

硅锗量子阱结构在硅异质结太阳能电池中应用的数值模拟

张晓宇 张丽平 马忠权 刘正新

Numerical simulation of silicon heterojunction solar cells with Si/Si_{1-x}Ge_x quantum wells

Zhang Xiao-Yu Zhang Li-Ping Ma Zhong-Quan Liu Zheng-Xin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 138801 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.138801

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.138801>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I13>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

Al 纳米颗粒增强微晶硅薄膜太阳能电池光吸收的模拟研究

Numerical simulation of light absorption enhancement in microcrystalline silicon solar cells with Al nanoparticle arrays

物理学报.2015, 64(24): 248801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.248801>

电子辐照下 GaAs/Ge 太阳能电池载流子输运机理研究

Carrier transport mechanism of GaAs/Ge solar cells under electrons irradiation

物理学报.2015, 64(10): 108802 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.108802>

聚合物和小分子叠层结构有机太阳能电池研究

A Study of tandem structure organic solar cells composed of polymer and small molecular sub-cells

物理学报.2014, 63(21): 218801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.218801>

前后光栅周期对于双光栅结构薄膜太阳能电池光俘获效应的影响

Influence of front and back grating period on light trapping of dual-grating structure thin film solar cell

物理学报.2014, 63(19): 198801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.198801>

硅基薄膜太阳能电池一维光子晶体背反射器的模拟设计与制备

Simulation, design and fabrication of one-dimensional photonic crystal back reflector for silicon thin film solar cell

物理学报.2014, 63(12): 128801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.128801>

硅锗量子阱结构在硅异质结太阳能电池中应用的数值模拟*

张晓宇¹⁾²⁾ 张丽平^{2)†} 马忠权¹⁾ 刘正新²⁾

1) (上海大学理学院, 上海 200444)

2) (中国科学院上海微系统与信息技术研究所, 上海 201800)

(2016年3月9日收到; 2016年4月5日收到修改稿)

利用半导体工艺和器件仿真软件 silvaco TCAD (Technology Computer Aided Design), 模拟研究了采用硅/硅锗合金 (silicon/silicon germanium alloy, Si/Si_{1-x}Ge_x) 量子阱结构作为吸收层的薄膜晶体硅异质结太阳能电池各项性能. 模拟结果显示, 长波段光学吸收随锗含量的增加而增加, 而开路电压则因 Si_{1-x}Ge_x 层带隙的降低而下降. 锗含量为 0.25 时, 短路电流密度的增加补偿了开路电压的衰减, 效率提升 0.2%. 氢化非晶硅/晶体硅 (a-Si:H/c-Si) 界面空穴密度以及 Si_{1-x}Ge_x 量子阱的体空穴载流子浓度制约着空穴费米能级的位置, 进而影响到开路电压的大小. 随着锗含量增加, a-Si:H/c-Si 界面缺陷对开压的影响降低, Si_{1-x}Ge_x 量子阱的体缺陷对开压的影响则相应增加. 高效率含 Si_{1-x}Ge_x 量子阱结构的硅异质结太阳能电池的制备需要 a-Si:H/c-Si 界面缺陷的良好钝化以及高质量 Si_{1-x}Ge_x 量子阱的生长.

关键词: Si/Si_{1-x}Ge_x 量子阱, 异质结太阳能电池, 界面复合, a-Si:H/c-Si

PACS: 88.40.hj, 88.40.jj, 88.40.H-, 61.72.uf

DOI: 10.7498/aps.65.138801

1 引言

薄膜晶体硅异质结 (heterojunction with intrinsic thin layer, HIT) 太阳能电池因其开路电压高、制备工艺温度低和晶体硅 (crystalline silicon, 简记为 c-Si) 可薄型化趋向耗材少^[1]等优点而受到广泛关注. 然而, 光入射面的透明导电氧化物 (transparent conducting oxides, TCO) 和氢化非晶硅 (hydrogenated amorphous silicon, a-Si:H) 薄膜钝化层引起的光损耗可能造成太阳能电池的短路电流密度偏低. 此外, 开路电压对 a-Si:H/c-Si 界面缺陷密度非常敏感. 相关研究指出, 当 a-Si:H/c-Si 界面缺陷密度大于 $1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 时, 开路电压显著降低^[2]. 不同的研究组为 HIT 太阳能电池的理论分析^[3,4]、结构设计^[5-7]、性能优化做出了重要贡献,

其中松下公司通过选材以及工艺改进实现了高效的界面钝化和金属栅线优化, 降低了电阻损耗与光学损耗, 在晶体硅厚度为 98 μm 的晶体硅上制备出短路电流密度 39.5 mA/cm^2 、开路电压 750 mV、转换效率为 24.7% 的高效 HIT 太阳能电池^[8]; 之后通过将背接触结构与 HIT 太阳能电池相结合, 去除了光入射面金属栅线、窗口层锡氧化物 (indium tin oxides, ITO) 半导体透明导电膜以及 a-Si:H 薄膜的光学损耗, 将电池的效率提升到了 25.6%^[9]. 目前, HIT 太阳能电池的主要研究方向集中于界面钝化、串联电阻减小、光学匹配以及对载流子输运机制的研究.

