

# 结构参数对 p-i-n 结构 InGaN 太阳能电池性能的影响及机理\*

周梅<sup>1)</sup> 赵德刚<sup>2)†</sup>

1) (中国农业大学理学院应用物理系, 北京 100083)

2) (中国科学院半导体研究所, 集成光电子学国家重点实验室, 北京 100083)

(2011年11月8日收到; 2012年1月7日收到修改稿)

研究了器件结构参数对 p-i-n 结构 InGaN 单结太阳能电池性能的影响及物理机制. 模拟结果发现: 随着 InGaN 禁带宽度的增加, InGaN 电池的短路电流减小, 但同时开路电压增加, 当 InGaN 层的禁带宽度为 1.5 eV 左右时, 同质 p-i-n 结 InGaN 电池的效率最高, 并计算了不同厚度的 i 层对 InGaN 电池效率的影响. 进一步的计算表明, 适当采用带宽更大的 p-InGaN 层形成异质 p-i-n 结 InGaN 电池可以获得更高效率, 但是 p-InGaN 层带宽过大也会导致电池的效率急剧下降. 研究还发现, 采用禁带宽度更大的 n-InGaN 层可以形成背电场, 从而增加 p-i-n 结 InGaN 太阳能电池的效率. 研究表明, 适当选择 p-InGaN 和 n-InGaN 禁带宽度形成异质 p-i-n 结可以提高 InGaN 太阳能电池效率.

**关键词:** InGaN, 太阳能电池, 结构参数

**PACS:** 84.60.Jt, 73.40.-c, 73.61.Ey

## 1 引言

能源问题已经成为制约当今世界发展的一个重要瓶颈, 而高效率太阳能电池则被认为是解决能源问题的一个重要途径. 目前制作太阳能电池多采用 Si, Ge, GaAs 等材料, 但是这些材料都不能完全覆盖所有太阳光谱, 必须采用键合等工艺技术把各自的电池串联起来, 才能得到高效率的太阳能电池. 尽管如此, 太阳光的短波部分仍然不能被充分利用. 而被称为第三代半导体的 GaN 及其系列材料 (包括 InN, GaN, AlN 及其合金) 的出现, 有可能使太阳能电池的研究现状得到改观, 尤其是当人们发现 InN 的禁带宽度为 0.7 eV 以后<sup>[1,2]</sup>, 整个 InGaN 材料的禁带宽度变化范围从 0.7—3.4 eV, 几乎覆盖了整个太阳光谱, 在太阳能电池的应用方面具有很大的潜力. 国际上已经在 InGaN 太阳能电池的研究方面开展了一些工作, 并且已经研制出太阳能电池的原型器件<sup>[3-6]</sup>, 从目前来看, 国际上报道的最好的转换效率大约为 3%<sup>[7]</sup>. 然而, 从目前的报道来看,

基本上都侧重于材料生长和工艺技术的研究, 对于理论的研究非常少, 这在一定程度上阻碍了 InGaN 新型太阳能电池的进步. 对于一种新型的太阳能电池材料, 从理论上进行器件的模拟和设计, 可以有效地指导实际的电池制备, 提高电池效率.

本文主要讨论了器件结构参数对 p-i-n 结构 InGaN 单结太阳能电池性能的影响, 包括结构参数对同质 p-i-n 结 InGaN 电池效率的影响, 以及背电场结构的 InGaN 电池性能. 在模拟计算过程中, 主要研究了不同禁带宽度和 i 层厚度对同质 p-i-n 结构太阳能电池的影响、p 层禁带宽度对异质 p-i-n 结构太阳能电池的影响以及背电场结构太阳能电池的设计, 分析了物理机制, 获得了基本规律, 优化了结构参数. 研究结果对于 InGaN 电池的设计和制备有一定的参考和指导意义.

## 2 模拟计算所采用的器件结构及参数

图 1 是本文模拟所采用的 p-i-n 结构 InGaN 电

\* 集成光电子学国家重点实验室 (批准号: IOSKL-KF200914) 和中央高校基本科研业务费 (批准号: 2011JS049) 资助的课题.

