

非晶硅太阳能电池光照 $J-V$ 特性的 AMPS 模拟*

胡志华^{1)†} 廖显伯¹⁾ 刁宏伟¹⁾ 夏朝凤²⁾ 许玲²⁾ 曾湘波¹⁾ 郝会颖¹⁾ 孔光临¹⁾

¹⁾中国科学院半导体研究所,北京 100083)

²⁾云南师范大学能源与环境科学学院,昆明 650092)

(2004 年 8 月 11 日收到,2004 年 9 月 23 日收到修改稿)

运用 AMPS (Analysis of Microelectronic and Photonic Structures) 模拟分析了 TCO/p-a-SiC:H/i-a-Si:H/n-a-Si:H/metal 结构的异质结非晶硅太阳能电池中的 p/i 界面的价带失配以及 TCO/p_n/metal 界面接触势垒对电池光电特性的影响. 分析总结了非晶硅基薄膜太阳能电池中 $J-V$ 曲线异常拐弯现象的种类和可能原因.

关键词:非晶硅,太阳能电池,计算机模拟

PACC:7340L,8630J,6185

1. 引言

实验发现,品质优良的非晶硅太阳能电池,其光暗 $J-V$ 特性近乎接近于二极管的理想特性曲线,并且,光暗 $J-V$ 曲线基本遵循叠加原理,如图 1 所示.

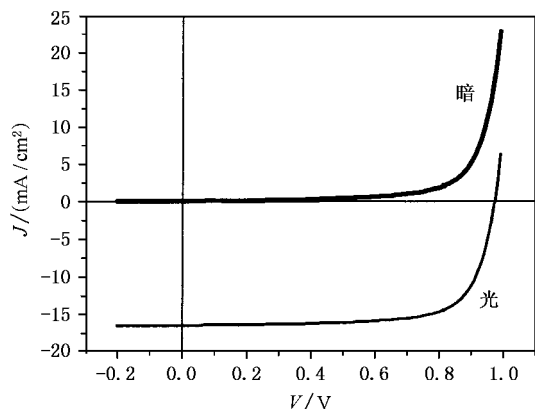


图 1 正常非晶硅太阳能电池的光暗 $J-V$ 曲线

但是,界面问题可能导致非晶硅太阳能电池性能变坏,使电池的开路电压和填充因子下降,甚至可能导致电池的光照 $J-V$ 曲线发生异常拐弯现象^[1]. 事实上,异质结太阳能电池中的 $J-V$ 曲线异常拐弯现象是比较普遍的^[2],有的把它称之为 S-Shape 现象^[3],有的则把它叫做 rollover^[4]现象. 总结起来,这种异常拐弯大致分为两种情况,一种是拐弯发生在大于

V_{oc} 的电压范围,而另一种则是发生在 V_{oc} 附近或是小于 V_{oc} 的电压范围,或者是上述二者兼而有之.

结合工艺过程和器件物理分析,我们认为这种 $J-V$ 曲线异常拐弯现象主要起因于各种界面问题. 为此我们运用一维微光电子结构分析模型 AMPS-1D (Analysis of Microelectronic and Photonic Structures)^[5] 重点分析了非晶硅太阳能电池中 p/i 和 TCO/p_n/metal 界面能带偏移或势垒高度对电池光照 $J-V$ 曲线的影响.

2. 器件和材料物理参数模型

图 2 中 ϕ_{p0} 是 TCO 的费米能级与 p 层导带的能量差, E_p 表示 TCO/p 界面处的接触势垒(空穴); E_{vL} 表示真空能级, χ 为电子亲和势(再加上电子激活能就是所谓功函数 W); $\phi_{nL}(E_n)$ 为 n/metal 界面接触势垒. 图下方的刻度值是电池的厚度坐标值.

AMPS-1D 可以在态密度(DOS)和载流子寿命(life time)^[6]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^[7],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

* 国家重大基础研究计划(973)项目(批准号:G2000028201)资助的课题.