另一方面, 低维尺寸结构如量子阱和量子线、量子点结构因具备量子尺寸限制效应而具有能带可调性、高迁移率和高吸收率等优点^[10], 从而被广泛应用于发光器件^[11]与太阳能电池^[12,13]的设计中.

* 国家自然科学基金 (批准号: 61204005) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zlp_wan@mail.sim.ac.cn

Conibeer等^[14]指出,通过对富硅层与晶体硅交替生长形成的量子点阵列进行工艺调节,有利于实现最佳光学匹配,从而获得高短路电流的全硅型多结太阳能电池. Luque和Marti^[15]经过理论分析指明,量子点阵列中间带结构的形成有利于提高对长波段光子的利用率,从而提高短路电流. Si/Ge量子阱、量子点结构常常被嵌入p-i-n型硅电池的本征区^[16],实验证明在1100—1500 nm波段的光学吸收显著增强^[17]. 然而,由于量子阱和量子点中的热辐射复合效应^[18]、载流子热抽取^[19]以及阵列的不规则性^[20],开路电压常常被降低.

Si/Ge层形成的量子阱结构有利于HIT太阳能电池的光学吸收,然而开路电压会大幅度下降,不利于转换效率的提升;而将 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 层代替Ge层,可以通过调节锗组分 x ,调控短路电流密度的增加且抑制开压的降低,以便实现电学性能的优化. 高质量、低缺陷Si/Si_{1-x}Ge_x异质结外延层与量子阱的生长可以通过超高真空化学气相沉积法实现^[21,22],锗组分和薄膜厚度可以通过调控生长温度、气压和源气体流量比等精确调节.

本文主要利用半导体工艺和器件仿真软件silvaco TCAD (Technology Computer Aided Design)通过数值模拟分析与讨论了锗组分对HIT太阳能电池性能的影响,其中包括锗组分对融入Si/Si_{1-x}Ge_x量子阱的HIT太阳能电池外量子效率以及开路电压、转换效率的影响;不同锗组分时电池电学性能对a-Si:H/c-Si界面缺陷、Si_{1-x}Ge_x量子阱体复合的敏感性. 研究结果对于HIT短路电流的提升、电学性能改善以及载流子输运机制的研究具有一定的物理意义.

2 物理模型与参数

本文采用的HIT太阳能电池参考结构如图1(a)所示,为ITO/a-Si:H(p)/a-Si:H(i)/c-Si(n)/a-Si:H(i)/a-Si:H(n⁺)/Ag型结构. 模型用厚度1 nm含有高斯分布界面缺陷的c-Si层来模拟a-Si:H/c-Si界面层, c-Si的厚度设为100 μm . 模拟中采用的复合模型包括间接复合、热辐射复合以及俄歇复合模型,光学传输模型则为计入干涉效应的光学传输矩阵模型. 通过利用silvaco TCAD软件求解载流子分布、能带结构以及电流密度分布. 为了高精度辨识Si/Si_{1-x}Ge_x量子阱表面

吸收层对器件数值模拟的影响, c-Si表面结构并没有经过任何制绒处理,结果仅代表抛光面的晶体硅HIT太阳能电池. 模拟中采用的电学参数如表1所列.

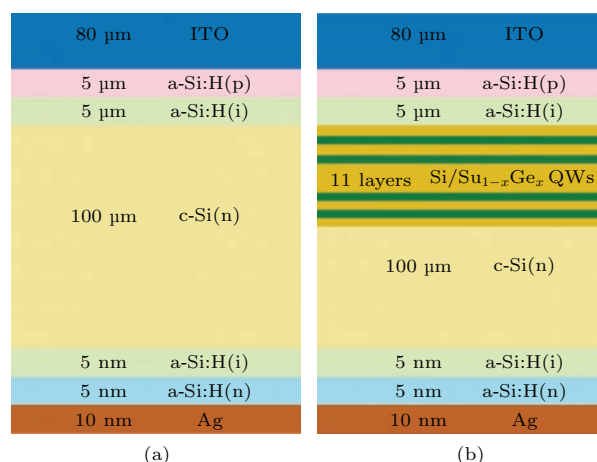


图1 (网刊彩色) 模拟采用的太阳能电池结构示意图 (a) HIT; (b) HIT-QW

Fig. 1. (color online) Structure of solar cells utilized in the simulation: (a) HIT; (b) HIT-QW.

