

晶格失配对 GaInP/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/In<sub>y</sub>Ga<sub>1-y</sub>As 倒装三结太阳能电池性能影响的分析

马大燕 陈诺夫 付蕊 刘虎 白一鸣 弭辙 陈吉堃

Analyses of the effect of mismatch on the performance of inverted GaInP/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/In<sub>y</sub>Ga<sub>1-y</sub>As triple-junction solar cells

Ma Da-Yan Chen Nuo-Fu Fu Rui Liu Hu Bai Yi-Ming Mi Zhe Chen Ji-Kun

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, **66**, 048801 (2017) DOI: 10.7498/aps.66.048801

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.048801>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2017/V66/I4>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于分布式布拉格反射器结构的空三结砷化镓太阳能电池抗辐照研究

Anti-radiation of space triple-junction solar cell based on distributed Bragg reflector structure

物理学报.2016, 65(10): 108801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.108801>

平面型钙钛矿太阳能电池温度相关的光伏性能时间响应特性

Temperature-dependent time response characteristic of photovoltaic performance in planar heterojunction perovskite solar cell

物理学报.2016, 65(18): 188801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.188801>

二硒化铁/还原氧化石墨烯的制备及其在染料敏化太阳能电池中的应用

Preparation of iron diselenide/reduced graphene oxide composite and its application in dyesensitized solar cells

物理学报.2016, 65(11): 118802 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.118802>

新型碳材料在钙钛矿太阳能电池中的应用研究进展

Progress of new carbon material research in perovskite solar cells

物理学报.2016, 65(5): 058801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.058801>

后退火增强氢化非晶硅钝化效果的研究

Investigation of post-annealing enhancement effect of passivation quality of hydrogenated amorphous silicon

物理学报.2015, 64(19): 198801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.198801>

# 晶格失配对GaInP/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/In<sub>y</sub>Ga<sub>1-y</sub>As 倒装三结太阳能电池性能影响的分析\*

马大燕<sup>1)</sup> 陈诺夫<sup>1)†</sup> 付蕊<sup>1)</sup> 刘虎<sup>1)2)</sup> 白一鸣<sup>1)</sup> 弭轶<sup>1)</sup> 陈吉堃<sup>3)‡</sup>

1)(华北电力大学可再生能源学院, 北京 102206)

2)(石家庄铁道大学数理系, 石家庄 050041)

3)(北京科技大学材料科学与工程学院, 北京 100083)

(2016年8月30日收到; 2016年10月25日收到修改稿)

传统GaInP/(In)GaAs/Ge三结太阳能电池因其带隙组合的限制, 转换效率再提升空间不大. 倒装结构三结太阳能电池因其更优的带隙组合期望可以得到更高的效率. 基于细致平衡原理, 结合P-N结形成机理, 应用MATLAB语言对双晶格失配GaInP(1.90 eV)/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/In<sub>y</sub>Ga<sub>1-y</sub>As倒装结构三结太阳能电池底、中、电池的不同带隙组合进行模拟优化. 模拟结果表明在AM1.5D, 500倍聚光(500 suns)下, 禁带宽度组合为1.90/1.38/0.94 eV的带隙最优, 综合材料成本与试验条件, 当顶、中、电池最优厚度组合为4 μm和3.2 μm时理论转化效率高达51.22%, 此时两个异质结的晶格失配度分别为0.17%和2.36%. 忽略渐变缓冲层生长后底电池位错的影响, 通过计算0.17%的晶格失配引入 $1.70 \times 10^5 \text{ cm}^{-2}$ 的插入位错密度, 对比单晶格失配GaInP/GaAs/In<sub>0.32</sub>Ga<sub>0.68</sub>As (0.99 eV)倒装结构三结太阳能电池光电转化效率仍提高了0.3%.

**关键词:** 双晶格失配, 倒装结构, 三结太阳能电池, 位错

**PACS:** 88.40.jp, 88.40.H-, 88.40.hj

**DOI:** 10.7498/aps.66.048801

## 1 引言

III-V太阳能电池因其较高的转化效率, 良好的耐辐射性能及温度特性等优势, 已经成为近几年光伏领域研究的热点. 经过十几年的发展, GaInP/InGaAs/Ge三结太阳能电池的量产化最高转化效率为41.6%(AM1.5D, 364 suns)<sup>[1]</sup>, 由于带隙的限制, 转化效率再上升的空间不大. 而倒装多结太阳能电池因为其可以更合理地分配太阳光谱, 减少热能损失, 提高开路电压, 期望可以得到更高的转化效率. 目前, 倒装结构太阳能电池最高转化效率由NREL(National Renewable Energy Laboratory)生产的GaInP/GaAs/InGaAs/InGaAs四

结电池提供, 转化效率高达45.7%(AM1.5D, 234 suns)<sup>[2,3]</sup>, 只比Fraunhofer ISE (Institute for Solar Energy System)实验室生产的GaInP/GaAs/InGaAsP/InGaAs四结键合太阳能电池46.0%(AM1.5D, 508 suns)<sup>[4,5]</sup>的多结太阳能电池的最高效率低0.3%. 2013年, 日本Sharp公司通过优化InGaAs的化合物组分, 生产的电池芯片面积仅为0.165 cm<sup>2</sup>的小面积GaInP/GaAs/InGaAs (1.0 eV)倒装三结太阳能电池, 光电转化效率为44.4%(AM1.5D, 302 suns)<sup>[6]</sup>, 这也是迄今为止三结太阳能电池聚光条件下的最高效率.

