亲和势的测量结果看似应该主要补偿在导带, 因此尚无统一认识^[13].

界面层的其他能带结构特征对器件性能的影响还有待进一步研究.

3.3 本征非晶硅层厚度的影响

在 n⁺-a-Si:H/c-Si pn 结中插入本征非晶层有助于电池性能的提高^[9, 18], Tanaka 小组正是采用这种结构获得了 18.1% 的光电转换效率, 并把这种电池称为 HIT (heterojunction with intrinsic thin-layer) 太阳能电池.

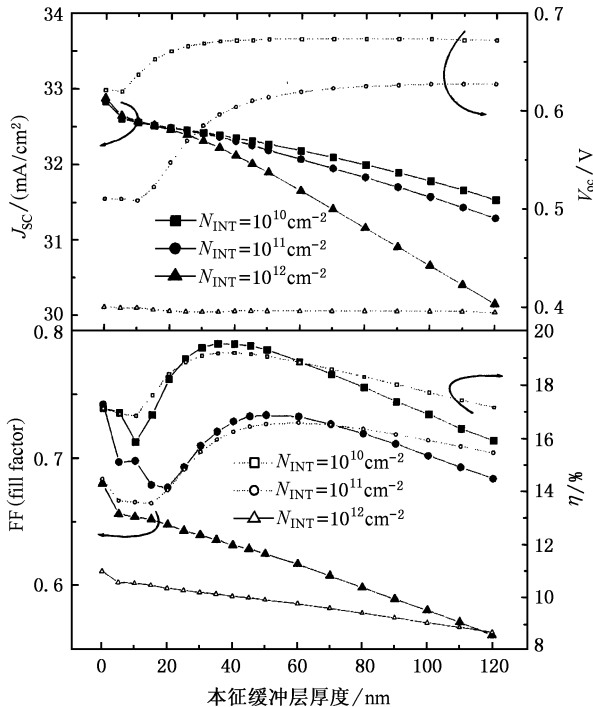


图 6 本征缓冲层厚度对太阳能电池性能的影响

图 6 是计算得到的不同界面态密度情况下电池光伏特性随本征非晶硅缓冲层厚度的变化. 填充因

子和开路电压的变化趋势与界面态密度有关, 当界面态密度小于 10^{11} cm^{-2} 时, 二者都存在极大值以及相应的优化厚度 (30—40nm), 这一结果和 Tanaka 和 Anderson 等人的实验结果定性吻合. 而当界面态密度达到 10^{12} cm^{-2} 量级时, 非晶硅本征层的引入只能使电池性能变坏.

因此, 可以推断, 通过适当引入钝化工艺, 如氢稀释等离子体硅烷分解或适量掺入卤族元素 (如 F) 等手段可以使 nc-Si:H:F/c-Si 界面的缺陷态密度降低到低于 10^{11} cm^{-2} 的数量级.

优化厚度的存在说明有相反过程在起作用, 一方面开路电压随本征非晶硅厚度增加而提高, 而另一方面短路电流却随缓冲层厚度的增加而单调下降. 这是由于非晶硅层的短波吸收增加, 而相应的光生载流子又得不到有效的收集 (非晶硅的载流子迁移率相比晶体硅较低), 从而使短路电流下降.

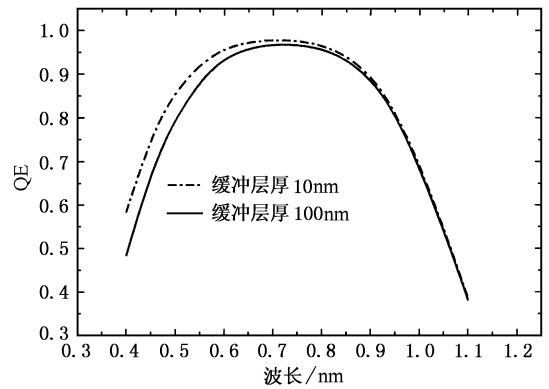


图 7 本征缓冲层厚度对太阳能电池短波响应的影响

图 7 是不同缓冲层厚度情况下电池的光谱响应曲线. 当缓冲层的厚度增加时, 电池的短波响应变差.