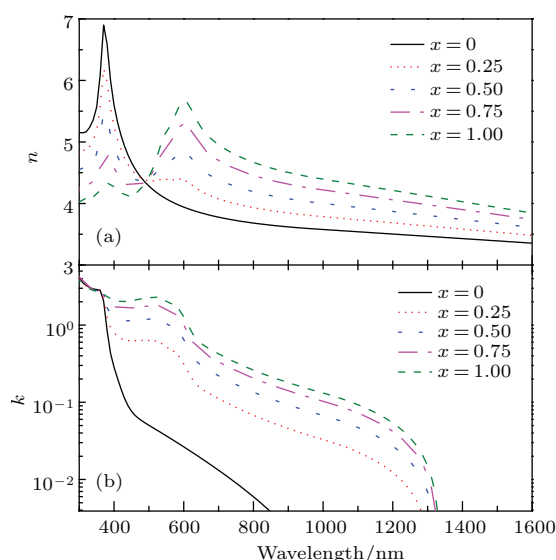


图2 (网刊彩色) 不同锗组分Si_{1-x}Ge_x的 n 与 k (a) n ; (b) k

Fig. 2. (color online) n and k of Si_{1-x}Ge_x layer with different germanium fraction: (a) n ; (b) k .

含Si_{1-x}Ge_x量子阱结构的硅异质结(HIT-QW)太阳能电池结构示意图如图1(b)所示,其中Si_{1-x}Ge_x层置于晶体硅衬底的入光面一侧, Si_{1-x}Ge_x层以及Si_{1-x}Ge_x层间的间隔厚度均为5 nm. 默认的量子阱层数为11层,以便尽可能减小晶格失配的影响. 量子阱的量子尺寸效应由一维抛物型量子阱模型模拟; Si_{1-x}Ge_x层的导带、

价带有效态密度、能带带隙、介电常数以及迁移率采用 silvaco TCAD 默认的 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 模型计算; $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 薄膜的折射率 n 以及消光系数 k 由有效

介质理论计算而得, 300 nm 到 1600 nm 波段的 n 与 k 如图 2 所示.

表 1 模拟 HIT 采用的电学参数
Table 1. Electrical parameters utilized in the simulation of HIT solar cells.

电学参数	a-Si:H(p)	a-Si:H(i)	c-Si(n)	a-Si:H(n ⁺)
厚度/nm	5	5	1.0×10^5	5
介电常数	11.9	11.9	11.9	11.9
电子亲和能/eV	3.8	3.8	4.05	3.8
带隙/eV	1.74	1.74	1.12	1.74
导带有效态密度/cm ⁻³	1.0×10^{20}	1.0×10^{20}	2.84×10^{19}	1.0×10^{20}
价带有效态密度/cm ⁻³	1.0×10^{20}	1.0×10^{20}	2.68×10^{19}	1.0×10^{20}
电子迁移率/cm ² ·V ⁻¹ ·s ⁻¹	5	20	1111	10
空穴/cm ² ·V ⁻¹ ·s ⁻¹	1	2	421.6	1
受主掺杂/cm ⁻³	1.0×10^{19}	0	0	0
施主掺杂/cm ⁻³	0	0	1.5×10^{16}	1.0×10^{19}
带尾态密度/cm ⁻³ ·eV ⁻¹	2.0×10^{21}	2.0×10^{21}		2.0×10^{21}
高斯态密度/cm ⁻³	1.0×10^{17}	1.0×10^{16}		8.0×10^{17}

3 模拟结果与分析

3.1 理想结果

为了获得理想情况下的模拟结果, 首先忽略界面缺陷以及 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 薄膜中体缺陷的影响, 理想情况下 HIT-QW 电池不同锗组分的外量子效率 (EQE) 以及电流密度-电压 (J - V) 曲线如图 3 所示, HIT-QW 电池电学性能以及相应的 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 带隙如表 2 所列. 其中, $x = 0$ 对应于纯硅型电池, 相关结果与 HIT 电学性能以及光学性能结果相同, 而 $x = 1$ 对应于锗量子阱型电池. 如图 2 中所示, 随着锗组分的增加, $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 薄膜的消光系数增加, 因此图 3 所示的 HIT-QW 电池长波波段外量子效率显著增加, 少数载流子产生率增加, 短路电流密度提升; 另一方面, 由于锗组分的增加将使得 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 从硅向锗过渡, 故其带隙减小, 如表 2 所列. 在 $x = 0$ 过渡到 $x = 0.25$ 时, $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 带隙从 1.08 eV 变为 0.94 eV, $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 量子阱中热辐射复合效应不明显, 开路电压从 749 mV 下降为 733 mV, 开压下降远远小于 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 的带隙降; 而 $x \geq 0.5$ 时, $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 带隙进一步降低, 此时 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 量子阱中热辐射复合以及俄歇复合占主导, 开压下降较为明显, 开压降近似于 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 带隙降. 当 x 从 0.75 过渡到 1 时, 带隙并没有发生变化, 而其他参

数如价带有效态密度的影响使得空穴费米能级靠近价带, 从而使开路电压略有提升.