实践证明, GaInP/GaAs/InGaAs (1.0 eV)倒装结构太阳能电池由于能实现更好的电流匹配, 已成为国内外近几年三结太阳能电池研究的热点. 而对于

\* 北京市自然科学基金(批准号: 2151004)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: nfchen@ncepu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: jikunchen@ustb.edu.cn

双晶格失配 GaInP/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/In<sub>y</sub>Ga<sub>1-y</sub>As 倒装三结太阳能电池国内外的相关报道较少. 仅 Geisz 等 [7,8] 在 2008 年对底、中电池禁带宽度组合为 0.89 eV 和 1.34 eV 均与 GaAs 衬底失配的双失配倒装三结太阳能电池的报道, 且进行理论计算时假设光子能量 100% 被吸收, 这与实际情况也存在很大误差. 对于双失配 GaInP/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/In<sub>y</sub>Ga<sub>1-y</sub>As 倒装三结太阳能电池除因其次生长的中电池与首先生长的 GaInP 顶电池存在晶格失配外, 与最后生长的底电池也存在晶格失配, 故此时评价失配位错对电池光电性能的影响尤为重要. 本文基于细致平衡原理的基本方程式出发, 应用 MATLAB 语言对 GaInP/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/In<sub>y</sub>Ga<sub>1-y</sub>As 倒装三结太阳能电池底、中电池的禁带宽度以及各子电池的厚度进行模拟优化, 使各子电池的电流密度更加匹配, 同时分析位错密度的影响. 位错作为少子的复合中心, 会降低少子的寿命进而影响其扩散长度, 这样我们就建立起位错密度和电池的光电转化效率之间的关系, 来指导倒装结构电池体系的生产.

## 2 方 法

为了尽量避免大失配 In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As 底电池的缺陷延伸至中、顶电池, 电池在外延过程中进行倒装生长, 即优先生长晶格匹配度较高的顶电池和中电池, 最后生长 In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As 底电池, 实现倒装结构电池的制备, 具体器件结构如图 1 所示.

实验采用 AM1.5D 光谱, 500 倍聚光 (500 suns), 温度设为 300 K. 参照文献 [9] 建立的计算模型, 假设各子电池 N 型区厚度为 0.1 μm, 均匀掺杂, 发射极施主掺杂浓度  $N_d = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , 基区受主掺杂浓度  $N_a = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . 各子电池 P 型区厚度设为可调节, 以便我们更好地进行电池结构优化. 计算中我们还要做如下假设: 1) 没有串联电阻损失和理想的隧穿结; 2) 材料表面没有反射损失; 3) 光子吸收从 300 nm 处开始计算.

在不考虑二极管影响因子和串联电阻的影响, 作为理想的太阳电池, 其伏安特性方程可表示为

$$V = \frac{k_B T}{q} \left[ \ln \left( \frac{J_{sc,1} - J}{J_{o,1}} + 1 \right) + \ln \left( \frac{J_{sc,2} - J}{J_{o,2}} + 1 \right) + \ln \left( \frac{J_{sc,3} - J}{J_{o,3}} + 1 \right) \right], \quad (1)$$

其中,  $q$  为电子电量;  $k_B$  为玻尔兹曼常数;  $T$  为绝对温度;  $J_{sc,i}$ ,  $J_{o,i}$  ( $i = 1, 2, 3$ ) 分别表示电池正装后第  $i$  结电池的短路电流密度和暗电流密度.

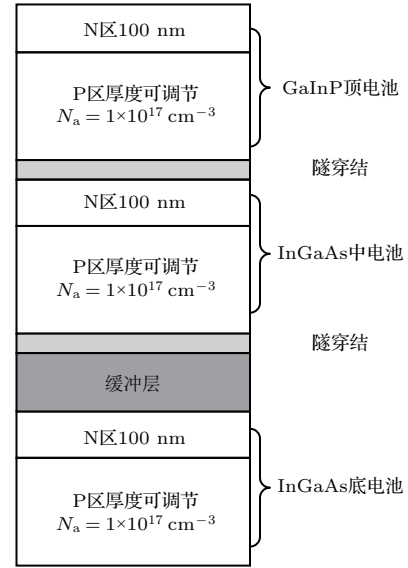


图 1 GaInP/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/In<sub>y</sub>Ga<sub>1-y</sub>As 倒装结构三结太阳能电池器件参数模型

Fig. 1. Device parameters for model of the GaInP/GaInAs/Ge triple junction (3J) solar cell in an inverted structure.

各子电池的短路电流密度  $J_{sc}$  可通过下式求得

$$J_{sc} = \int_0^\infty q \Phi_{inc}(\lambda) QE(\lambda) d\lambda, \quad (2)$$

其中,  $QE$  为电池的外量子效率, 本文所建立的计算模型考虑的是实际情况下的量子效率, 考虑材料吸收系数、少子扩散长度、寿命, 表面复合速度等因素的影响, 具体计算方程参照文献 [10].  $\Phi_{inc}(\lambda)$  为电池入射光谱某一特定波长处的光子通量密度, 对于顶电池的入射光  $\Phi_{inc}(\lambda)$  就是太阳光  $\Phi_s$ , 下面各子电池的入射光应是经过上面电池滤光后的部分, 则第  $m$  结子电池的入射光为

$$\Phi_m(\lambda) = \Phi_s(\lambda) \exp \left[ - \sum_{i=1}^{m-1} \alpha_i(\lambda) t_i \right], \quad (3)$$

其中,  $\alpha_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) 为第  $i$  结子电池的吸收系数, 为揭示各子电池对光的吸收限随带隙的变化情况, 模型中各子电池吸收系数参照 Kurtz 等 [11] 在靠近吸收限附近拟合较好的以带隙  $E_g$  为变量的表达式;  $t_i$  ( $i = 1, 2, 3$ ) 为第  $i$  结子电池的厚度,  $t_i$  设计为可调整, 通过调节各子电池的厚度来匹配各子电池的短路电流密度, 节约成本, 提高电池光电转化效率.

