

渐变带隙氢化非晶硅锗薄膜太阳能电池的优化设计*

柯少颖 王莞[†] 潘涛 何鹏 杨杰 杨宇[‡]

(云南大学光电信息材料研究所, 昆明 650091)

(2013年9月15日收到; 2013年10月14日收到修改稿)

利用一维微电子-光电子结构分析软件 (AMPS-1D) 在 AM1.5G (100 mW/cm^2)、室温条件下模拟和比较了有、无渐变带隙氢化非晶硅锗 ($a\text{-SiGe:H}$) 薄膜太阳能电池的各项性能. 计算结果表明: 渐变带隙结构电池具有较高的开路电压 (V_{oc}) 和较好的填充因子 (FF), 转换效率 (E_{ff}) 比非渐变带隙电池提高了 0.477%. 研究了氢化非晶硅 ($a\text{-Si:H}$)、氢化非晶碳化硅 ($a\text{-SiC:H}$) 和氢化纳米晶硅 ($nc\text{-Si:H}$) 三种不同材料的窗口层对 $a\text{-SiGe:H}$ 薄膜太阳能电池性能的影响. 结果显示: 在以 $nc\text{-Si:H}$ 为窗口层的电池能带中, 费米能级 E_F 已经进入价带, 使得窗口层电导率及电池开路电压有所提高, 又由于 ITO 与 $p\text{-nc-Si:H}$ 的接触势垒较低, 使得接触处的电场降低, 更有利于载流子的收集. 另一方面, 窗口层与 $a\text{-SiGe:H}$ 薄膜之间存在较大的带隙差, 在 p/i 界面由于能带补偿作用形成了价带势垒 (带阶) ΔE_v , 阻碍了空穴的迁移, 因此我们在 p/i 界面引入缓冲层, 使得能带补偿作用得到释放, 更有利于空穴的迁移和收集, 得到优化后单结渐变带隙 $a\text{-SiGe:H}$ 薄膜结构太阳能电池的转换效率达到了 9.104%.

关键词: $a\text{-SiGe:H}$ 薄膜, 太阳能电池, 渐变带隙, 能带补偿

PACS: 88.40.hj, 61.43.Dq, 61.43.Bn, 85.60.Bt

DOI: 10.7498/aps.63.028802

1 引言

由于自然界存在丰富的硅材料, 且硅半导体生产工艺较为成熟, 使得硅基薄膜太阳电池被认为具有很好的发展前景. 近几年, 氢化非晶硅 ($a\text{-Si:H}$) 薄膜太阳能电池的份额有所增加, 低成本的优势使其得到广泛的商业应用. 然而其转换效率 (E_{ff}) 较低, 且在长时间的光照下 E_{ff} 会大幅下降, 因而无法满足可持续使用的要求. 如何提高 $a\text{-Si:H}$ 薄膜太阳能电池的 E_{ff} 和稳定性成为当前的一个研究热点.

近期硅锗合金在太阳能电池中越来越受到重视, 氢化非晶硅锗 ($a\text{-SiGe:H}$) 薄膜因具有较高

的沉积速率、较大的光学吸收系数和可调的禁带宽度使得其在叠层太阳能电池中作为较小带隙的中电池和底电池时有很好的应用前景. 比如, 美国联合太阳能公司报道的最佳 $a\text{-Si:H}/a\text{-SiGe:H}$ 双叠层太阳能电池初始和稳定的 E_{ff} 分别为 14.4% 和 12.4%^[1], 近期 Huang 等^[2] 基于 AMPS-1D 软件的数值模拟结果制备出的 $a\text{-Si:H}/a\text{-SiGe:H}/\mu\text{-c-SiGe:H}$ 三叠层太阳能电池的初始 E_{ff} 为 12.09%. 现今报道的单结 $a\text{-SiGe:H}$ 薄膜太阳能电池的 E_{ff} 值都比较低, 虽然其窄的带隙可以通过增加 Ge 组分来调节, 然而 Ge 组分的增加却使得薄膜的光敏性降低, Chou 等^[3] 指出, 随着 Ge 组分的增加, 薄膜的光敏性可以从 10^5 下降到 10^2 数量级. 费英和史力斌^[4] 指出, Ge 的掺入虽然使得电池的量子效

* 国家自然科学基金 (批准号: 11274266, 10990103)、云南大学理工项目基金 (批准号: 2012CG008) 和云南省应用基础研究计划重点项目 (批准号: 2013FA029) 资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: cwang6@163.com

[‡] 通讯作者. E-mail: yuyang@ynu.edu.cn

率 (QE) 在近红外波段有所增益, 使得短路电流 (I_{sc}) 有所提高, 但也使得薄膜的缺陷态密度增加, 因此对于 a -SiGe : H 薄膜太阳能电池来说 E_{ff} 的提高是上述两个因素相互竞争的结果.

近期国内外许多研究小组通过模拟和实验的方法采用能带工程技术对电池的本征层进行能带改性来提高单结 SiGe : H 薄膜太阳能电池的 E_{ff} . 例如, Zambrano 等^[5]通过模拟不同类型能带结构对 a -SiGe : H 薄膜太阳能电池 E_{ff} 的影响, 模拟结果表明 E 型的能带结构能使得电池的 E_{ff} 得到提高 Wang 等^[6]制备了双渐变带隙 ($x = 20\%$ 和 42%) 单结 nc-SiGe : H 薄膜太阳能电池, 其实验结果表明: 此双渐变带隙结构的 nc-SiGe : H 薄膜能提高电池的 I_{sc} , 从而提高电池的 E_{ff} . Sun 等^[7]通过实验分析了四种不同本征层能带结构的 a -SiGe : H 薄膜太阳能电池的性能参数, 实验结果表明, 通过缓慢减小 Ge 组分 ($18\%—0\%$) 制备的渐变带隙能带结构的电池更有利于空穴的迁移和收集, 使得电池的各项性能得到提高. 曹宇等^[8]采用功率梯度的方法优化了 μ c-SiGe : H 薄膜太阳电池本征层的纵向结构, 不仅使得本征层的质量得到提高, 而且形成了沿生长方向带隙渐变的结构, 使得电池填充因子 (FF) 和 I_{sc} 得到明显改善, E_{ff} 比优化前提提高了 30% . 另外, 于晓明等^[9]从前背电极的陷光性能出发, 采用标度相干理论对 pin 和 nip 型电池绒面的陷光性能进行了数值模拟, 并从实验上证明了采用表面粗糙度为 40 nm 的背电极制备的单结 a -SiGe : H 薄膜太阳能电池可获得最理想的陷光效果 (与模拟结果相符), 使得电池的短路电流提高了约 24% .