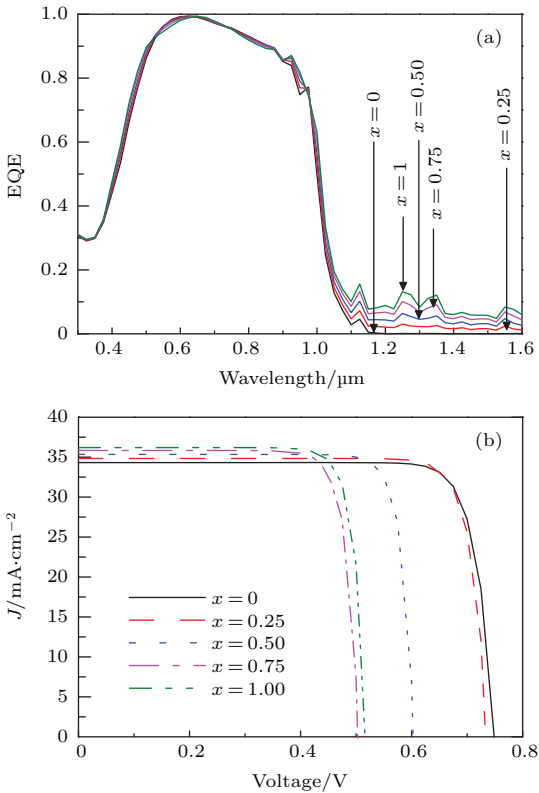


图 3 (网刊彩色) HIT-QW 电池不同锗组分的 EQE 以及 J - V 曲线 (a) EQE; (b) J - V
Fig. 3. (color online) EQE and J - V curves of HIT-QW solar cells with different germanium fractions: (a) EQE; (b) J - V .

表2 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 带隙及 HIT-QW 电池电学性能
Table 2. Energy bandgap of $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ and electrical performance of HIT-QW solar cells.

x	E_g	$J_{sc}/\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$	V_{oc}/mV	$FF/\%$	$\eta/\%$
0.00	1.08	34.3	749	83.8	21.5
0.25	0.94	34.8	733	85.0	21.7
0.50	0.78	35.4	603	84.9	18.1
0.75	0.67	35.8	503	82.5	14.9
1.00	0.67	36.2	516	83.5	15.6

理论上, HIT 电池的电流由光生电流、肖克利扩散电流、耗尽区复合电流以及界面复合电流主导 [23–25], 故 HIT 电池的 J - V 特性可以用下式表示:

$$J = J_L - J_{\text{diff}} \left[\exp \left(\frac{qV}{nkT} \right) - 1 \right] - J_R \left[\exp \left(\frac{qV}{2nkT} \right) - 1 \right] - J_{\text{oe}} \left[\exp \left(\frac{qV}{nkT} \right) - 1 \right], \quad (1)$$

其中, J_L , J_{diff} , J_R 以及 J_{oe} 分别为光生电流密度、肖克利扩散暗态反向饱和电流密度、耗尽区复合暗态反向饱和电流密度和界面复合暗态反向饱和电流密度; q , n , k , T 和 V 分别对应于电子电荷、二极管因子、玻尔兹曼常数、开尔文温度以及外加偏压. (1) 式中, J_{diff} 以及 J_R 可以表示如下:

$$J_{\text{diff}} = \frac{qD_p p_{n0}}{L_p} = q \sqrt{\frac{D_p}{\tau_p}} \frac{n_i^2}{N_d}, \quad (2)$$

$$J_R = \frac{qW n_i}{2\tau_p}, \quad (3)$$

其中, D_p , p_{n0} , L_p , N_d , τ_p 和 W 分别为空穴扩散因子、平衡条件下的晶体硅的空穴浓度、空穴扩散长度、施主掺杂、空穴载流子寿命以及耗尽区宽度. 高偏压情况下, 暗态电流载流子输运以肖克利扩散为主, 故在光照条件下, 开压由下式给出:

$$V_{oc} = \frac{nkT}{q} \ln \left(1 + \frac{J_{sc}}{J_0} \right) = \frac{nkT}{q} \ln \left(1 + \frac{J_{sc}}{q \sqrt{\frac{D_p}{\tau_p}} \frac{n_i^2}{N_d}} \right) \approx n \cdot \frac{E_{g\text{Si}}}{q} - \frac{nkT}{q} \ln \left(\frac{qN_{c\text{Si}}N_{v\text{Si}}}{J_{sc}N_d} \cdot \sqrt{\frac{D_p}{\tau_p}} \right), \quad (4)$$