$QE(\lambda)$  描述的是太阳电池在某特定波长上每秒钟产生载流子数与入射光子数之比, 为太阳电池

性能优劣的表征,其可以很好地反映出电池对于太阳光谱的利用程度. 本文主要参考 Shockley 关于 P-N 结的理论模型来解决光生载流子的复合、吸收与扩散. 这样模型建立中要知道的参数包括发射区、基区的少子寿命  $\tau_{n,p}$ , 空穴、电子在发射区、基区的扩散长度  $L_{n,p}$ 、扩散系数  $D_{n,p}$ , 表面复合速度  $S_{n,p}$ , 它们彼此之间的关系如下:

$$D_n = \frac{k_B T \mu_n}{q}, \quad D_p = \frac{k_B T \mu_p}{q},$$

$$L_n^2 = D_n \tau_n, \quad L_p^2 = D_p \tau_p, \quad (4)$$

其中,  $k_B$  为玻尔兹曼常数;  $T$  为绝对温度;  $\mu_{n,p}$  为空穴(电子)在发射区(基区)的迁移率, 各子电池的经验值参照文献 [12,13].

本文主要目的是讨论失配位错对倒装结构太阳电池性能的影响. 一般来讲, 生长合适的缓冲层是一种降低缺陷的手段. 虽然其次生长的  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  中、底电池与衬底 GaAs 的失配应力可以通过在缓冲层形成一定的失配位错来缓解, 然而

穿透位错仍存在于电池的核心区域里, 扮演着少数载流子复合中心的角色, 主要表现为电池位错密度越大, 缺陷越多. 位错密度的存在主要影响少数载流子寿命  $\tau$ , 它主要受三部分影响, 辐射复合、俄歇复合和位错引起的复合, 即

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{\text{rad}}} + \frac{1}{\tau_{\text{Aug}}} + \frac{1}{\tau_{\text{SRH}}}$$

$$= B_{\text{rad}}N + B_{\text{Aug}}N^2 + \frac{\pi^3 D T_d}{4}, \quad (5)$$

其中,  $\tau_{\text{rad}}$ ,  $\tau_{\text{Aug}}$ ,  $\tau_{\text{SRH}}$  分别是辐射复合、俄歇复合和位错引起的复合对少子寿命的影响.  $\tau_{\text{rad}}$ ,  $\tau_{\text{Aug}}$  分别只受辐射复合系数  $B_{\text{rad}}$ 、俄歇复合系数  $B_{\text{Aug}}$  和发射区或基区的掺杂浓度  $N$  的影响, 对于  $\tau_{\text{SRH}}$ , Yamaguchi 等 [14] 通过假设穿透位错均匀分布在电池体系中, 通过求解少数载流子的位错传输的一维连续性方程得到.  $T_d$  是位错密度, 这也是本文重点考虑的因子, 参照文献建立的方程式, 就得到了位错密度  $T_d$  和理论光电转化效率  $\eta$  之间的关系式. 模型中各参数的详细数据见表 1.

表 1 模型中分别用到的 GaInP,  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  和  $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$  各子电池材料的相关参数  
Tabel 1. Material parameters used for simulating GaInP,  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  and  $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$  subcells, respectively.

子电池	$\mu_n / \text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	$\mu_p / \text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	$B_{\text{rad}} / \text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$	$B_{\text{Aug}} / \text{s}$	$S_{n,p} / \text{cm} \cdot \text{s}^{-1}$
GaInP	40	1139	$1 \times 10^{-10}$	$3 \times 10^{-30}$	$10^4$
$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$	95.2	6646.8	$7.2 \times 10^{-10}$	$1 \times 10^{-30}$	$10^4$
$\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$	147.3	4566.5	$0.96 \times 10^{-10}$	$7 \times 10^{-29}$	$10^4$

### 3 结果与讨论

#### 3.1 电池结构优化

如图 2 所示, 在 AM1.5D, 500 倍聚光 (500 suns) 下, 假设顶、中、底电池为无穷厚时, 电池理论转化效率和底、中电池禁带宽度之间的关系. 带隙组合为 1.90/1.42/0.99 eV (图中 B 点) 理论转化效率为 48.38%, 此时电池结构为 GaInP/GaAs/ $\text{In}_{0.32}\text{Ga}_{0.68}\text{As}$ . 此时顶电池 GaInP (1.90 eV) 和中电池 GaAs (1.42 eV) 与衬底保持完全晶格匹配, 底电池  $\text{In}_{0.32}\text{Ga}_{0.68}\text{As}$  与衬底存在 2.24% 的晶格失配. 若要提高电池的效率, 又同时保证电池的生长质量, 需在首先生长的 GaInP 顶电池与衬底晶格匹配的前提下, 适当降低中电池和底电池的禁带宽度, 即提高 In 在中电池和底电池  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  中的组

分. A 点带隙组合为 1.90/1.38/0.94 eV, 对应的电池结构为 GaInP/ $\text{In}_{0.02}\text{Ga}_{0.98}\text{As}$ / $\text{In}_{0.36}\text{Ga}_{0.64}\text{As}$ ,

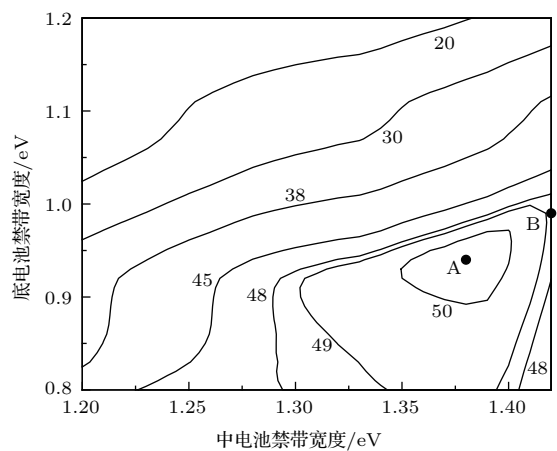


图 2 以底、中电池带隙为变量的电池理论转化效率等高图  
Fig. 2. Contour plot of theoretical  $\eta$  as a function of the lower two subcells of  $E_g$ .