† E-mail: dgzhao@red.semi.ac.cn

池示意图, 包括 p-InGaN 层、i-InGaN 层 (弱 n 型) 和 n<sup>+</sup>-InGaN 层, In 组分可调, 光从正面入射. 考虑到实际的材料情况, 在本文的模拟计算中, i-InGaN 层的载流子 (电子) 浓度固定为  $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , n<sup>+</sup>-InGaN 层的载流子浓度都固定为  $3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , p-InGaN 层的载流子浓度固定为  $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . 采用美国宾西法尼亚州立大学电子材料工艺研究实验室免费提供的微电光结构分析 (AMPS) 软件对器件性能进行模拟计算, 该软件通过求解泊松方程和连续性方程, 能够对半导体器件的特性进行准确分析 [8,9], 尤其是对半导体太阳能电池特性进行分析的有力工具.

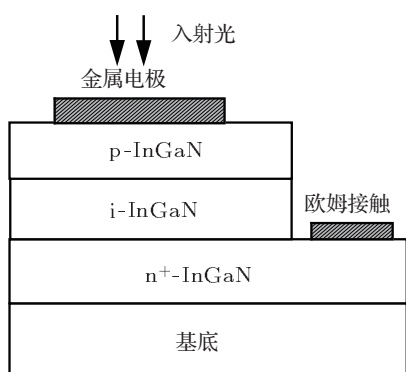


图 1 模拟计算中所采用的 p-i-n 结构 InGaN 太阳能电池示意图

### 3 结果和讨论

本文通过模拟计算, 首先研究了 p-i-n 同质结中 InGaN 太阳能电池与禁带宽度的关系, 并找到了最佳值; 然后针对最佳禁带宽度情况时 i 层厚度对 InGaN 太阳能电池性能的影响, 研究了采取通过增大 p-InGaN 的禁带宽度实现更高性能的异质结 p-i-n 太阳能电池, 并得到了优化的 p-InGaN 禁带宽度; 最后还提出了可以采用背电场结构进一步增强 InGaN 异质结太阳能电池的性能.

#### 3.1 InGaN 禁带宽度对同质 p-i-n 结构电池性能的影响

首先研究了不同禁带宽度下同质 p-i-n 结构 InGaN 太阳能电池性能的变化. 为了准确确定 InGaN 材料的禁带宽度对 InGaN 电池性能的影响, 采取了同质 p-i-n 结构, 即 p-InGaN, i-InGaN, n-InGaN 的 In 组分完全相同. 图 2 所示为开路电压  $V_{oc}$  和短路电流  $I_{sc}$  与 InGaN 禁带宽度的关系. 可以看出, 随着 InGaN 禁带宽度的增加, p-i-n 结构 InGaN 电池

开路电压增加, 而同时短路电流下降. 如果要形成光生电流或光生电压, 入射光的光子能量必须大于材料的禁带宽度. 随着禁带宽度的增加, 太阳光中只有更高能量的光子才能被 InGaN 材料吸收而形成光生电流, 低能量的光子不能被材料吸收从而被浪费掉, 这样总的光生电流减小. 光生电压与光生电流不同, 光生电压与 p-i-n (或 p-n) 结的内建电势差 (或者费米能级之差) 紧密相关 [10], 一般来说, 在同样的光照情况下, 内建电势差越大, 光生电压也越大, 随着 InGaN 材料禁带宽度的增加, 开路电压也随之增加.