其中, $E_{g\text{Si}}$, $N_{c\text{Si}}$ 以及 $N_{v\text{Si}}$ 分别是晶体硅带隙、导带以及价带有效态密度. 而当量子阱中热辐射复合占主导时, 相应的开压为

$$V_{oc} = \frac{2nkT}{q} \ln \left(1 + \frac{J_{sc}}{J_0} \right) = \frac{2nkT}{q} \ln \left(1 + \frac{J_{sc}}{\frac{qW n_i}{2\tau_p^*}} \right) \approx n \cdot \frac{E_{g\text{Ge}}}{q} - \frac{2nkT}{q} \ln \left(\frac{qW \sqrt{N_{c\text{Ge}}N_{v\text{Ge}}}}{2\tau_p^* J_{sc}} \right), \quad (5)$$

其中, $E_{g\text{Ge}}$, $N_{c\text{Ge}}$ 以及 $N_{v\text{Ge}}$ 分别是 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 带隙、导带以及价带有效态密度. τ_p^* 为势垒区量子阱中载流子寿命. 在 $x = 0$ 与 $x = 0.25$ 时, $J_R \ll J_{\text{diff}}$, 开压由 (4) 式给出, 进一步的计算说明, 此时 J_R 引起的开压降为 $\frac{nkT}{q} \frac{J_R}{\sqrt{J_L J_{\text{diff}}}}$, 相对于初始开压很小; 而当 $x = 0.5, 0.75$ 和 1 时, 由 (5) 式知开压降与带隙降几乎相等, 模拟结果与理论推导结果相似.

3.2 界面缺陷与 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 体复合影响

图 4 为开路条件下 HIT-QW 电池的空穴载流子分布以及能带结构图. 随着锗组分的增加, $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 量子阱价带势阱深度增加, 陷入 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 量子阱的空穴数目增加; 另一方面, a-Si:H/c-Si 界面空穴密度随之降低. 在 $x = 0$ 和 0.25 时, 界面空穴密度远远大于 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 量子阱中的空穴浓度, 故此时空穴费米能级主要由 a-Si:H/c-Si 界面空穴密度决定, a-Si:H/c-Si 界面带接无变化; 而在 $x = 0.5, 0.75$ 和 1 时, 界面空穴密度进一步降低至小于量子阱中的空穴浓度, 此时空穴费米能级由陷入 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 量子阱的空穴浓度决定, a-Si:H/c-Si 界面带接向空穴费米能级偏移方向弯曲.

a-Si:H/c-Si 界面空穴密度与 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 量子阱的空穴浓度影响与制约着空穴费米能级, 从而对开路电压具有重要作用, 而 a-Si:H/c-Si 界面缺陷以及 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 量子阱的体缺陷会对附近的空穴产生明显的复合作用, 从而影响到开路电压. 图 5(a) 所示为界面缺陷密度 N_{ss} 对电池开路电压的影响. 在 $x = 0$ 与 $x = 0.25$ 时, 界面缺陷密度对开路电压具有明显的作用, 在 N_{ss} 小于 $1 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ 时, 复合不明显, 开压几乎不变; 当 $N_{ss} = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 时, 此时暗态饱和电流仍然由肖克利扩散主导, 开压分

别下降 16 mV 和 7 mV; 在 $N_{ss} = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 时, 暗态饱和电流由界面复合电流主导, 此时二者相近. 而当 $x = 0.5, 0.75, 1$ 时, 由于暗态饱和电流由 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 量子阱热辐射复合主导, 故几乎不受界面缺陷影响.