3.4 理论极限效率的计算

以上计算都是在没有陷光结构和背场的情况下进行的, 因此效率只能达到 19%. 而我们知道晶体硅 pn 结电池的理论效率高达 27% (AM1.5, 100mW/cm²), 实际已作到了 24.5%^[19, 20]. 那么 nc-Si:H/c-Si 电池又能达到多高的效率呢? 在一定光照条件下, 要提高效率, 惟一的途径是提高量子效率, 增加光吸收. 一方面采用绒面结构或减反射膜以减少正表面的反射损失到最低限度, 或增加电池厚度以减少硅的长波低吸收的透射损失. 然而电池厚度的增加势必又会带来光生载流子收集效率的降低, 同时还会

增加成本, 一种办法是在背面设置光反射层, 将透射光反射回来再次吸收, 另一方面, 为了进一步提高基区光生电子的收集效率, 背面场结构是最为有效的办法. 背面场既可以减少光生载流子在背表面复合损失, 同时还进一步增加整个器件的费米能级之差, 从而提高电池的开路电压和填充因子.

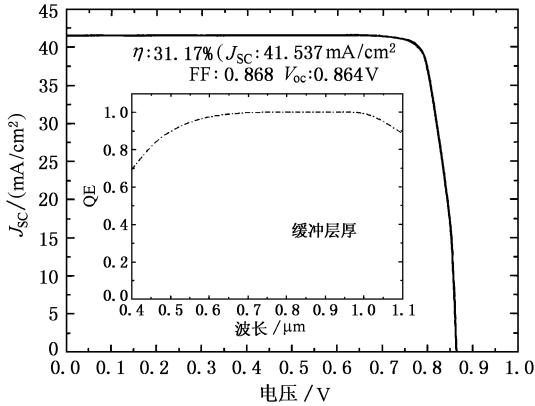


图 8 理想情况下 nc-Si:H/c-Si 的伏安特性和量子效率曲线

图 8 所示为计算所得的极限理论效率曲线(无界面态、有背面场、正背面反射率分别为 0 和 1), 最大理论效率 $\eta_{\max} = 31.17\%$ (AM1.5, $100\text{mW}/\text{cm}^2$, $0.38\text{--}1.10\mu\text{m}$ 波段), 甚至高于晶体硅的理论极限效率 27%. 这主要是由于宽带隙窗口层的引入提高了电池的开路电压和填充因子所致.

相应的量子效率曲线示于图 8 插图之中. 从量子效率曲线可看出, 大部分波段量子效率已达 100%, 只有短波和长波部分光生载流子没有被完全收集, 总的光生载流子收集效率已达 95.7%.

4. 结 论

通过数值模拟计算, 我们分析讨论了界面态密度、能带补偿以及本征非晶硅缓冲层厚度对 n^+nc^-

Si:H/p-c-Si 异质结太阳能电池性能的影响. 随着界面态密度的增加, 电池的短路电流基本不变, 开路电压、填充因子及转换效率明显降低. 原因是通过界面态的复合引起漏电电流的增加, 从而降低了开路电压和填充因子.

能带补偿也是通过界面态影响电池的光伏特性, 随着 ΔE_c 的增大(或 ΔE_v 的减小)电池性能逐渐变好. 这是由于 ΔE_c 的增大, 在晶体硅一侧的模拟界面层内的费米能级由于能带弯曲而上升. 当 ΔE_c 增大到 $0.4\text{--}0.5\text{eV}$ 时, 费米能级上升到远离禁带中心接近导带底部, 界面态几乎全部饱和, 使得通过界面态的产生复合漏电电流下降, 从而使光电转换效率、开路电压和填充因子从新得以恢复提高. 这一结果说明界面态不是单纯的载流子复合中心, 界面层的其他能带结构特征对器件性能的影响还有待进一步研究.

当界面态密度在小于 10^{11}cm^{-2} 时, 插入本征非晶硅缓冲层有助于开路电压和填充因子的提高, 二者都存在极大值以及相应的优化厚度 ($30\text{--}40\text{nm}$), 这一结果和 Tanaka 和 Anderson 等人的实验结果定性吻合. 因此, 可以推断, 通过适当引入钝化工艺, 如氢稀释等离子体硅烷分解或适量掺入卤族元素(如 F)等手段可以使 nc(a)-Si:H:F/c-Si 界面的缺陷态密度降低到低于 10^{11}cm^{-2} 的数量级.

而当界面态密度达到 10^{12}cm^{-2} 量级时, 非晶硅本征层的引入只能使电池性能变坏. 短路电流随缓冲层厚度的增加而单调下降. 这是由于非晶硅层的短波吸收增加, 而相应的光生载流子又得不到有效的收集(非晶硅的载流子迁移率相比晶体硅较低), 从而使短路电流下降.