† E-mail: huzhuhua@public.km.yn.cn & huzhuhua@uminova.pt

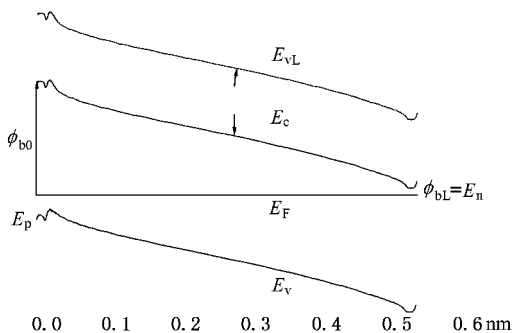


图2 pin 非晶硅太阳能电池平衡能带图

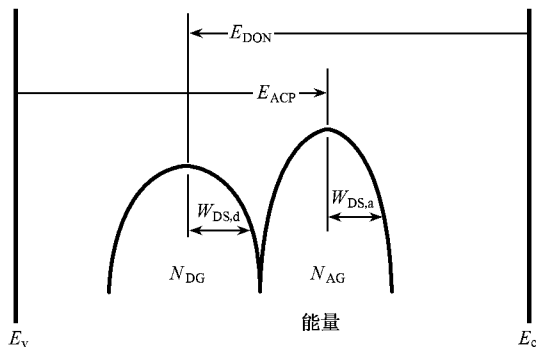


图4 带隙间缺陷态的高斯分布模型

主态,二者呈正相关能关系,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.施主和受主掺杂全电离,即 $N_D^+ = N_D$, $N_A^- = N_A$.

0.10 和 0.06 eV.

计算中,光照条件为 AM1.5, 100 mW/cm². 光吸收系数表示为^[8]

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

式中 B 和 E_g 的数值见表 1.

表1 用于非晶硅 pin 太阳能电池模拟的主要参数

参数	p 层 (a-SiC)	i 层 (a-Si)	n 层 (a-Si)
厚度/nm	8	500	25
迁移率边禁带宽度 E _μ /eV	1.96	1.80	1.80
光学禁带宽度 E _g /eV	1.80	1.72	1.72
B 值/(cm ^{-1/2} eV ^{-1/2})	1050	800	700
电子亲和势/eV	3.90	4.00	4.00
掺杂浓度 N _D /cm ⁻³	0	0	5 × 10 ¹⁹
掺杂浓度 N _A /cm ⁻³	5 × 10 ¹⁹	0	0
受主激活能(高于价带) eV	0.25		
施主激活能(低于价带) eV			0.10
导带、价带有效态密度/cm ⁻³	2.5 × 10 ²⁰	2.5 × 10 ²⁰	2.5 × 10 ²⁰
缺陷态密度 N _{DC} 和 N _{AC} /cm ⁻³	5 × 10 ¹⁷	5 × 10 ¹⁵	5 × 10 ¹⁷
E _{DON} /eV	1.12	1.12	1.12
E _{ACP} /eV	1.12	1.12	1.12
价带尾态特征能量 E _D /eV	0.05	0.05	0.05
导带尾态特征能量 E _A /eV	0.03	0.03	0.03
G _{do} /eV	1.0 × 10 ²¹	1.0 × 10 ²¹	1.0 × 10 ²¹
G _{ao} /eV	1.0 × 10 ²¹	1.0 × 10 ²¹	1.0 × 10 ²¹

图3 所示为带尾态的分布示意图,图中

$$g_a(E) = G_{a0} \exp[(E_c - E)/E_A],$$

$$g_d(E) = G_{d0} \exp[(E - E_v)/E_D],$$

式中 E_A 和 E_D 表示带尾特征能量.

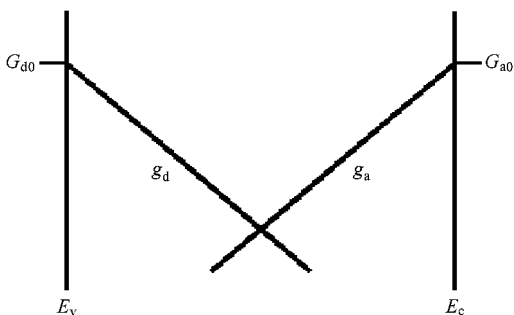


图3 带尾缺陷态的分布示意图

图4 所示为 AMPS 提供的用于描述非晶硅缺陷态密度的高斯分布模式. N_{DC}(N_{AC})代表呈高斯分布的类施主(类受主)缺陷态浓度(cm⁻³), W_{DS,d}(W_{DS,a}) 和 E_{DON}(E_{ACP}) 分别代表类施主(类受主)态高斯峰的半高宽和离导带底(价带顶)的能量差距.