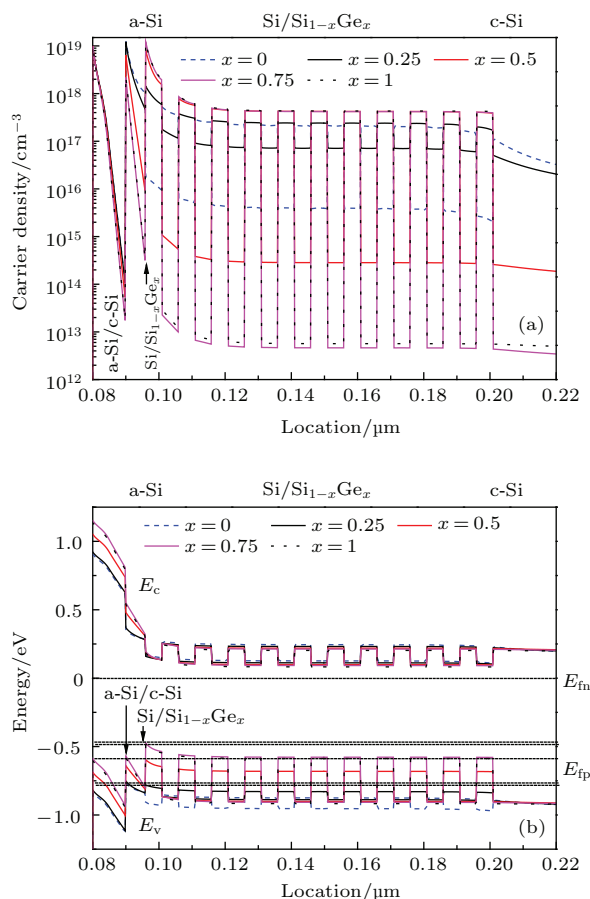


图 4 (网刊彩色) 开路条件下 HIT-QW 电池的空穴载流子分布以及能带结构图 (a) 空穴载流子分布; (b) 能带结构图

Fig. 4. (color online) Hole distribution and related energy band distribution of HIT-QW solar cells at open circuit condition: (a) Hole distribution; (b) energy band distribution.

图 5(b) 所示为 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 量子阱中载流子寿命 τ_p^* 对开路电压的影响, 载流子寿命的降低对应于体复合的增加. 在 $x = 0$ 时, 由图 4(a) 知 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 量子阱空穴载流子浓度为 10^{16} cm^{-3} 量级, 远远低于 a-Si:H/c-Si 界面空穴密度 (10^{19} cm^{-3} 量级), $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 量子阱体复合作用微弱, 载流子寿命对开压近乎无影响; 而在 $x = 0.25-1$ 时, $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 量子阱中空穴载流子密度为 $10^{18}-10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 量级, 体复合效应显著. 在载流子寿命大于 $5 \times 10^{-5} \text{ s}$ 时, 体复合作用微弱, 开压近乎不变; 而在载流子寿命小于 $5 \times 10^{-5} \text{ s}$ 时, 随着载流子寿命的进一步降低,

$\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 量子阱中复合增加, 空穴严重复合, 空穴费米能级远离价带, 开路电压迅速下降.

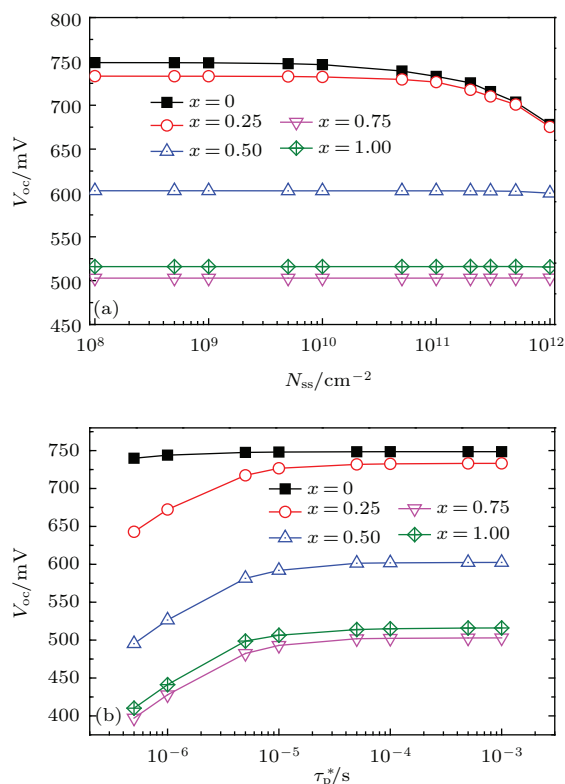


图 5 (网刊彩色) a-Si:H/c-Si 界面缺陷密度 N_{ss} 及 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 量子阱载流子寿命 τ_p^* 对 HIT-QW 电池开路电压的影响 (a) a-Si:H/c-Si 界面缺陷密度; (b) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 量子阱载流子寿命

Fig. 5. (color online) V_{oc} of HIT-QW solar cells with interface defects density N_{ss} at a-Si:H/c-Si interface and lifetime of carriers τ_p^* of $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ quantum wells: (a) Interface defects density at a-Si:H/c-Si interface; (b) lifetime of carriers of $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ quantum wells.