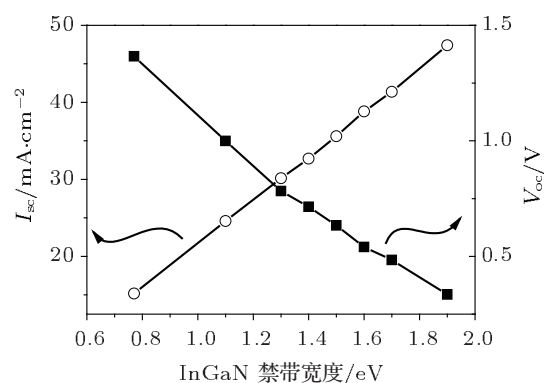


图 2 同质 p-i-n 结构 InGaN 太阳能电池开路电压和短路电流与 InGaN 禁带宽度的关系

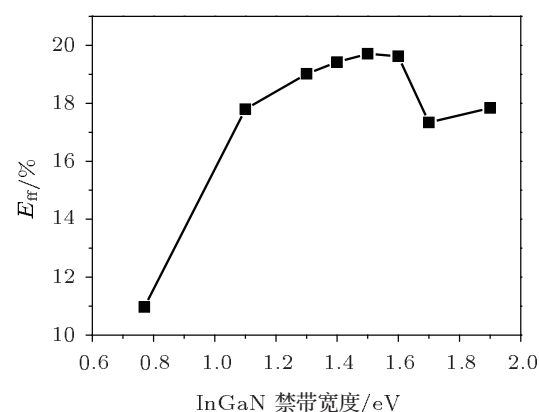


图 3 同质 p-i-n 结构 InGaN 太阳能电池转换效率与禁带宽度的关系

太阳能电池的转换效率与短路电流和开路电压的乘积成正比 [10], 即  $E_{ff} \propto V_{oc} I_{sc}$ , 这里  $E_{ff}$  表示电池的能量转换效率, 本文计算了 InGaN 太阳能电池效率与禁带宽度的关系, 如图 3 所示. 可以看出, 随着 InGaN 禁带宽度的增加, 电池的光电转换效率也随之增加, 但是到一定值以后又开始下降, 大约在 InGaN 材料禁带宽度为 1.5 eV 左右时, 电池的光电转换效率达到最大值为 19.711%. 从图 2 所示的

短路电流和开路电压的计算结果来看,随着禁带宽度的增加,短路电流下降,而开路电压上升,电池的转换效率与这两个值都有关系.要得到最高的转换效率,材料的禁带宽度不能太大也不能太小,必须有合适的短路电流和开路电压.从图2和图3的数值计算结果来看,禁带宽度大约为1.5 eV.所以,如果要研制高效率的InGaN单结p-i-n同质结太阳能电池,InGaN材料的禁带宽度应该选择在1.5 eV左右.

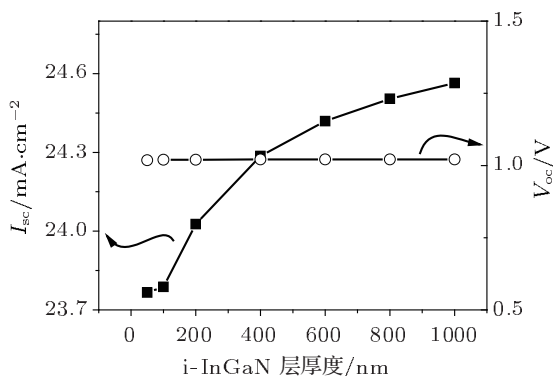


图4 同质 p-i-n 结构 InGaN 电池的短路电流和开路电压与 i-InGaN 层厚度的关系

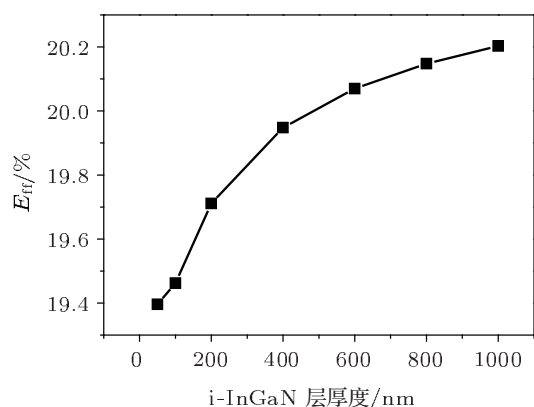


图5 同质 p-i-n 结构 InGaN 电池转换效率与 i-InGaN 层厚度的关系

对于 InGaN 材料禁带宽度为 1.5 eV 的 p-i-n 同质结太阳能电池来说,其 i-InGaN 层的厚度选择对电池的性能也有一定的影响.图4所示为 InGaN 电池的短路电流和开路电压与 i-InGaN 层厚度的关系.可以看出,当 i-InGaN 层的厚度为 50, 100, 200, 400, 600, 800 和 1000 nm 时,对应的短路电流分别为 23.766, 23.788, 24.027, 24.286, 24.419, 24.504 和 24.564 mA/cm<sup>2</sup>,显然随着 i-InGaN 层厚度的增加,短路电流也略有增加.开路电压则不同,随着 i-InGaN 层的厚度增加,对应的开路电压基本保持为 1.021 V 左右,没有明显变化.光电转换效率