是失配体系组合 GaInP/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/In<sub>y</sub>Ga<sub>1-y</sub>As 倒装三结太阳能电池的最优带隙, 光电转化效率最高, 可以达到 50.34%, 较单失配 GaInP/GaAs/In<sub>0.32</sub>Ga<sub>0.68</sub>As (0.99 eV) 倒装结构三结太阳能电池效率提高了近 2 个百分点, 但在顶电池和中电池间又引入了 0.17% 的晶格失配. 这必然导致位错密度的增加, 缺陷增多, 直接影响少子寿命. 具体影响将在下文做详细讨论. 对于失配体系组合 A, B 中底电池和中电池分别引入的 2.36% 和 2.24% 的大失配通过阶变缓冲层技术来释放, 考虑到 In<sub>x</sub>Al<sub>1-x</sub>As 材料禁带宽度比 In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As 大, 对底电池材料有良好的透光性, 采用梯度组分渐变的 In<sub>x</sub>Al<sub>1-x</sub>As 作为中电池和底电池之间的晶格失配缓冲层进行过渡<sup>[15]</sup>, 以保证由此产生的位错密度在我们可接受范围内.

对于双失配体系组合 A, 在 GaInP(1.90 eV) 顶电池上生长 In<sub>0.02</sub>Ga<sub>0.98</sub>As(1.38 eV) 中电池时, 中电池受到失配应力的影响, 刚开始与底电池是完全共格的, 即完全应变; 随着应变层厚度的增加, 弹性应变能也逐渐积累, 随着外延膜增加到某一厚度时弹性应变能以失配位错的形式开始释放, 出现弛豫, 相应的薄膜厚度即为中电池 In<sub>0.02</sub>Ga<sub>0.98</sub>As 的临界厚度. 本文采用 PB 模型计算外延层厚度  $h_c$ <sup>[16,17]</sup> 的表达式为:

$$h_c = \frac{1}{16\pi\sqrt{2}f^2} \left( \frac{1-\nu}{1+\nu} \right) \left[ \frac{b^2}{a(x)} \right] \ln \frac{h_c}{b}, \quad (6)$$

其中,  $f$  为 GaInP(1.90 eV) 顶电池和 In<sub>0.02</sub>Ga<sub>0.98</sub>As (1.38 eV) 中电池的晶格失配度;  $\nu$  为泊松比, 这里取 0.31;  $b$  为中电池对顶电池界面的滑移距离, 它具有伯格矢量的数量级;  $a(x)$  为 In<sub>0.02</sub>Ga<sub>0.98</sub>As (1.38 eV) 中电池弛豫后体材料的晶格常数.

通过 (6) 式计算得到 In<sub>0.02</sub>Ga<sub>0.98</sub>As(1.38 eV) 中电池的临界厚度  $h_c = 7086.3$  nm, 此厚度可以作为接下来双失配体系组合 A 中电池 In<sub>0.02</sub>Ga<sub>0.98</sub>As(1.38 eV) 厚度优化的最大临界厚度.

下面我们需要确定失配体系组合 A, B 各子电池的厚度. 由于底电池厚度对顶电池、中电池的光谱吸收没有直接影响, 首先假设组合 A, B 底电池厚度均为 2  $\mu\text{m}$ . 图 3 是在 AM1.5D, 500 倍聚光 (500 suns) 下, 组合 A, B 的理论转化效率随顶、中电池厚度的变化关系. 对于串联多结电池, 整个器件的输出电流受最小的子电池电流限流. 通过分析失配体系 A, B 各子电池的短路电流密度, 由于底电池电流足够大, 器件的输出电流只与  $J_{sc,1}$ ,  $J_{sc,2}$  有关, 从而也验证了选取 2  $\mu\text{m}$  底电池厚度进行顶、中电池厚度优化的正确性. 随顶电池厚度的增加, 顶电池吸收的光强增加, 则到达下一结电池的光强度随之减弱, 而底电池短路电流密度同时受顶、中电池厚度的影响, 这样就得到一个某顶、中电池厚度下, 顶、中、底电池电流相等的点, 即电流匹配点. 对于双失配体系组合 A, 如图 3(a), 当顶、中电池厚度分别增加到 6.4, 3.4  $\mu\text{m}$ , 各子电池的吸收的光强

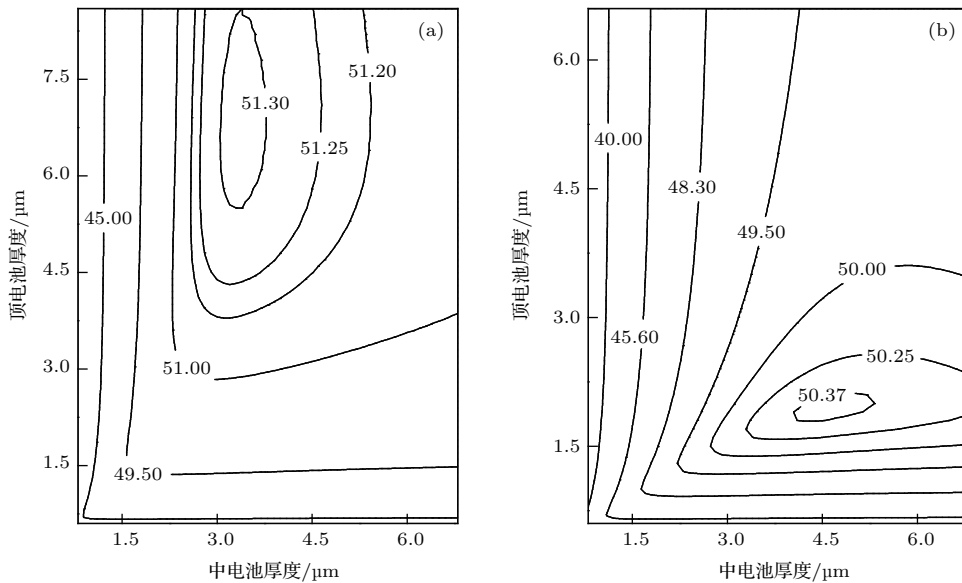


图 3 以顶、中电池厚度为变量的电池理论转化效率等高图 (a) 组合 A; (b) 组合 B

Fig. 3. Contour plot of theoretical  $\eta$  as a function of the upper two subcells of  $t$ : (a) Combination A; (b) combination B.