然而目前渐变带隙 a -SiGe : H 薄膜太阳能电池 E_{ff} 提高的内在原因 (如态密度、载流子复合率等方面) 尚未能得到很好的解释^[5-7], 且对于渐变带隙 a -SiGe : H 薄膜太阳能电池窗口层和 p/i 界面缓冲层的设计也缺乏一定的理论支撑. 基于此, 本文在 AMPS-1D 软件^[10]的理论框架下从能带结构、 QE 和本征层载流子复合率等方面对渐变带隙 a -SiGe : H 薄膜太阳能电池进行合理的分析, 并从导电率、内建电场和接触势垒等方面研究了三种不同材料窗口层对电池性能的影响, 最后从载流子的俘获率、载流子寿命和界面电场强度等方面分析了缓冲层的引入对电池性能的影响, 并在整个模拟过程中用实验结论论证模型的正确性, 为后续提高 a -SiGe : H 薄膜太阳能电池的性能奠定了基础.

2 电池模型与参数设置

本文所关注的电池模型及能带结构如图 1 所示. 模型设计的渐变带隙薄膜层数为 7 层, 能带如图 1(b) 右上角所示. 但在 AMPS-1D 框架下能带突变处缺陷态密度为零, 且设定不同带隙 a -SiGe : H 薄膜的电子亲和和能相等 (4 eV), 使得导带无突变, 即转化为图 1(b) 右下角的能带结构图, 这种能带结构在实际生产中可以通过改变不同阶段的 SiH_4 和 GeH_4 流量比获得.

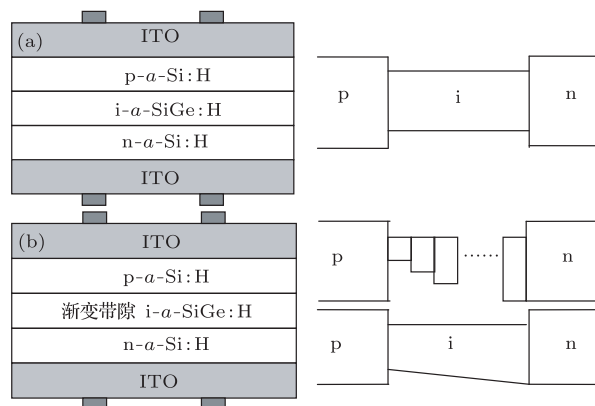


图 1 a -SiGe : H 薄膜太阳能电池模型及能带图 (a) 非渐变带隙; (b) 渐变带隙

由于 a -SiGe : H 薄膜的带隙是渐变的, 且随着 Ge 含量的增加, 各个带隙下的缺陷态密度是不一样的, 因此本文采用费英和史力斌^[4]所建立的 a -SiGe : H 薄膜中的缺陷态和迁移率随 Ge 组分变化的模型对电池性能进行优化设计. 软件中还涉及 a -SiGe : H 薄膜的介电常数, 假设介电常数不随 Ge 组分 x 变化, 其值为 11.9 . 对于光学吸收系数, 采用 Tauc 公式^[11]进行计算, 其方程可表示为

$$\alpha = B^2[(h\nu - E_g)^2/h\nu], \quad (1)$$

其中 a -Si : H, a -SiC : H, a -SiGe : H 的 B 值分别取: 943.51 , 980.88 , $890.58\text{ cm}^{-1/2}\cdot\text{eV}^{-1/2}$, 其他各层参数列于表 1^[12].

3 结果与讨论

3.1 渐变带隙 a -SiGe : H 薄膜太阳能电池的模拟

以下的模拟均在电极与半导体为理想欧姆接触条件下进行, 假设前背面反射率分别为 20% 和 80% . 模型 (1) 本征层禁带宽度 (E_g) 保持 1.55 eV 不变, 模型 (2) 本征层 E_g 为渐变型, 与 p 型层相连

的 a -SiGe : H 薄膜的 E_g 最低为 1.55 eV ($x \approx 0.3$), 之后 Ge 组分每减少 0.05 增加一层直到 E_g 达到最高 1.8 eV ($x \approx 0$), 模拟结果如图 2 所示.

从图 2(a) 中可以得出, 当 d 为 150 nm 时, 模型 (1) 的最高 E_{ff} 为 8.237%, 而对于模型 (2) 来说, 当 d 为 250 nm 时, 最高 E_{ff} 为 8.714%, 比模型 (1) 提高了 0.477%. 为了更好地解释 E_{ff} 提高的原因, 取 d 为 200 nm 进行分析比较. 当 d 为 200 nm 时, 模型 (1) 与模型 (2) 模拟结果如表 2 所示. 模拟结果表明: 模型 (2) 的 FF 及开路电压 (V_{oc}) 都得到提高, 表明渐变带隙使得电池的性能变得更佳. 另外, 从图 2(b) 中可以得出模型 (2) QE 低于模型 (1), 从而导致模型 (2) 的 I_{sc} 下降, 此结果与表 2 的模拟结果及 Hsu 等 [13] 的实验结论相符.