与 i-InGaN 层的厚度也有密切关系,如图5所示,随着 i-InGaN 层的厚度增加,转换效率也增加.我们认为可以这样解释:随着 i-InGaN 层厚度的增加,更多的入射光子被 i-InGaN 层所吸收,并能够及时被空间电场分离而形成光电流,所以厚度越大,能够形成光电流的光生载流子数目也越多,因此短路电流随着 i-InGaN 层的厚度增加而增加.而开路电压则不同,随着 i-InGaN 层厚度的增加,虽然更多的光生载流子能够形成光电流,却不能形成更大的开路电压,这主要是受费米能级之差的限制,所以基本上开路电压就饱和了.而转换效率与短路电流、开路电压紧密相关,因此随着 i-InGaN 层厚度的增加,转换效率也增加.上述研究结果表明,适当地增加 i-InGaN 层的厚度,可以改善同质 p-i-n 结构 InGaN 电池性能.

### 3.2 p-InGaN 层的禁带宽度对 p-i-n 异质结 InGaN 太阳能电池的影响

在同质结电池中,由于表面的 p-InGaN 层也能吸收很多光子,但是由于扩散长度的限制,这一层所产生的光生载流子很多不能形成光电流,对光电转换效率没有实质性的贡献.如果把这一层换成禁带宽度更大的 p-InGaN,那么入射光很多能透过这一层而被 i-InGaN 层吸收而形成光电流和光电压,从而有可能进一步提高光电转换效率.本文对这一层禁带宽度的选择进行了模拟计算和研究.

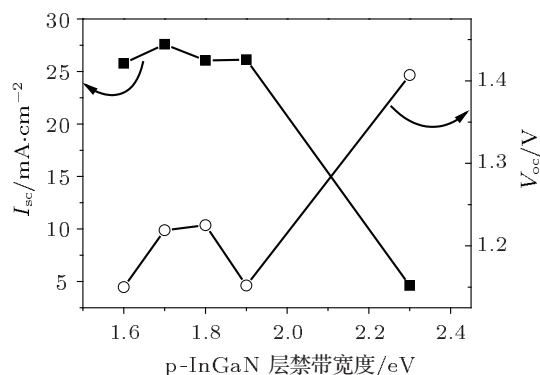


图6 异质 p-i-n 结构 InGaN 太阳能电池的短路电流和开路电压与 p-InGaN 层禁带宽度的关系

图6为不同 p-InGaN 层禁带宽度下 p-i-n 异质结 InGaN 太阳能电池的短路电流和开路电压.当 p-InGaN 禁带宽度分别为 1.6, 1.7, 1.8, 1.9 和 2.3 eV 时,对应的短路电流分别为 25.763, 27.598, 26.052, 26.131 和 4.608 mA/cm<sup>2</sup>,对应的开路电压分别为 1.150, 1.219, 1.225, 1.152 和 1.407 V.从这个模

拟计算结果可以看出,随着禁带宽度的增加,短路电流先增加然后下降,当禁带宽度增加到 2.3 eV 时,短路电流急剧下降.开路电压则不同,随着禁带宽度的增加,开路电压基本上处于上升状态.对应的电池转换效率也有明显的规律,如图 7 所示,当 p-InGaN 禁带宽度分别为 1.6, 1.7, 1.8, 1.9 和 2.3 eV 时,对应的光电转换效率分别为 24.911%, 28.520%, 26.935%, 25.826% 和 5.104%.随着禁带宽度的增加, p-i-n 异质结 InGaN 电池的效率开始增加,当 p-InGaN 禁带宽度为 1.7 eV 时达到最大值;然后电池的转换效率下降,当禁带宽度增加到 2.3 eV 时,急剧下降.可见, p-InGaN 层的禁带宽度对异质结电池的性能影响非常大.