趋于相等, 此时理论转化效率最高. 综合材料成本及实际生产条件, 取顶、中电池厚度分别为  $t_1 = 4 \mu\text{m}$ ,  $t_2 = 3.2 \mu\text{m}$ , 此厚度组合也是接下来分析失配体系组合 A 选取的各子电池的最佳厚度. 如表 2 所列, 此时各子电池短路电流密度分别为 7012.30, 7311.60, 7624.80 mA/cm<sup>2</sup>, 电流匹配度较高, 理论转化效率为 51.22%, 较各子电池厚度为无穷厚时提高了近 1%. 这种现象我们归因于 P-N 结内部少子的复合, 当电池厚度一再增加时, 光子虽然可以更充分地被吸收形成电子空穴对, 但由于它距空间电荷区更远, 使得更多的电子空穴对在未扩散到电荷耗尽区以前就复合掉了, 不仅未形成有效的光生电流, 反而使得此时的量子效率出现下降. 对于单失配体系组合 B, 见图 3(b), 当顶、

中电池厚度分别增加到 1.9 和 4.5  $\mu\text{m}$  时, 此时光电转化效率最高, 此厚度也作为失配体系组合 B 位错分析的最优厚度. 此时各子电池的短路电流密度分别为 6853.00, 6874.60, 7014.60 mA/cm<sup>2</sup>, 得益于各子电池的最优厚度, 失配体系组合 B 电流匹配度明显高于 A, 同时开路电压较失配体系组合 A 提高了 2.02%, 但由于双失配体系组合 A 更优的带隙组合, 其短路电流密度较单失配体系组合 B 提高了 2.32%, 故理论转化效率较组合 B 上升了 0.8%. 而对于失配体系组合 A, B 底电池厚度的选取, 结合表 2, 由于组合 A, B 在各自最佳厚度时得到的底电池的短路电流密度较顶、中电池差别不大, 且稍高于另外两结子电池, 因此继续优化底电池厚度意义不大.

表 2 失配体系组合 A, B 倒装结构三结太阳能电池的电学性能参数

Table 2. Electrical performance parameters of 3J solar cell in an inverted structure for the metamorphic (MM) combination A and B.

电学性能参数	$J_{sc}/\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$			$V_{oc}/\text{V}$	$\eta/\%$
	$J_{sc,1}$	$J_{sc,2}$	$J_{sc,3}$		
GaInP/In <sub>0.02</sub> Ga <sub>0.98</sub> As/In <sub>0.36</sub> Ga <sub>0.64</sub> As	7012.30	7311.60	7624.80	3.97	51.22
GaInP/GaAs/In <sub>0.32</sub> Ga <sub>0.68</sub> As	6853.00	6874.60	7014.60	4.05	50.39

### 3.2 失配体系位错分析

在明确了失配电池体系最优结构后, 我们现在开始考量失配体系内的位错密度对最终电池性能的影响. 对于双失配体系组合 A, 晶格失配度为 0.17% In<sub>0.02</sub>Ga<sub>0.98</sub>As(1.38 eV) 中电池的位错分析, 我们参考 Matthews 等 [18,19] 针对失配位错和插入位错关系所提出的理论: 插入位错横向滑移后会在平行于界面处留下一根长度为  $l$  的 60° 失配位错, 通过此来释放掉体系内所存在的弹性应变. 当然这种假设是建立在穿透位错在基底已经存在的前提下, 当外延膜厚度超过临界厚度, 将形成位错的成核, 与临界厚度理论并不矛盾. 这种解释已经在实验上得到了充分的验证. 即 60° 的失配位错正交排列, 朝着  $\langle 110 \rangle$  与  $\langle -110 \rangle$  晶向, 向  $\{111\}$  平面滑移. 由文献 [20, 21] 可以构建插入位错密度  $\rho$  同失配位错长度  $l$ , InGaAs(1.38 eV) 中电池失配度  $f$  和 GaInP 顶电池尺寸  $L$  之间的定量关系, 如下式:

$$\rho = \frac{4f}{b} \left( \frac{1}{l} - \frac{1}{L} \right). \quad (7)$$

若不考虑底电池位错密度的影响, 假设 GaInP 顶电池晶片尺寸  $L$  为 1 cm, 失配位错长度  $l$  为  $L$  的一半, 代入 (7) 式计算得到 InGaAs(1.38 eV) 中电池中的插入位错密度为  $1.70 \times 10^5 \text{ cm}^{-2}$ , 接下来我们只需把原计算模型中的少子寿命  $\tau$  代入包含位错引起的新变量的新变量, 就得到位错密度与电池转化效率的关系. 图 4 和图 5 是 AM1.5D, 500 倍聚光 (500 suns) 下, 计算的底电池的位错密度与失配电池体系组合 A, B 的电学性能参数的关系. 参照图 4, 随底电池位错密度的增加, 失配电池体系组合 A, B 的短路电流密度的变化趋势由水平趋于直线下降, 呈分段函数分布. 对于电池体系组合 A, B, 当底电池的位错密度分别大于  $2.56 \times 10^6$ ,  $6.4 \times 10^5 \text{ cm}^{-2}$  时, 短路电流密度下降趋势明显. 这主要是由于低的位错密度下, 失配电池体系组合 A, B 的短路电流密度主要取决于顶电池, 这也与表 2 得到的结果相符合. 同理失配电池体系组合 A, B 的开路电压较短路电流密度随底电池的位错密度的变化趋势大致相同. 结合图 5 所示, 双失配电

池体系组合 A 理论转化效率明显高于单失配体系组合 B, 若不考虑底电池位错密度的影响, 失配电池体系组合 A 较 B 光电转化效率提高了 0.3%, 从而证明了具有更优带隙组合的双异质结失配体系组合 A 对于高效太阳电池设计更有优势.