3. 结果与讨论

计算模拟的太阳电池为 p-i-n 结构,光从 p 型窗口层入射.窗口层是非晶硅碳(a-SiC),迁移率带隙为 1.96 eV. pin 各层材料的光电特性参数如表 1 所示. a-SiC 的电子亲和势 χ 设为 3.90 eV,比非晶硅(a-Si)小 0.10 eV,也就是说 p/i 界面的能带不连续性(1.96—1.80 eV)在价带和导带上的偏移分别为

3.1. p/i 界面能带失配的影响

作者曾对非晶硅太阳电池 p/i 界面缺陷态以及插入 buffer 层的影响进行过模拟分析,^[9]界面缺陷

态增加光生载流子的复合,导致漏电电流增加,从而影响电池的开路电压和填充因子.那么 p/i 除了界面缺陷态以外还有什么物理因素可能对太阳电池的光电特性产生影响呢?能够想到的自然是能带偏移.

我们选择一个理想的非晶硅太阳电池(有 buffer 层,但没有界面缺陷态)作为基础模型,其主要材料及器件结构参数见表 1,在此模型基础上我们在其 p/i 界面间插入 1 nm 的宽带隙高密度缺陷态($1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$)界面层,这一界面层同 p 层、i 层的能带失配通过各层电子亲和势来调节.界面层的能带展宽主要是价带边的下移.图 5 所示为 p/i 界面间插入 1 nm 宽带隙(2.1 eV)界面层后的平衡能带图.计算结果如图 6 所示.

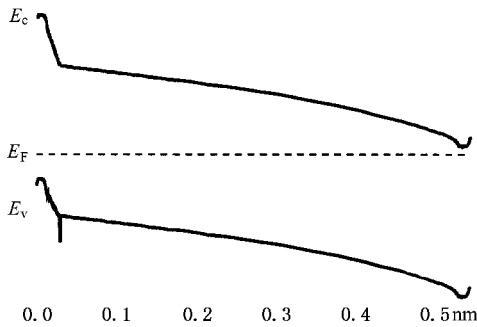


图 5 p/i 间插入 1 nm 宽带隙(2.1 eV)高密度缺陷态界面层后的平衡能带图

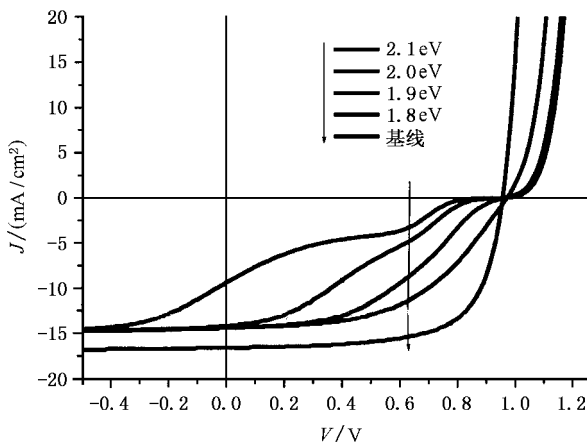


图 6 p/i 间插入 1 nm 宽带隙高密度缺陷态界面层后的电池的 J-V 曲线

从图 6 的计算结果可以看出,正是 p/i 界面间这层宽带隙高密度缺陷界面层的插入导致太阳电池光照 J-V 曲线开路电压附近的反常拐弯现象.由此可

以看出,p/i 界面是非晶硅太阳电池的核心.事实上,文献 [10] 的模拟计算已经表明,p/i 界面缺陷态导致 p/i 界面局部能带弯曲,费米能级被钉扎在 p/i 界面处的带隙中央(如图 5 所示),使得内建电场降低,光生载流子收集效率下降.同时,由于宽带隙界面层带来的价带失配在 p/i 界面处形成对光生空穴的势垒,阻碍光生空穴的收集,从而造成了 J-V 曲线在 V_{oc} 附近,尤其是小于 V_{oc} 电压范围的拐弯现象.

3.2. TOC/p 和 n/metal 界面势垒的影响

除了 p/i 界面以外,非晶硅太阳电池的前后接触也是非常关键的.对于理想的欧姆接触,界面间应当不存在阻碍载流子收集的 Schottky 势垒.然而研究发现^[11],由于 TCO 和非晶硅之间的功函数存在较大差距,TCO/p 以及 n/metal^[12]界面同样存在大量界面态,这些界面态引起费米能级的钉扎,界面间形成 Schottky 势垒.我们模拟研究了 TCO/p 和 n/metal 的 Schottky 势垒高度 E_p 和 E_n (如图 7)对 pin 太阳电池的光电特性的影响.