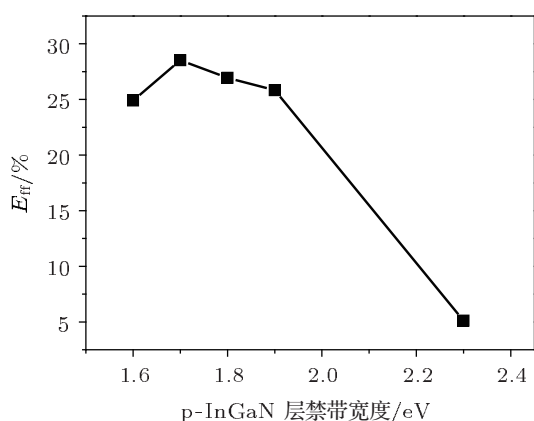


图 7 异质 p-i-n 结构 InGaN 太阳能电池的转换效率与 p-InGaN 层禁带宽度的关系

为了研究 p-InGaN 禁带宽度对 InGaN 电池性能影响的机理,我们研究了其能带结构.图 8 是 p-InGaN 禁带宽度为 2.3 eV 时模拟计算后的器件能带结构,其中  $E_C$ ,  $E_V$ ,  $E_F$  分别为导带、价带和费米能级.可以看出,由于价带的差别,在界面处形成了一个空穴的势垒,如果这个势垒比较低,光生空穴很容易越过势垒而形成光电流,所以在 p-InGaN 层禁带宽度与 i-InGaN 层禁带宽度差别不大的情况下, InGaN 电池的短路电流比较大;但是如果这个势垒高度很高,那么光生载流子就很难越过这个势垒而形成电流<sup>[11]</sup>,所以在 p-InGaN 层禁带宽度较大的情况下,形成的短路电流就会非常小.另外,虽然光生空穴不能越过势垒形成电流,但是能形成开路电压,所以由于 p-InGaN 层的窗口效应,当 p-InGaN 层禁带宽度为 2.3 eV 时,开路电压最大,但是由于此时短路电流太小,所以光电转换效率也很低.上述研究结果也表明,适当增加 p-InGaN 禁带宽度,形成异质结,可以增加 InGaN 电池的转换效率,但是当 p-InGaN 层的禁带宽度太大时,会破

坏器件性能.

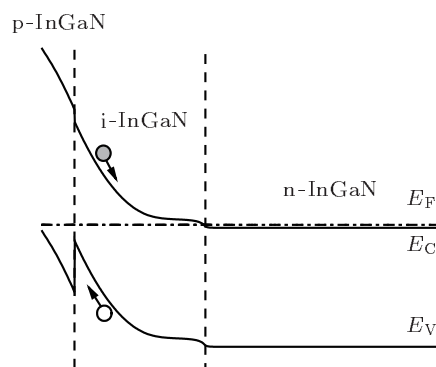


图 8 p-InGaN 禁带宽度为 2.3 eV 时 p-i-n 异质结构太阳能电池模拟计算的能带结构

### 3.3 背电场 p-i-n 异质结 InGaN 太阳电池的模拟

上述的器件结构都是用来研究 p-InGaN, i-InGaN 层的结构参数对电池性能的影响,其实 n-InGaN 层的参数的变化也可对器件性能产生影响.如果把 n-InGaN 层的禁带宽度增加至大于 i-InGaN 层的禁带宽度,那么 i-InGaN/n-InGaN 之间就会形成一个更大的势垒层,对光生空穴形成一个背电场的效果,那么更多的光生空穴会被电场扫出而形成光电流和光电压,从而可能进一步增加光电转换效率.

表 1 不同 n-InGaN 禁带宽度下 p-i-n 异质结太阳能电池的短路电流、开路电压和转换效率

禁带宽度/eV	$I_{sc}/\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$	$V_{oc}/\text{V}$	$E_{ff}/\%$
1.7	26.876	1.266	29.305
1.9	26.820	1.268	29.241
2.3	26.804	1.268	29.219

表 1 是不同 n-InGaN 禁带宽度下 p-i-n 异质结太阳能电池的短路电流、开路电压和转换效率,这里的 p-InGaN, i-InGaN 层禁带宽度分别为 1.7 和 1.5 eV.当 n-InGaN 禁带宽度为 1.7, 1.9 和 2.3 eV 时,对应的短路电流分别为 26.876, 26.820 和 26.804  $\text{mA}/\text{cm}^2$ , 对应的开路电压分别为 1.266, 1.268 和 1.268 V, 对应的光电转换效率分别为 29.305%, 29.241% 和 29.219%.可以看出,随着禁带宽度的变化, InGaN 电池的性能包括短路电流、开路电压和转换效率都没有明显的变化, n-InGaN 禁带宽度的变化对电池性能影响不大.而与没有外加背电场的电池相比 (n-InGaN 禁带宽度为 1.5 eV), 性能还是明显得到改善,没有背电场时对应的转换效

率为 28.520%, 外加背电场以后电池的效率提高了近 1%.