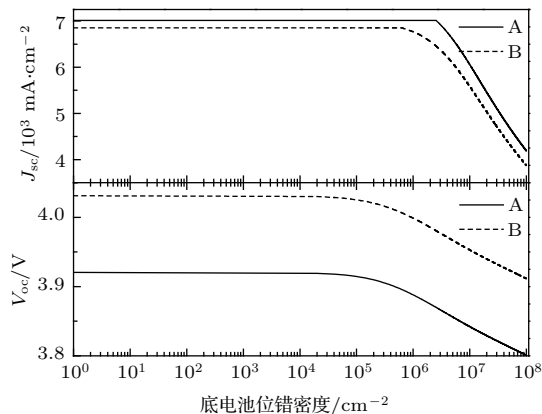


图 4 底电池位错密度对失配体系组合 A, B 短路电流密度 ( $J_{sc}$ ) 和开路电压 ( $V_{oc}$ ) 的影响  
Fig. 4. The  $J_{sc}$  and  $V_{oc}$  versus dislocation density (DD) in the bottom junction for the MM combination A and B.

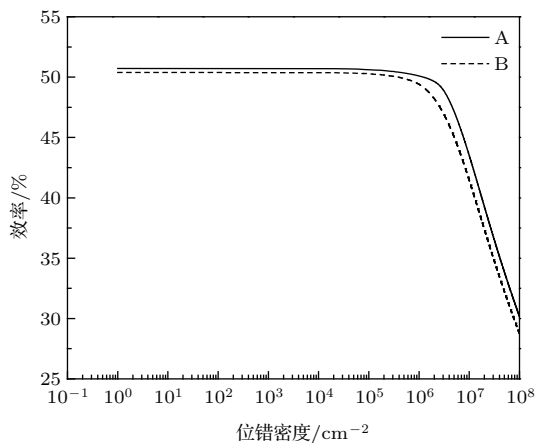


图 5 底电池位错密度对失配体系组合 A, B 的理论转化效率的影响  
Fig. 5. The theoretical  $\eta$  versus DD in the bottom junction for the MM combination A and B.

考虑到实际存在的位错密度, 如果失配位错长度  $l$  小于或者大于  $2/L$  会怎样呢? 失配位错长度的变化主要是由插入位错的运动引起的, 考虑到缓冲层的结构和材料生长条件发生变化, 必然导致不同的  $l$ , 当  $l$  大于  $2/L$  时, 失配体系组合 A 顶、中电池间的位错密度当然实际存在的位错密度还受材料的生长条件和结构的影响, 如若我们在顶电池和中电池之间生长 1—2 层 GaInP 作缓冲层, 双失配体系组合 A 的优势更明显. 显然, 当底电池的位错密度

小于  $10^6 \text{ cm}^{-2}$  时, 电池转换效率的下降趋势并不明显. 然而, 大量实验结果表明失配电池体系中位错密度大多约在  $10^5$ — $10^7 \text{ cm}^{-2}$ , 这样看来这个量级的位错密度对电池性能的影响还是很大的, 因此生长合适的渐变缓冲层对于降低失配电池体系的位错是必须的, 这就要求在渐变缓冲层生长过程中严格控制好它的生长结构和条件, 以期获得电学性能理想的电池.

### 3.3 试验验证

图 6 给出了失配体系组合 A, B 的外量子效率曲线 (EQE). 图中双失配体系组合 A 中电池  $\text{In}_{0.02}\text{Ga}_{0.98}\text{As}$  和底电池  $\text{In}_{0.36}\text{Ga}_{0.64}\text{As}$  的吸收限分别较单失配体系组合 B GaAs 中电池和  $\text{In}_{0.32}\text{Ga}_{0.68}\text{As}$  底电池长 30—50 nm, 同时失配体系组合 A 的中、底电池分别在组合 B 中、底电池的吸收限附近也体现了比较高的 EQE. 这是因为通过带隙优化后, 双失配体系组合 A 具有更低禁带宽度的中电池和底电池来保证对更宽太阳光谱能量范围的吸收. 在 AM1.5D 光谱下, 通过计算得到失配体系组合 A, B 中、底电池电流基本匹配, 分别为 11.7 和 10.4  $\text{mA}/\text{cm}^2$ , 差异最大之处主要体现在顶电池, 双失配组合体系 A GaInP 顶电池电流密度为 11.3  $\text{mA}/\text{cm}^2$ , 较中、底电池电流密度降低了 3.4%, 在整个三结电池串接方式中起到了限流作用. 而单失配体系组合 B GaInP 顶电池短路电流密度为 10.3  $\text{mA}/\text{cm}^2$ , 和 GaAs 中电池、 $\text{In}_{0.32}\text{Ga}_{0.68}\text{As}$  底电池电流密度基本接近, 这也是为避免电流损失, 将组合 B GaInP 吸收层变薄的原因所在.

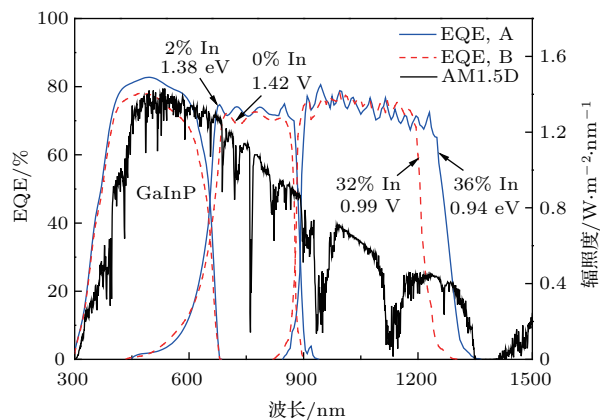


图 6 (网刊彩色) 失配体系组合 A, B 的 EQE 曲线  
Fig. 6. (color online) EQE curve of the MM combination A and B.