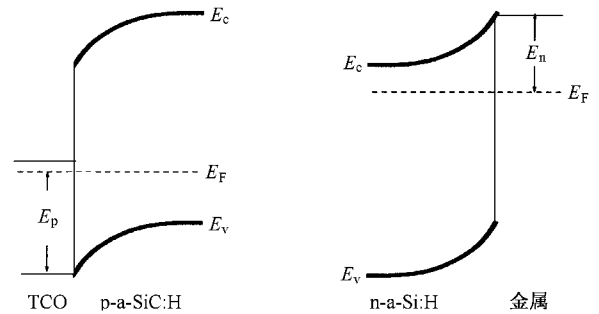


图 7 TCO/p 和 n/metal 界面能带结构示意图

图 8 所示为不同 TCO/p (a) 和 n/metal (b) Schottky 势垒高度 (E_p 和 E_n) 对太阳电池光照 J-V 曲线的计算结果.计算表明, E_p 和 E_n 同时影响太阳电池的光电特性,主要影响的是开路电压和填充因子.表现在 J-V 曲线上,当 E_p 和 E_n 其中一个的数值达到或超过 0.6 eV 时^[13],J-V 曲线明显发生在大于 V_{oc} 电压范围的拐弯现象.

理论上 E_p 和 E_n 对非晶硅太阳电池的影响几乎是对等的,但考虑到非晶硅太阳电池光生空穴和光生电子的不对等性,TCO/p 界面显得尤为重要.实际太阳电池中可能同时存在各种界面问题,J-V 曲线可能同时存在不同类型的拐弯现象.同时考虑 p/i 界面能带偏移和 TCO/p 或 n/metal 界面势垒时,J-V

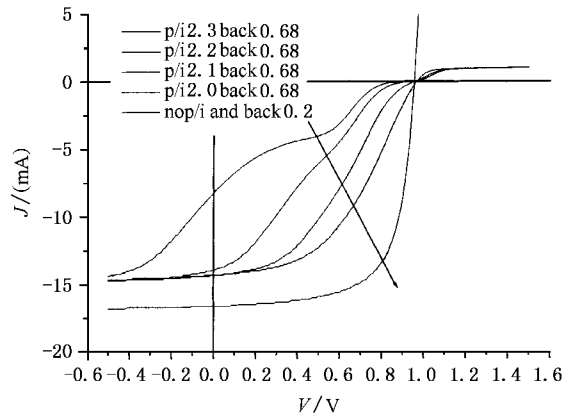
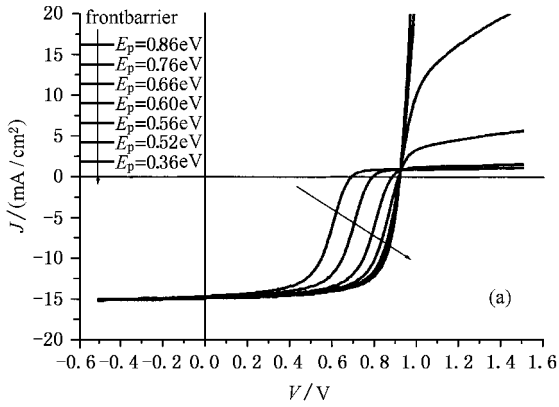


图9 p/i 界面层和 n/metal 势垒对 $J-V$ 曲线的影响

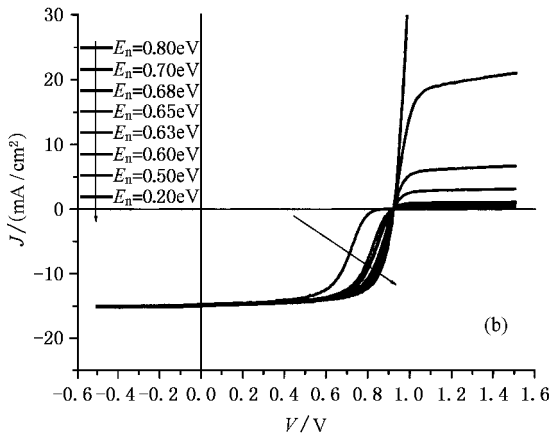


图8 TCOP/i (a) 和 n/metal (b) Schottky 势垒高度引起的 $J-V$ 曲线拐弯

曲线既有小于 V_{oc} 电压范围也有大于 V_{oc} 电压范围的拐弯. 如图 9 所示.