图 3(a) 为本征层载流子复合图, 从图中可以得出模型 (2) 本征层载流子复合率明显低于模型 (1), 其归咎于渐变带隙中的梯度能带及随着 Ge 含量降低而逐渐变好的薄膜质量, Hsu 等 [13] 采用与本模型相符的渐变带隙 a -SiGe : H 薄膜作为 i/n 层,

结果表明: i/n 层的引入有利于提高电池的 V_{oc} 及 FF , 同时 I_{sc} 却相应地下降, 实验结果很好地证明了本模型的正确性, 但他们没有对其内在机制进行说明. Yun 等 [7] 的实验结果与本模型模拟结果有点出入, 实验结果表明 I_{sc} 在渐变带隙后有所提高, 我们认为这可能与最低 E_g 的取值有关系, 因为当 E_g 减小时, a -SiGe : H 薄膜中的缺陷态密度增加, 特别是当 E_g 小于 1.5 eV 时, 缺陷态密度几乎随 Ge 含量成指数增加 [4], 缺陷态的增加也会对载流子的迁移产生影响, 导致 I_{sc} 下降. 但另一方面 E_g 减小使得电池的光谱响应范围得到拓展, 导致 I_{sc} 增加, 因此本文根据其实验数据也做了带隙从 1.44 eV 到 1.77 eV 渐变的模型, 得到有、无渐变带隙电池模拟结果, 如表 3 所示. 计算结果表明: 当渐变带隙的初始层 E_g 较小时, 渐变带隙太阳能电池的 I_{sc} 比非渐变带隙太阳能电池有所提高, 因此可以得出 I_{sc} 是缺陷态与光谱响应范围共同作用的结果, 这也基本符合 Yun 等 [7] 的实验结果.

表 1 a -SiGe : H 薄膜太阳能电池各层模拟参数

参数	p- a -Si : H	p- a -SiC : H	p-nc-Si : H	p-nc-Si : H	p/i- a -SiGe	n- a -Si : H
x/nm	10	10	10	5	3	20
EPS	11.9	11.9	11.9	11.9	11.9	11.9
chi/eV	3.8	3.7	3.7	3.75	4	3.8
E_g/eV	1.8	1.92	2.03	1.91	1.55	1.8
E_{opt}/eV	1.77	1.87	2	1.88	1.52	1.77
N_c/cm^{-3}	2.5×10^{20}	2.5×10^{20}	2.8×10^{19}	2.8×10^{19}	2.5×10^{20}	2.5×10^{20}
N_v/cm^{-3}	2.5×10^{20}	2.5×10^{20}	1.04×10^{19}	1.04×10^{19}	2.5×10^{20}	2.5×10^{20}
N_D/cm^{-3}						1×10^{19}
N_A/cm^{-3}	3×10^{19}	3×10^{19}	3×10^{19}	1×10^{16}		
$\mu_n/\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	20	10	2	2	5.7	20
$\mu_p/\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	2	1	0.2	0.2	0.57	2
$d(S_e/S_h)/\text{cm}^2$	$1 \times 10^{-15}/$ 1×10^{-17}	$1 \times 10^{-15}/$ 1×10^{-17}	$1 \times 10^{-15}/$ 1×10^{-17}	$1 \times 10^{-15}/$ 1×10^{-17}	$1 \times 10^{-13}/$ 1×10^{-14}	$1 \times 10^{-15}/$ 1×10^{-17}
$a(S_e/S_h)/\text{cm}^2$	$1 \times 10^{-17}/$ 1×10^{-15}	$1 \times 10^{-17}/$ 1×10^{-15}	$1 \times 10^{-17}/$ 1×10^{-15}	$1 \times 10^{-17}/$ 1×10^{-15}	$1 \times 10^{-14}/$ 1×10^{-13}	$1 \times 10^{-17}/$ 1×10^{-15}
$G_{DO}/\text{cm}^{-3} \cdot \text{eV}^{-1}$	1×10^{21}	1×10^{21}	2×10^{20}	2×10^{20}	8.56×10^{19}	1×10^{21}
$G_{AO}/\text{cm}^{-3} \cdot \text{eV}^{-1}$	1×10^{21}	1×10^{21}	2×10^{20}	2×10^{20}	1.42×10^{20}	1×10^{21}
$E_A/E_D/\text{eV}$	0.06/0.03	0.1/0.05	0.02/0.01	0.02/0.01	0.06/0.03	0.06/0.03
N_G/cm^{-3}	4×10^{18}	3×10^{18}	1×10^{17}	1×10^{16}	3×10^{17}	4×10^{18}

注: x 为本征层厚度; EPS 为介电常数; chi 为电子亲和能; E_g 为禁带宽度; E_{opt} 为光学带隙; N_c 为导带有效态密度; N_v 为价带有效态密度; N_D 为施主浓度; N_A 为受主浓度; μ_n 为电子迁移率; μ_p 为空穴迁移率; $d(S_e/S_h)$ 为类施主带尾缺陷态电子/空穴俘获截面; $a(S_e/S_h)$ 为类受主带尾缺陷态电子/空穴俘获截面; G_{DO} 为类施主带尾缺陷态密度; G_{AO} 为类受主带尾缺陷态密度; E_A/E_D 为类施主/类受主带尾特征能量; N_G 为间隙态缺陷密度