图7为所测试的失配体系组合A, B两类倒装三结太阳能电池的 $J$ - $V$ 曲线. 测试前采用独立的子电池对光谱进行分段校准, 测试光谱功率为 $38.4 \text{ W/cm}^2$  (AM1.5D, 500 suns), 环境温度为 $25 \text{ }^\circ\text{C}$ , 用于测试的电池芯片面积为 $30.25 \text{ mm}^2$ . 由图可知, 双失配体系组合A的开路电压为 $3.23 \text{ V}$ , 短路电流密度为 $5598.46 \text{ mA/cm}^2$ , 而单失配体系组合B的开路电压和短路电流分别为 $3.43 \text{ V}$ 和 $5090.46 \text{ mA/cm}^2$ , 光电转化效率为 $39.50\%$ . 可见, 双失配倒装三结太阳能电池开路电压较单失配倒装三结太阳能电池降低了近 $0.2 \text{ V}$ , 但短路电流密度提高了 $508 \text{ mA/cm}^2$ , 转化效率达到 $40.01\%$ , 比单失配倒装三结太阳能电池的效率提高了 $0.4$ 个百分点, 双失配体系组合A的效率优势与图5基本符合, 从而也证明了引入的 $0.17\%$ 的失配带来的更优的带隙组合是可取的. 两种失配体系组合对应的开路电压、短路电流以及光电转化效率的变化趋势也与图4和图5的结果完全符合, 从而也验证了本文所建立模型的正确性.

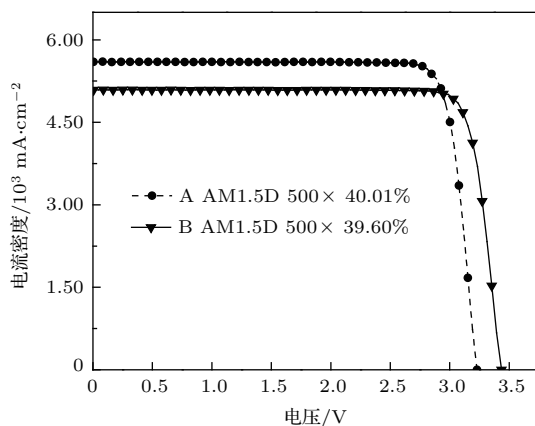


图7 失配体系组合A, B的电流密度电压( $J$ - $V$ )曲线

Fig. 7.  $J$ - $V$  curve of the MM combination A and B.

## 4 结 论

本文在进行电池模拟计算时, 尽可能结合实际量子效率与电池内部参数的关系, 以求获得最精确的电池最优参数组合. 最优带隙组合( $1.90, 1.38, 0.94 \text{ eV}$ )的GaInP/In<sub>0.02</sub>Ga<sub>0.98</sub>As/In<sub>0.36</sub>Ga<sub>0.64</sub>As双失配电池体系在最优厚度组合( $4.0, 3.2, 2 \text{ }\mu\text{m}$ )得到理论光电效率为 $51.22\%$ , 较GaInP/GaAs/In<sub>0.32</sub>Ga<sub>0.68</sub>As单失配倒装三结太阳能电池在最佳厚度组合( $1.9, 4.5$ 和 $2 \text{ }\mu\text{m}$ )时, 效率提高了 $0.8\%$ . 忽略底电池位错的影响, 计入双失配

电池体系内晶格失配度为 $0.17\%$  In<sub>0.02</sub>Ga<sub>0.98</sub>As中电池引入的 $1.70 \times 10^5 \text{ cm}^{-2}$ 的位错密度, 较GaInP/GaAs/In<sub>0.32</sub>Ga<sub>0.68</sub>As单失配电池体系效率仍提高了 $0.3$ 个百分点. 最后基于两种失配电池体系, 制备了面积为 $30.25 \text{ mm}^2$ 太阳能电池芯片. 通过测得的 $J$ - $V$ 曲线可知, 双失配体系组合的开路电压和短路电流密度分别为 $3.23 \text{ V}$ 和 $5598.46 \text{ mA/cm}^2$ , 较单失配体系组合开路电压降低了近 $0.2 \text{ V}$ , 但短路电流密度提高了 $508 \text{ mA/cm}^2$ , 转化效率达到 $40.01\%$ , 比单失配倒装三结太阳能电池效率提高了 $0.4$ 个百分点.

## 参考文献

- [1] King R R, Boca A, Hong W, Liu X Q, Bhusari D, Larrabee D, Edmondson K M, Law D C, Fetzer C M, Mesropian S, Karam N H 2009 *Proceedings of the 24th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition* Hamburg, Germany, Sep. 21–25, 2009 p55
- [2] Philipps S P, Bett A W, Horowitz K, Kurtz S <http://www.ise.fraunhofer.de/en/publications/veroeffentlichungen-pdf-dateien-en/studien-undkonzeptpapiere/current-status-of-concentrator-photovoltaic-cpv-technology.pdf> [2016-7-20]
- [3] Green M A, Emery K, Hishikawa Y, Warta W, Dunlop E D 2015 *Prog. Photovolt: Res. Appl.* **23** 805
- [4] Green M A, Emery K, Hishikawa Y, Warta W, Dunlop E D 2015 *Prog. Photovolt: Res. Appl.* **23** 1
- [5] Hashem I E, Carlin C Z, Hagar B G, Colter P C, Bedair S M 2016 *J. Appl. Phys.* **119** 172
- [6] Takamoto T, Washio H, Juso H 2014 *Proceedings of the 40th IEEE Photovoltaic Specialists Conference* Denver, Colorado, USA, June 8–13, 2014 p1
- [7] Geisz J F, Kurtz S R, Wanlass M W, Ward J S, Duda A, Friedman D J, Olson J M, McMahon W E, Moriarty T E, Kieh J T, Romero M J, Norman A G, Jones K M 2008 *Proceedings of the 33th IEEE Photovoltaic Specialists Conference* San Diego, California, USA, May 11–16, 2008 p1
- [8] Geisz J F, Kurtz S R, Wanlass M W, Ward J S, Duda A, Friedman D J, Olson J M, McMahon W E, Moriarty T E, Kieh J T, Romero M J, Norman A G, Jones K M 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 123505
- [9] Faine P, Kurtz S R, Olson J M 1990 *J. Appl. Phys.* **68** 339
- [10] Luque A, Hegedus S 2011 *Handbook of Photovoltaic Science and Engineering* (Second Edition) (New York: Wiley) pp323–326
- [11] Kurtz S R, Olson J M, Friedman D J, Geisz J F, Bertness K A, Kibbler A E 1999 *Proceedings of the Materials Research Society's Spring Meeting* San Francisco, California, USA, April 5–9, 1999 p95