#### 4 结论

本文研究了器件结构参数对 p-i-n 结构 InGaN 单结太阳能电池性能的影响. 模拟结果发现, 当 InGaN 层的禁带宽度为 1.5 eV 左右时, 同质 p-i-n 结 InGaN 电池的效率最高; 进一步的计算表明, 采

用带宽更大的 p-InGaN 层形成异质 p-i-n 结 InGaN 电池可以形成窗口层, 从而更有利于获得高效率, 但是 p-InGaN 层带宽过大也会导致电池的效率急剧下降, 破坏器件性能; 研究还发现, 采用禁带宽度更大的 n-InGaN 层可以形成背电场, 从而增加 p-i-n 结 InGaN 太阳能电池的效率. 模拟计算结果对于 p-i-n 结 InGaN 太阳能电池的研究和制备有一定的指导作用.

- 
- [1] Wu J, Walukiewicz W, Yu K M, Ager J W, Lu H, Schaff W J, Saiko Y, Nanishi Y 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 3967
- [2] Davydov V Y, Klochikhin A A, Emtsev V V, Kurdyukov D A, Ivanov S V, Vekshin V A, Bechstedt F, Furthmuller J, Aderhold J, Graul J, Mudryi A V, Harima H, Hashimoto A, Yamamoto A, Haller E E 2002 *Phys. Status Solid B* **234** 787
- [3] Jani O, Ferguson I, Honsberg C, Kurtz S 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 132117
- [4] Neufeld C J, Toledo N G, Cruz S C, Iza M, DenBaars S P, Mishra U K 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 143502
- [5] Berkman E A, El-Masry N A, Emara A, Bedair S M 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 101118
- [6] Yang C C, Sheu J K, Liang X W, Huang M S, Lee M L, Chang K H, Tu S J, Huang F W, Lai W C 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 021113
- [7] Dahal R, Li J, Aryal K, Lin J Y, Jiang H X 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 073115
- [8] <http://www.ampsmodeling.org>
- [9] Zhou M, Zhao D G 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 7255 (in Chinese) [周梅, 赵德刚 2009 物理学报 **58** 7255]
- [10] Shockley W, Queisser H J 1961 *J. Appl. Phys.* **32** 510
- [11] Sze S M 1981 *Physics of Semiconductor Devices* (2nd Ed.) (New York: John Wiley and Sons)

# Influence of structure parameters on the performance of p-i-n InGaN solar cell\*

Zhou Mei<sup>1)</sup> Zhao De-Gang<sup>2)</sup>†

1) (*Department of Physics, China Agriculture University, Beijing 100083, China*)

2) (*State Key Laboratory on Integrated Optoelectronics, Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China*)

(Received 8 November 2011; revised manuscript received 7 January 2012)

## Abstract

The effect of structure parameters on the performance of p-i-n InGaN solar cell is investigated by theoretical calculation. It is found that the short-circuit current decreases while the open-circuit voltage increases with the increase of bandgap of InGaN material. The maximal energy conversion efficiency of p-i-n homojunction InGaN solar cell can be obtained when the bandgap of InGaN is around 1.5 eV. It is also found that the energy conversion efficiency can be improved by appropriately increasing bandgap of p-InGaN p-i-n heterojunction InGaN solar cell, in addition, the efficiency of p-i-n heterojunction InGaN solar cell may be increased further by employing the back electric field structure. The simulation results suggest that performance of InGaN solar cell can be improved by employing p-i-n heterojunction structure if the appropriate bandgaps of p-InGaN and n-InGaN are adopted.

**Keywords:** InGaN, solar cell, structure parameters

**PACS:** 84.60.Jt, 73.40.-c, 73.61.Ey

---

\* Project supported by the State Key Laboratory on Integrated Optoelectronics, China (Grant No. IOSKL-KF200914) and the Fundamental Research Fund for the Central Universities, China (Grant No. 2011JS049).

† E-mail: dgzhao@red.semi.ac.cn