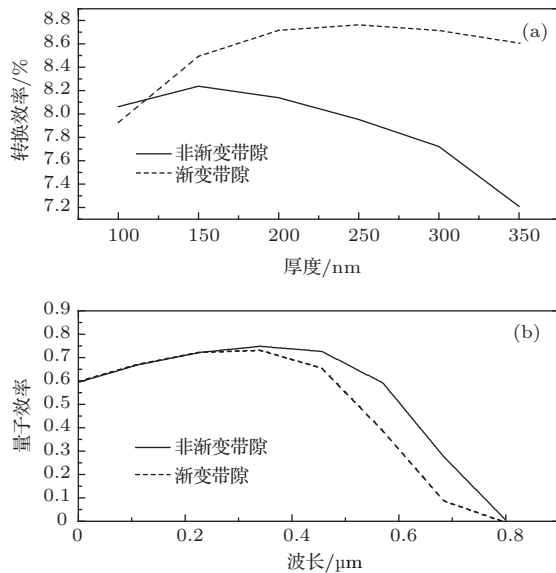
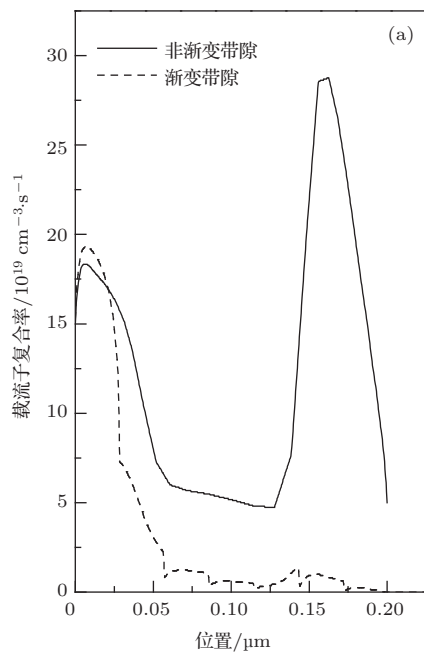


图2 有、无渐变带隙 a -SiGe:H 薄膜太阳能电池转换效率和量子效率曲线 (a) 转换效率随本征层厚度变化曲线图; (b) 量子效率图

表2 d 为 200 nm 时有、无渐变带隙 a -SiGe:H 薄膜太阳能模拟结果

模型	$I_{sc}/\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$	FF	V_{oc}/V	$E_{ff}/\%$
(1)	15.160	0.719	0.747	8.144
(2)	13.166	0.798	0.830	8.715

此外本文所用的模型为带隙递增模型, 能带结构如图 3(b) 所示. 从图中可以得出, 模型 (2) 中价带带阶的存在阻碍了空穴的倒流, 即形成空穴的背



散射, 因此也提高了电极对空穴的收集, 此分析结果与 Yun 等 [7] 的实验结果相符.

表3 有、无渐变带隙 a -SiGe:H 薄膜太阳能电池模拟结果

电池能带结构	$I_{sc}/\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$	FF	V_{oc}/V	$E_{ff}/\%$
非渐变带隙	14.944	0.426	0.732	4.659
渐变带隙	16.097	0.659	0.786	8.336

3.2 不同材料窗口层的模拟

根据以上的模拟结果, 取 E_g 为 1.55 eV, d 为 150 nm 的非渐变带隙 a -SiGe:H 太阳能电池作为比较的主体, 分别模拟了以 a -Si:H, a -SiC:H, nc -Si:H 为窗口层的 a -SiGe:H 薄膜太阳能电池 (如图 4 中的插图所示). 对于 nc -Si:H 的光学吸收系数采用加权平均算法, 两相结构材料的吸收系数可表示为 [14]

$$\alpha = \alpha_c f + \alpha_a (1 - f), \quad (2)$$

式中 α_a 和 α_c 是典型的非晶硅和单晶硅的吸收系数, f 为晶化率, nc -Si:H 的参数取自文献 [15], α_a 和 α_c 的数据分别取自 AMPS-1D 官网 [16], 根据三种不同窗口层材料的 B 值及 Tauc 公式可以计算出各个波长下的吸收系数, 如图 4 所示. 从图中可以看出 a -Si:H 材料在可见光范围内的吸收系数比其他两种材料高.

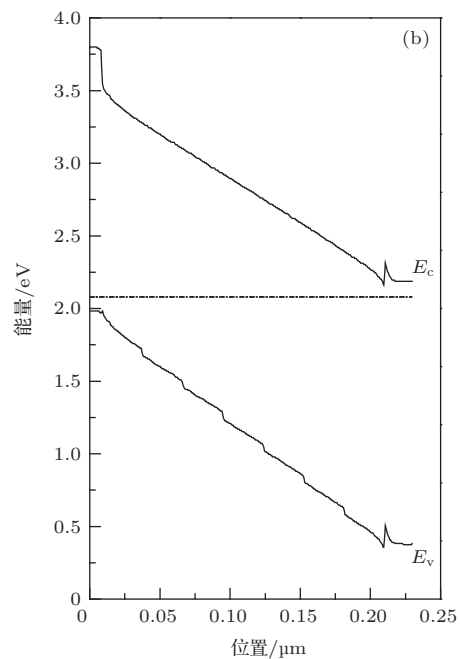


图3 a -SiGe:H 薄膜太阳能电池载流子复合率及能带图 (a) 有、无渐变带隙电池本征层载流子复合; (b) 渐变带隙电池能带图

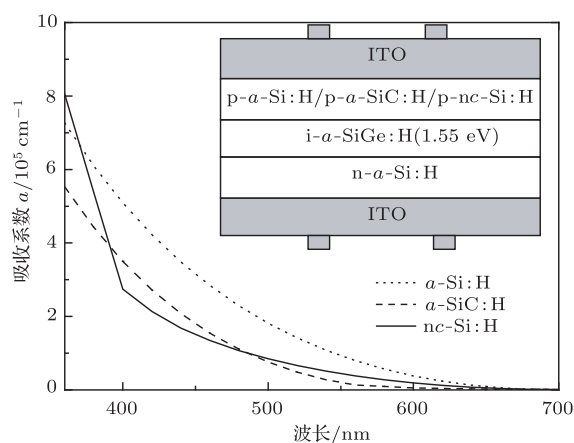


图4 不同窗口层吸收系数随波长变化, 插图为电池结构示意图

不同窗口层电池的 I - V 曲线如图 5(b) 所示. 从图中可以看出以 nc-Si:H 为窗口层的电池 I_{sc} (15.164 mA/cm^2) 和 E_{ff} (8.752%) 明显地高于以 a -Si:H 为窗口层的电池 ($I_{sc} = 14.333 \text{ mA/cm}^2$; $E_{ff} = 8.169\%$) 和以 a -SiC:H 为窗口层的电池