- [12] Ghannam M Y, Poortmans J, Nijs J F, Mertens R P 2003 *Proceedings of the 3rd world Conference on Photovoltaic Energy Conversion* Osaka, Japan, May 11–18, 2003 p666
- [13] Yamaguchi M, Amano C 1985 *J. Appl. Phys.* **58** 3601
- [14] Yamaguchi M, Amano C, Itoh Y 1989 *J. Appl. Phys.* **66** 915
- [15] Zhang Y, Shan Z F, Cai J J, Wu H Q, Li J C, Chen K X, Lin Z W, Wang X W 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 158802 (in Chinese) [张永, 单智发, 蔡建九, 吴洪清, 李俊承, 陈凯轩, 林志伟, 王向武 2013 物理学报 **62** 158802]
- [16] Orders P J, Usher B F 1987 *Appl. Phys. Lett.* **50** 980
- [17] People R, Bean J C. 1985 *Appl. Phys. Lett.* **47** 322
- [18] Matthews J W, Blakeslee A E 1974 *J. Cryst. Growth* **27** 118
- [19] Matthews J W, Mader S, Light T B 1970 *J. Appl. Phys.* **41** 3800
- [20] Yastrubchak O, Wosinski T, Domagala J Z, Lusakowska E, Figielski T, Pecz B, Toth A L 2004 *J. Phys.: Condens. Matter* **16** S1
- [21] Chang K H, Bhattacharya P K, Gibala R 1989 *J. Appl. Phys.* **66** 2993

# Analyses of the effect of mismatch on the performance of inverted GaInP/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/In<sub>y</sub>Ga<sub>1-y</sub>As triple-junction solar cells\*

Ma Da-Yan<sup>1)</sup> Chen Nuo-Fu<sup>1)†</sup> Fu Rui<sup>1)</sup> Liu Hu<sup>1)2)</sup> Bai Yi-Ming<sup>1)</sup>  
Mi Zhe<sup>1)</sup> Chen Ji-Kun<sup>3)‡</sup>

1) (School of Renewable Energy Sources, North China Electric Power University, Beijing 102206, China)

2) (Department of Mathematics and Physics, Shijiazhuang Tiedao University, Shijiazhuang 050041, China)

3) (School of Materials Science and Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China)

( Received 30 August 2016; revised manuscript received 25 October 2016 )

## Abstract

The traditional lattice matched GaInP/(In) GaAs/Ge triple-junction (3J) solar cell has no much room to enhance its practical achievable conversion efficiency because of its inappropriate ensemble of bandgap energies. According to the P-N junction formation mechanism and the close equilibrium condition, we explore a series of computational codes in the framework of MATLAB to simulate and optimize the inverted structure of series-connected 3J solar cells with a fixed top bandgap of 1.90 eV on GaAs substrate. In this paper, structural optimization is conducted in the real device design, because the realistic ( $QE$ ) is closely related to a set of material parameters in the subcell, i.e., the absorption coefficient of material, subcell thickness, minority carrier diffusion length, surface recombination velocity, etc.

The results indicate improved inverted 3J solar cells with nearly optimized bandgaps of 1.90, 1.38, and 0.94 eV, by utilizing two independently lattice-mismatches (0.17% and 2.36% misfit respectively) to the GaAs substrate. A theoretical efficiency of 51.25% at 500 suns is demonstrated with this inverted design with the optimal thickness (4  $\mu\text{m}$  GaInP top and 3.1  $\mu\text{m}$  InGaAs middle). By contrast, the efficiency with the infinite thickness of subcells is reduced by 1%, which is mainly attributed to the effect of minority carrier recombination on  $J_{sc}$ . Exactly speaking, if photo-generated carriers make a contribution to  $J_{sc}$ , they must be collected effectively by the P-N junction before recombining. A new model is proposed based on the effect of dislocation on the metamorphic structure properties by regarding dislocation as minority-carrier recombination center. Our calculation indicates that threading dislocations density in the middle junction is approximate to  $1.70 \times 10^5 \text{ cm}^{-2}$  when dislocations in the gradient buffer layer are neglected. The theoretical efficiency is increased by 0.3% compared with the inverted design containing a single metamorphic junction.

As a result, based on the two metamorphic combinations, a solar cell with an area of 30.25  $\text{mm}^2$  is prepared. The efficiency of the designed cell with two lattice-mismatched junctions reaches 40.01% at 500 suns (AM1.5D, 38.4  $\text{W}/\text{cm}^2$ , 25 °C), which is 0.4% higher than that of the single metamorphic junction 3J solar cell.

**Keywords:** triple-junction solar cell, inverted structure, dislocation, two lattice-mismatched junctions

**PACS:** 88.40.jp, 88.40.H-, 88.40.hj

**DOI:** 10.7498/aps.66.048801

\* Project supported by the Natural Science Foundation of Beijing, China (Grant No. 2151004).

† Corresponding author. E-mail: [nfchen@ncepu.edu.cn](mailto:nfchen@ncepu.edu.cn)

‡ Corresponding author. E-mail: [jikunchen@ustb.edu.cn](mailto:jikunchen@ustb.edu.cn)