4 结 论

本文模拟了 $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 量子阱作为表面吸收层置于 HIT 太阳电池晶体硅入光侧, 该结构可以有效提高长波段的光学吸收, 而随着锗含量 x 的增加, $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 带隙减小, 量子阱中热辐射复合与俄歇复合作用明显, 电池开路电压下降.

a-Si:H/c-Si 界面空穴密度与 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 量子阱的体空穴浓度影响与制约着空穴费米能级, 而 a-Si:H/c-Si 界面缺陷以及 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 量子阱的体缺陷会使附近的空穴产生明显的复合, 从而影响到开路电压. 随着 a-Si:H/c-Si 界面缺陷密度的增加, 锗含量分别为 0 与 0.25 时量子阱电池开压下降明显, 而在锗含量分别为 0.5, 0.75 和 1 时, 界面缺陷影响弱

于 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 体复合影响;随着 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 量子阱体寿命的降低,量子阱中复合效应增强. 锗含量为0时,界面输运占主导,开压几乎不受影响;而在锗含量增加时,量子阱中复合效应增强,开压降低. 当锗含量为0.25时, a-Si:H/c-Si 界面缺陷以及 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 量子阱的体缺陷均会对开压有影响. 在晶体硅表面没有陷光绒面的情况下,太阳能电池的短路电流密度为 34.8 mA/cm^2 ,开路电压为733 mV,转换效率为21.7%,短路电流密度的增加有效平衡了开压的损失,效率提升0.2个百分点,该量子阱结构可以作为下一步量子阱电池模拟优化、量子点电池模拟对比以及实验工艺的参考结构.

参考文献

- [1] Taguchi M, Kawamoto K, Tsuge S, Baba T, Sakata H, Morizane M, Uchihashi K, Nakamura N, Kiyama S, Oota O 2000 *Prog. Photovolt.* **8** 503
- [2] Dao V A, Heo J, Choi H, Kim Y, Park S, Jung S, Lakshminarayanan N, Yi J 2010 *Sol. Energy* **84** 777
- [3] Bivour M, Meinhardt C, Pysch D, Reichel C, Ritzau K U, Hermle M, Glunz S W 2010 *35th IEEE Photovoltaic Specialists Conference* Honolulu, USA June 20–25, 2010 p1304
- [4] Hekmatshoar B, Shahrjerdi D, Hopstaken M, Ott J A, Sadana D K 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 103906
- [5] Kanevce A, Metzger W K 2009 *J. Appl. Phys.* **105** 969730
- [6] Schulze T F, Korte L, Conrad E, Schmidt M, Rech B 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 023711
- [7] Rahmouni M, Datta A, Chatterjee P, Damon-Lacoste J, Ballif C, Cabarrocas P R I 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 054521
- [8] Taguchi M, Yano A, Tohoda S, Matsuyama K, Nakamura Y, Nishiwaki T, Fujita K, Maruyama E 2014 *IEEE J. Photovolt.* **4** 96
- [9] Masuko K, Shigematsu M, Hashiguchi T, Fujishima D, Kai M, Yoshimura N, Yamaguchi T, Ichihashi Y, Mishima T, Matsubara N, Yamanishi T, Takahama T, Taguchi M, Maruyama E, Okamoto S 2014 *IEEE J. Photovolt.* **4** 1433
- [10] Jiang C W, Green M A 2006 *J. Appl. Phys.* **99** 114902
- [11] Wang T, Zhang J J, Liu H Y 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 0204209 (in Chinese) [王霆, 张建军, Huiyun Liu 2015 物理学报 **64** 0204209]
- [12] Jiang B Y, Zheng J B, Wang C F, Hao J, Cao C D 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 138801 (in Chinese) [姜冰一, 郑建邦, 王春锋, 郝娟, 曹崇德 2012 物理学报 **61** 138801]
- [13] Li W J, Zhong X H 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 038806 (in Chinese) [李文杰, 钟新华 2015 物理学报 **64** 038806]
- [14] Conibeer G, Green M, Corkish R, Cho Y, Cho E C, Jiang C W, Fangsuwannarak T, Pink E, Huang Y D, Puzzer T, Trupke T, Richards B, Shalav A, Lin K L 2006 *Thin Solid Films* **511** 654
- [15] Luque A, Marti A 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 5014
- [16] Tawancy H M 2012 *J. Mater. Sci.* **47** 93
- [17] Liu Z, Zhou T W, Li L L, Zuo Y H, He C, Li C B, Xue C L, Cheng B W, Wang Q M 2013 *Appl. Phys. Lett.* **103** 082101
- [18] Fukatsu S, Sunamura H, Shiraki Y, Komiyama S 1997 *Appl. Phys. Lett.* **71** 258
- [19] Tayagaki T, Hoshi Y, Usami N 2013 *Sci. Rep.* **3** 2703
- [20] Ye H, Yu J Z 2014 *Sci. Technol. Adv. Mater.* **15** 024601
- [21] Jiang B, Dong T, Su Y, He Y, Wang K Y 2014 *J. Microelectromech. Syst.* **23** 213
- [22] Linder K K, Zhang F C, Rieh J S, Bhattacharya P, Houghton D 1997 *Appl. Phys. Lett.* **70** 3224
- [23] Fonash S J 1980 *J. Appl. Phys.* **51** 2115
- [24] Saad M, Kassiss A 2003 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **79** 507
- [25] Ghannam M, Shehadah G, Abdurraheem Y, Poortmans J 2015 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **132** 320