($I_{sc} = 14.828 \text{ mA/cm}^2$; $E_{ff} = 8.428\%$). 作为窗口层, 需要具有较高的电导率和较低的光学吸收系数, 且在长时间光照下能保持稳定^[17]. Chang 等^[18]指出, 由于 a -Si:H 薄膜的光学吸收系数比较高, 且存在光致衰退效应, 因此不适合于做窗口层. 对于 a -SiC:H 来说, 虽然其高带隙可以使得光学吸收系数较小、 V_{oc} 较高, 但其电导率不高, 且 C 原子有可能扩散进入本征层, 使得本征层的质量下降, 从而限制了太阳能电池 E_{ff} 的进一步提高, 甚至会加速光致衰退效应^[19]. 而 nc-Si:H 有较高的电导率和在可见光范围内高透过率的优势^[20], 且本身 nc-Si:H 窗口层对本征层没有杂质原子扩散作用, 因此 nc-Si:H 更适合作为硅基薄膜太阳能电池的窗口层. 为了使得窗口层的光吸收降低, 一般 p-nc-Si:H 的厚度都控制在 20 nm 以下^[21]. 上述的分析结果与本模拟所设置的吸收系数(图 4)很好地符合, 从而验证了模型的可靠性.

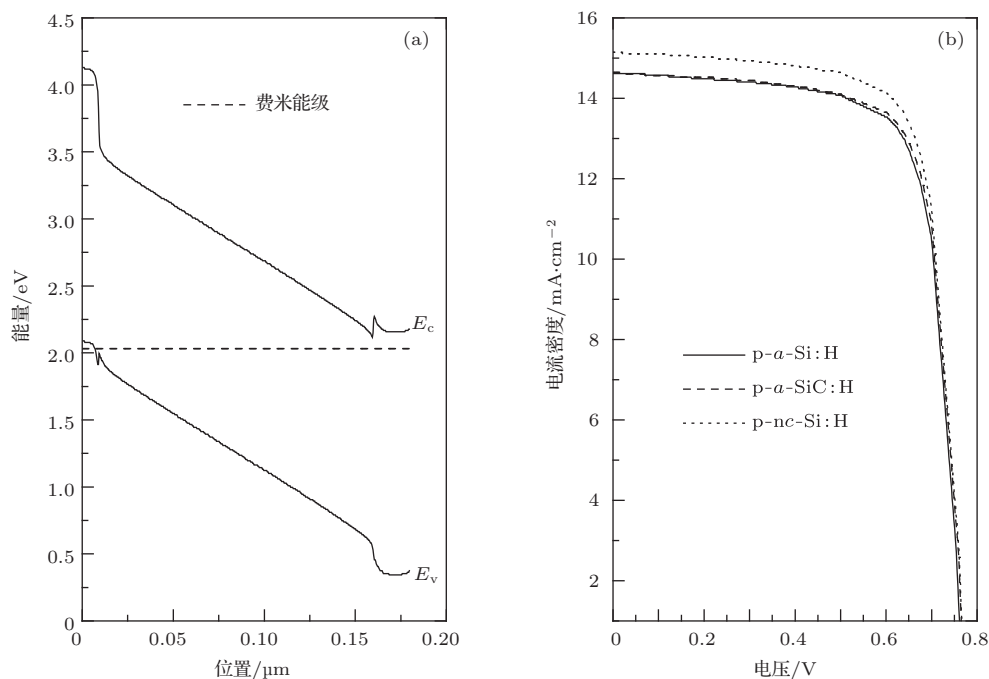


图5 a -SiGe:H 薄膜太阳能电池能带及 I - V 曲线 (a) 以 nc-Si:H 为窗口层的电池能带; (b) 不同窗口层电池的 I - V 曲线

图 5(a) 是以 nc-Si:H 为窗口层的电池能带图. 从图中可以得出 nc-Si:H 的费米能级已经进入价带, 而相同掺杂浓度下其他两种窗口层费米能级都没有进入价带 (这里未列出), 说明在适当的掺杂浓度下 nc-Si:H 窗口层的导电率比另外两个高, 更有利于载流子的收集. 其次由于费米能级进入价带, 使得电池的内建电势 V_b 增大, 又由于在 p/i 界面导

带的电子背散射比其他两种窗口层强, 使得氧化锡 (ITO)/p 界面复合减小, 从而导致电池的各项性能都提高^[22]. 同时 Chen 等^[23] 根据平带分析指出当在一定范围内 ITO 的功函数越高时, 电池的性能越好. 因为当 ITO 的功函数较高时, 在 ITO/p 接触处的电场降低, 更有利于载流子的迁移, 同时 ITO 功函数升高有利于提高内建电场, 使电池性能得到

提高^[24,25]. 本文在忽略界面态情况下根据金属与p型半导体接触能带图(图6)列出(3)式和(4)式, 其中 $q\varphi_{ps}$ 为金属端接触势垒, χ , E_g , W_m 分别为半导体电子亲和能、禁带宽度及金属功函数. 根据(3)式可以得出当 φ_{b0} 增大时, W_m 相应地增大, 代入(4)式得出金属端的接触势垒降低. 因此当金属功函数增加时, 更符合欧姆接触的要求.

$$q\varphi_{ps} = \chi + E_g - W_m, \quad (3)$$

$$\varphi_{b0} = W_m - \chi. \quad (4)$$

本模拟结果都是建立在平带理论的基础上, ITO功函数变化范围为4.3—5.1 eV^[26], φ_{b0} 的值高, 对ITO的工艺要求也高. 根据上文分析, 我们认为nc-Si:H性能提高还有另一方面的原因, 即较低的接触势垒. 因此我们认为较高的电导率、较大的内建电势、较强的电子背散射及较低的接触势垒是使以nc-Si:H为窗口层的电池 E_{ff} 提高的主要原因.