4. 结 论

本文运用一维微光电子结构分析模型(AMPS-1D)模拟分析 TCOP/p-a-SiC:H/i-a-Si:H/n-a-Si:H/metal 结构的异质结非晶硅太阳能电池中的 p/i 界面的能带失配以及 TCOP/p ,n/metal 界面接触势垒对电池光电特性的影响. 分析总结了非晶硅基薄膜太阳能电池中 $J-V$ 曲线异常拐弯现象的种类和可能原因. 结果表明 ,p/i 界面能带失配是导致 $J-V$ 曲线在小于 V_{oc} 范围内异常拐弯的主要根源 ,而 TCOP/p 和 n/metal 界面势垒过高(超过 0.60 eV)就会导致 $J-V$ 曲线在大于 V_{oc} 电压范围的拐弯. 同时考虑 p/i 界面能带偏移和 TCOP/p 或 n/metal 界面势垒时 , $J-V$ 曲线既有小于 V_{oc} 电压范围也有大于 V_{oc} 电压范围的拐弯.

[1] Steibig H , Eickhoff T , Zimmer J , Beneking C and Wagner H 1996 *Proc. MRS Symp.* **420** 855
 [2] McMaho T and Fahrenbruch A 2000 *Proc. 28th IEEE Photovoltaic Spec. Conf.* p539
 [3] Fahrenbruch A Further Results from AMPS Modeling of Stress Effects on the CdS/CdTe Solar Cell (unpublished)
 [4] Deng X , Wang W and Liao X B 2002 *International Journal of Modern Physics B* **16** 57
 [5] For AMPS-1D please see <http://www.emprl.psu.edu/amps>
 [6] Hu Z H , Liao X B , Liu Z M , Xia C F and Chen T J 2003 *Chin. Phys.* **12** 112
 [7] Kusack N E 1987 *The Physics of Structurally Disordered Matter.* Arrowsmith Bristol

[8] Adler D , Schwartz B B , Steele M G (Eds) 1985 *Physical Properties of Amorphous Materials* Plenum Press ,New York
 [9] Hu Z H 2004 *PhD Dissertation* (Institute of Semiconductors CAS) 35 (in Chinese) 胡志华 2004 博士学位论文(中国科学院半导体研究所)第 35 页
 [10] Hu Z H *et al* 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 217 (in Chinese) 胡志华等 2003 *物理学报* **52** 217
 [11] Cabarrocas P R 1990 *IEEE PVSC* p1610
 [12] Hegedus S S , Buchanan W A , Eser E Improving performance of superstrate p-i-n a-si solar cells by optimization of n/tco/metal back contacts (unpublished)
 [13] Sanchez-Sinencio F , Williams R 1983 *J. Appl. Phys.* **54** 2757

AMPS modeling of light J - V characteristics of a-Si based solar cells^{*}

Hu Zhi-Hua^{1,2)†} Liao Xian-Bo¹⁾ Diao Hong-Wei¹⁾ Xia Chao-Feng²⁾ Xu Ling²⁾
Zeng Xiang-Bo¹⁾ Hao Hui-Ying¹⁾ Kong Guang-Lin¹⁾

¹⁾(*Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China*)

²⁾(*School of Energy and Environmental Sciences, Kunming 650092, China*)

(Received 11 August 2004 ; revised manuscript received 23 September 2004)

Abstract

AMPS (Analysis of microelectronic and photonic structures) mode , which was developed by Pennsylvania State University , has been used to model the light J - V characteristics of a-Si solar cells with a structure of TCO/p-a-SiC:H/i-a-Si:H/n-a-Si:H/metal. The effects of valence band offset and contact barriers at p/i and TCO/p/n/metal interfaces on the light J - V characteristics have been examined. The modeling has qualitatively categorized and explained the non-ideal J - V behaviors (rollover , crossover , Voc shift and rollunder) observed in a-Si based solar cells.

Keywords : amorphous silicon , solar cell , computer simulation

PACC : 7340L , 8630J , 6185

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

[†] E-mail huzihua@public.km.yn.cn & huzihua@uninova.pt