Numerical simulation of silicon heterojunction solar cells with Si/Si_{1-x}Ge_x quantum wells*

Zhang Xiao-Yu¹⁾²⁾ Zhang Li-Ping^{2)†} Ma Zhong-Quan¹⁾ Liu Zheng-Xin²⁾

1) (College of Science, Shanghai University, Shanghai 200444, China)

2) (Shanghai Institute of Microsystem and Information Technology,
Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China)

(Received 9 March 2016; revised manuscript received 5 April 2016)

Abstract

Heterojunction with intrinsic thin-layer (HIT) solar cells attract attention due to their high open circuit voltage and stable performance. However, short circuit current density is difficult to improve due to light losses of transparent conductive oxide and hydrogenated amorphous silicon passivation (a-Si:H) layer and low absorption coefficient of crystalline silicon (c-Si). Silicon germanium alloy (Si/Si_{1-x}Ge_x) quantum wells and quantum dots are capable of improving low light utilization by strong optical absorption in the infrared region. In this article, opto-electrical performances of the HIT solar cells integrated with Si/Si_{1-x}Ge_x quantum wells (HIT-QW) as a surface absorber are investigated by numerical simulation with Technology Computer Aided Design (TCAD). The influences of germanium content on the electrical performances of HIT solar cells with long carrier lifetimes of Si_{1-x}Ge_x layers (τ_p^*) and defect-free a-Si:H/c-Si interface are investigated at first. The simulation results indicate that optical utilization in the infrared region is enhanced with the increase of germanium fraction, while open circuit voltage degrades due to the decreasing of the energy band gap of Si_{1-x}Ge_x, radiative recombination and auger recombination mechanism in the Si/Si_{1-x}Ge_x quantum wells. And the conversion efficiency reaches a maximum value at a germanium fraction of 0.25 then drops distinctly. When the germanium fraction increases from 0 to 0.25, the short circuit current density increases from 34.3 mA/cm² to 34.8 mA/cm², while the open circuit voltage declines from 749 mV to 733 mV. Hence, the conversion efficiency increases from 21.5% to 21.7% due to the fact that the enhancement of short circuit current density compensates for the reduction of open circuit voltage. When the germanium content increases to more than 50%, a serious open circuit voltage loss of more than 130 mV associated with the energy band gap loss of Si_{1-x}Ge_x arises in the HIT-QW solar cells, which indicates that the dominating carrier transport mechanism changes from shockley diffusion to recombination in the Si/Si_{1-x}Ge_x quantum wells. Subsequently, the influences of interface defects at a-Si:H/c-Si interface and bulk recombination centers in the Si/Si_{1-x}Ge_x quantum wells are discussed. Both interface holes at a-Si:H/c-Si interface and bulk holes in Si_{1-x}Ge_x quantum wells can be recombined through the interface defects at a-Si:H/c-Si interface and bulk recombination centers in the Si/Si_{1-x}Ge_x quantum wells, respectively, which restricts the position of hole fermi level in the open circuit condition. When the germanium fraction increases, the influence of interface defects at a-Si:H/c-Si interface becomes weak on the degradation of open circuit voltage compared with the significant influence of the bulk trap centers. Moreover, τ_p^* of longer than 5×10^{-5} s is necessary for the retention of electrical performance of HIT-QW solar cells by the simulation. Based on this research, high-efficiency HIT solar cells can be achieved by incorporating high-quality Si/Si_{0.75}Ge_{0.25} quantum wells, which also requires the impactful passivation of a-Si:H/c-Si interface.

Keywords: Si/Si_{1-x}Ge_x quantum wells, heterojunction with intrinsic thin-layer solar cell, interface recombination, a-Si:H/c-Si

PACS: 88.40.hj, 88.40.jj, 88.40.H-, 61.72.uf

DOI: 10.7498/aps.65.138801

* Project supported by the the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61204005).

† Corresponding author. E-mail: zlp_wan@mail.sim.ac.cn