最后将nc-Si:H材料窗口层应用于渐变带隙a-SiGe:H薄膜太阳能电池, 从模拟结果($I_{sc} = 14.265 \text{ mA/cm}^2$; $E_{ff} = 9.183\%$; $FF = 0.787$; $V_{oc} = 0.818 \text{ V}$)可以看出电池 E_{ff} 提高了0.468%.

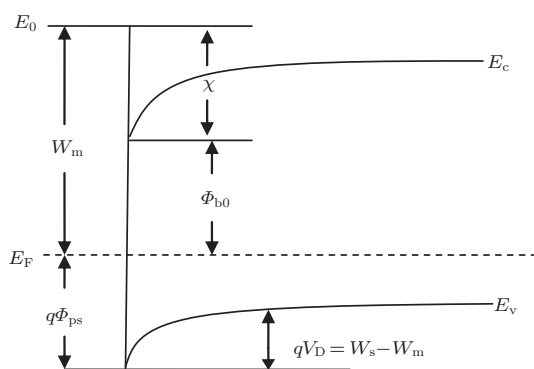


图6 ITO与p型半导体接触时的能带

3.3 p/i界面缓冲层对电池效率的影响

在模拟实际p/i界面时, 需要考虑界面态的影响. 因此在无缓冲层的渐变带隙电池的p/i界面插入一层3 nm厚的高缺陷态的本征a-SiGe:H层来代替界面, 而插入缓冲层的电池假设缓冲层为5 nm的轻掺杂、低缺陷态的p'-nc-Si:H, 其参数取自文献^[15]. 有、无缓冲层的a-SiGe:H薄膜太阳能电池结构如图7所示.

模拟结果如表4和图8所示. 从表中可以得出优化后太阳能电池的各项性能参数都比优化前有

所提高, 其中 E_{ff} 提高了0.389%.

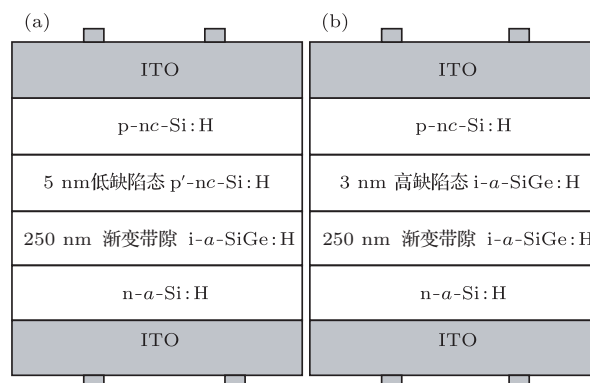


图7 a-SiGe:H薄膜太阳能电池结构 (a) 有缓冲层; (b) 无缓冲层

表4 有、无缓冲层a-SiGe:H薄膜太阳能电池模拟结果

电池结构	$I_{sc}/\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$	FF	V_{oc}/V	$E_{ff}/\%$
有缓冲层	14.181	0.786	0.817	9.104
无缓冲层	13.727	0.782	0.812	8.715

从图8(a)中可以看出, 在窗口层与本征层之间由于能带补偿作用, 使得在价带的p/i界面处形成一个小势垒 ΔE_v 阻碍了空穴的迁移, 根据(5)和(6)式, 可粗略计算出 ΔE_c 与 ΔE_v 约分别为300 meV和180 meV. 当插入缓冲层后其p/i界面处能带如图8(b)所示. 从图中可以看出价带补偿作用被削弱, 经计算可得出 ΔE_c 与 ΔE_v 分别约为250 meV和110 meV, 当空穴到达p/i界面时, 由于缓冲层的引入, 使得空穴在p/i界面受到的势垒降低, 使得空穴更容易迁移.

$$\Delta E_c = \chi_1 - \chi_2, \quad (5)$$

$$\Delta E_v = E_{g2} - E_{g1} - \Delta E_c. \quad (6)$$

为了了解p/i界面载流子迁移的具体情况, 我们还对p/i界面处的电场、载流子俘获率和空穴寿命进行分析, 如图9和图10所示. 从图9(a)中可以看出, 在没有缓冲层的电池p/i界面, 由于存在大量的缺陷, 且由于能带补偿势垒的存在, 在界面处俘获了大量的载流子^[27], 使得p/i界面处的电场增强. 加入缓冲层后p/i界面处的缺陷态减小, 且能带补偿作用被减弱, 使得空穴更容易迁移到p区被收集, 因此p/i界面的空穴俘获率减小, 使得电场明显减弱. 图9(b)为空穴在p/i界面处的寿命图,

从图中可以得出, 在无缓冲层情况下, 空穴的寿命较短, 约为 5×10^{-4} s, 因此空穴在 p/i 界面被俘获的概率较大, 而插入缓冲层之后, 空穴的寿命约为 3.8×10^{-3} s, 寿命明显比没有缓冲层的长, 因此空穴被 p/i 界面俘获的概率减小.