最后我们计算得到了这种电池理想情况下(无界面态、有背面场、正背面反射率分别为 0 和 1)的理论极限效率 $\eta_{\max} = 31.17\%$ (AM1.5, $100\text{mW}/\text{cm}^2$, $0.40\text{--}1.10\mu\text{m}$ 波段).

[1] Rannels J E 1998 *Proc. of the 2nd World Conference on Photovoltaic Solar Energy Conversion*, Vienna 3296
 [2] Song Y J, Anderson W A 2000 *Solar Energy Material & Solar Cells* **64** 241
 [3] Kenji Yamamoto et al 2001 *Solar Energy Material & Solar Cells* **66** 117
 [4] Zhang Shi-Bin et al 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 111 (in Chinese) [张世斌等 2002 物理学报 **51** 111]

[5] Yang J et al 1997 *Appl. Phys. Lett.* **70** 2975
 [6] Tucci M 1999 *Solar Energy Material & Solar Cells* **57** 249
 [7] Matsumoto Y 1990 *J. Appl. Phys.* **67** 6538
 [8] Wen Ma et al 1996 *Japanese Journal of Applied Physics* **35** 640
 [9] Hamakawa Y 1983 *Japanese Journal of Applied Physics* **22** L605
 [10] Tanaka M 1992 *Japanese Journal of Applied Physics* **31** 3518
 [11] Yuliang He et al 1999 *Phys. Rev.* **B 59** 15352
 [12] Zhang S B et al 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 151 (in Chinese) [张世斌

等 2002 物理学报 **51** 151]

(Published by Academic Press)

[13] Hazra S *et al* 1999 *Jpn. J. Appl. Phys.* **38** L494

[18] Jagannathan B *et al* 1997 *Solar Energy Material & Solar Cells* **46** 289

[14] Fontoni A *et al* 2001 *Thin Solid Films* **383** 314

[19] Zhao J, Wang A, Altematt P and Green M A 1995 *Appl. Phys. Lett.* **66** 3636

[15] Gall S *et al* 1997 *Solar Energy Material & Solar Cells* **49** 157

[16] Fonash S J *et al* 1997 *A Manual For AMPS-1D*, The Pennsylvania State University

[20] Green M A 1999 *Clean Electricity From Photovoltaics*, ed. By Mary D. Archer and Robert Hill (Imperial College Press, UK) 149—189

[17] Fahrenbruch A L, Bube R H 1983 *Fundamentals of Solar Cells*

Numerical simulation of nc-Si:H / c-Si heterojunction solar cells^{*}

Hu Zhi-Hua¹⁾²⁾ Liao Xian-Bo¹⁾ Zeng Xiang-Bo¹⁾ Xu Yan-Yue¹⁾

Zhang Shi-Bin¹⁾ Diao Hong-Wei¹⁾ Kong Guang-Lin¹⁾

¹⁾ (Institute of Semiconductor and Center for Condensed Matter Physics, State Laboratory for Surface Physics,

Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083 China)

²⁾ (Yunnan Normal University, Kunming 650092 China)

(Received 14 May 2002; revised manuscript received 19 June 2002)

Abstract

AMPS simulator, which was developed by Pennsylvania State University, has been used to simulate photovoltaic performances of nc-Si:H / c-Si solar cells. It is shown that interface states are essential factors prominently influencing open circuit voltages (V_{OC}) and fill factors (FF) of these structured solar cells. Short circuit current density (J_{SC}) or spectral response seems more sensitive to the thickness of intrinsic a-Si:H buffer layers inserted into n^+ -nc-Si:H layer and p-c-Si substrates. Impacts of bandgap offset on solar cell performances have also been analyzed. As ΔE_C increases, degradation of V_{OC} and FF owing to interface states are dramatically recovered. This implies that the interface state cannot merely be regarded as carrier recombination centres, and impacts of interfacial layer on devices need further investigation. Theoretical maximum efficiency of up to 31.17% (AM1.5, 100mW/cm², 0.40—1.1 μ m) has been obtained with BSF structure, idealized light-trapping effect ($R_F = 0$, $R_B = 1$) and no interface states.

Keywords: nc-Si:H / c-Si hetero-junction, solar cell, computer simulation

PACC: 7340L, 8630J, 6185

^{*} Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. G2000028201).