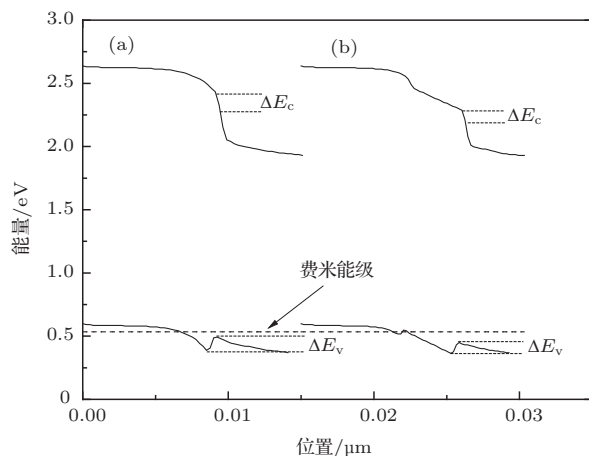


图8 渐变带隙 $a\text{-SiGe:H}$ 薄膜太阳能电池 p/i 界面能带模拟 (a) 无缓冲层 p/i 界面能带; (b) 有缓冲层 p/i 界面能带

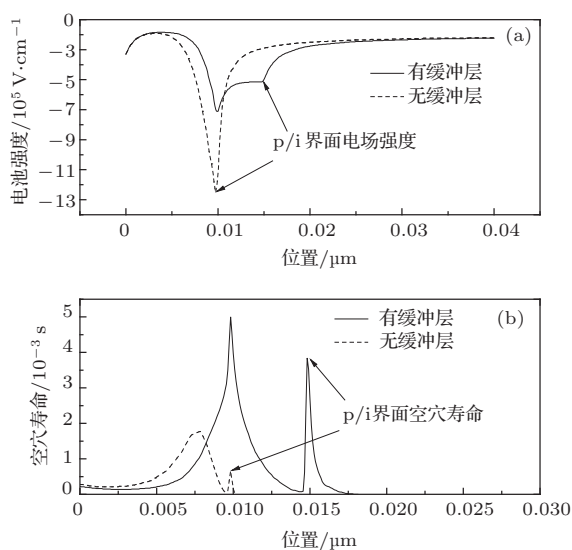


图9 有、无缓冲层 $a\text{-SiGe:H}$ 薄膜太阳能电池 p/i 界面电场强度和空穴寿命模拟曲线 (a) p/i 界面电场强度; (b) p/i 界面空穴寿命

从图 10(a) 中可以看出, 缓冲层的引入对 p/i 界面电子俘获率没有太大的影响, 而图 10(b) 显示缓冲层对空穴俘获率的影响较大. 在引入缓冲层之前, 空穴的俘获率约为 $4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, 而引入缓冲层后空穴的俘获率约为 $2.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, 因此缓冲层的引入减小了 p/i 界面空穴的被俘获的概率, 更有利于空穴越过 p/i 界面到达电极.

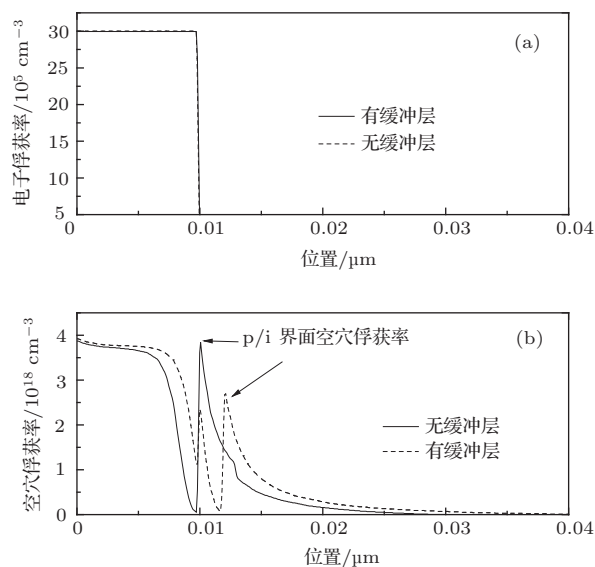


图10 有、无缓冲层 $a\text{-SiGe:H}$ 薄膜太阳能电池 p/i 界面载流子俘获率 (a) p/i 界面电子俘获; (b) p/i 界面空穴俘获

4 结 论

1) 采用能带工程技术对 $a\text{-SiGe:H}$ 薄膜太阳能电池进行优化设计, 得出渐变带隙结构电池由于较高的开路电压和较好的填充因子, 使得转换效率比非渐变带隙结构电池提高了 0.477%.

2) 分析了理想情况下 $a\text{-Si:H}$, $a\text{-SiC:H}$, $nc\text{-Si:H}$ 三种不同材料的窗口层对电池性能的影响, 得出以 $nc\text{-Si:H}$ 为窗口层的电池由于较高的电导率、较大的内建电势、较强的电子背散射以及较低的前电极接触势垒, 使得效率最高.

3) 在渐变带隙电池 p/i 界面引入 $nc\text{-Si:H}$ 材料缓冲层使得能带补偿作用得到释放, 减少了 p/i 界面对空穴的俘获, 降低了 p/i 界面的电场强度, 同时降低了表面的缺陷态密度, 得到优化后渐变带隙电池转换效率为 9.104%.

参考文献

- [1] Guha S 2004 *Sol. Energy* **77** 887
- [2] Huang Z H, Zhang J J, Ni J, Cao Y, Hu Z Y, Li C, Geng X H, Zhao Y 2013 *Chin. Phys. B* **22** 098803
- [3] Chou Y P, Lee S C 1998 *J. Appl. Phys.* **83** 4111
- [4] Fei Y, Shi L B 2012 *J. Atom. Molecul. Phys.* **29** 532 (in Chinese) [费英, 史力斌 2012 原子与分子物理学报 **29** 532]
- [5] Zambrano R J, Rubinelli F A, Arnoldbik W M, Rath J K, Schropp R E I 2004 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **81** 73
- [6] Wang C C, Wu D S, Lien S Y, Lin Y S, Liu C Y, Hsu C H, Chen C F 2012 *Int. J. Photoenergy* **2012** 1

- [7] Yun S J, Kim J K, Lim J W 2011 *Electrochem. Solid-State Lett.* **15** B9
- [8] Cao Y, Zhang J J, Li T W, Huang Z H, Ma J, Ni J, Geng X H, Zhao Y 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 036102 (in Chinese)[曹宇, 张建军, 李天微, 黄振华, 马峻, 倪杰, 耿新华, 赵颖 2013 物理学报 **62** 036102]
- [9] Yu X M, Zhao J, Hou G F, Zhang J J, Zhang X D, Zhao Y 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 120101 (in Chinese)[于晓明, 赵静, 侯国付, 张建军, 张晓丹, 赵颖 2013 物理学报 **62** 120101]
- [10] Fonash S J, Arch J, Cuiffi J, Hou J, Howland W, McElheny P, Moquin A, Rogosky M, Tran T, Zhu H, Rubinelli F 1997 *The Pennsylvania State University Open Source License*
- [11] Gueunier M E, Kleider J P, Chatterjee P, Roca i Cabarrocas P, Poissant Y 2003 *Thin Solid Films* **427** 247
- [12] Li M B, Shi L B 2012 *J. Chin. Chem. Soc.* **40** 934
- [13] Hsu H J, Hsu C H, Tsai C C 2012 *J. Non-Cryst. Solids* **358** 2277
- [14] Hao H Y, Kong G L, Zeng X B, Xu Y, Diao H W, Liao X B 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 3370 (in Chinese)[郝会颖, 孔光临, 曾湘波, 许颖, 刁宏伟, 廖显伯 2005 物理学报 **54** 3370]
- [15] Belfar A, Aik-Kaci H 2012 *Thin Solid Films* **525** 167
- [16] http://www.ampsmodeling.org/materialData_silicon.html
- [17] Rath J K, Schropp R E I 1998 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **53** 189
- [18] Chang P K, Hsu W T, Hsieh P T, Lu C H, Yeh C H, Houn M P 2012 *Thin Solid Films* **520** 3096
- [19] Hu Z, Liao X, Diao H, Cai Y, Zhang S, Fortunato E, Martins R 2006 *J. Non-Cryst. Solids* **352** 1900
- [20] Filonovich S A, Aguas H, Bernacka-Wojcik I, Gaspar C, Vilarigues M, Silva L B, Fortunato E, Martins R 2009 *Vacuum* **83** 1253
- [21] Vygranenko Y, Fathi E, Sazonov A, Vieira M, Nathan A 2010 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **94** 1860
- [22] Walsh K M 2007 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **40** 1007
- [23] Chen A, Zhu K 2012 *Sol. Energy* **86** 393
- [24] Oh W K, Hussain S Q, Lee Y J, Lee Y, Ahn S, Yi J 2012 *Mater. Res. Bull.* **47** 3032
- [25] Zhang Y, Liu Y, Lü B, Tang N Y, Wang J Q, Zhang H Y 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 2829 (in Chinese)[张勇, 刘艳, 吕斌, 汤乃云, 王基庆, 张红英 2009 物理学报 **58** 2829]
- [26] Roca I, Cabarrocas P, Ramprasad S, Liu J Z, Chu V, Maruyama A, Wagner S 1990 *Conference Record of the 21st IEEE Photovoltaic Specialists Conference*, Orlando, USA, May, 1990 p1610
- [27] Palit N, Chatterjee P 1999 *J. Appl. Phys.* **86** 6879

Optimization design of hydrogenated amorphous silicon germanium thin film solar cell with graded band gap profile*

Ke Shao-Ying Wang Chong[†] Pan Tao He Peng Yang Jie Yang Yu[‡]

(Institute of Optoelectronic Information Materials, Yunnan University, Kunming 650091, China)

(Received 15 September 2013; revised manuscript received 14 October 2013)

Abstract

The simulation program AMPS-1D (analysis of microelectronic and photonic structures) employed to simulate and compare the performances of hydrogenated amorphous silicon germanium ($a\text{-SiGe} : \text{H}$) thin film solar cell with and without band gap grading at a radiation of AM1.5G ($100 \text{ mW}/\text{cm}^2$) and room temperature by introducing energy band engineering. The simulation results show that the efficiency of the solar cell with band gap grading is 0.477% higher than that without band gap grading due to the higher open circuit voltage (V_{oc}) and better fill factor (FF). Subsequently, $a\text{-SiGe} : \text{H}$ thin film solar cells with three different window layers such as hydrogenated amorphous silicon ($a\text{-Si} : \text{H}$), hydrogenated amorphous silicon carbide ($a\text{-SiC} : \text{H}$) and hydrogenated nanocrystalline silicon ($nc\text{-Si} : \text{H}$) are simulated, respectively. The numeric calculation results indicate that the fermi level E_F of the $a\text{-SiGe} : \text{H}$ thin film solar cell crosses the valence band when $nc\text{-Si} : \text{H}$ window layer is employed in the simulation. This will improve the conductivity and the open circuit voltage of the solar cell. In addition, the electric field at front contact interface is reduced due to the lower contact barrier height. This may be more beneficial to the carrier collection by front contact. On the other hand, thanks to the wider band-gap difference between the window layer and the intrinsic layer, a potential barrier is built at the valence-band p/i interface due to the band offset. This will hinder the hole migration and collection. Thus, an $nc\text{-Si} : \text{H}$ buffer layer, which can relax the valence-band offset and be more beneficial to the carrier migration and collection, is introduced at p/i interface. Finally, the optimum conversion efficiency of the $a\text{-SiGe} : \text{H}$ thin film solar cell with graded band gap is achieved to be 9.104%.

Keywords: $a\text{-SiGe} : \text{H}$ thin film, solar cell, band gap grading, band offset

PACS: 88.40.hj, 61.43.Dq, 61.43.Bn, 85.60.Bt

DOI: 10.7498/aps.63.028802

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11274266, 10990103), the Science and Technology Project of Yunnan University, China (Grant No. 2012CG008), and the Key Project of Applied Basic Research Program of Yunnan Province, China (Grant No. 2013FA029).

[†] Corresponding author. E-mail: cwang6@163.com

[‡] Corresponding author. E-mail: yuyang@ynu.edu.cn