

文章编号: 1004-4213(2011)02-0204-5

# 非晶硅太阳能电池结构模拟设计

何卓铭, 金尚忠, 梁培, 岑松原

(中国计量学院 光学与电子科技学院, 杭州 310018)

**摘 要:** 为了从理论上分析提高非晶硅太阳能电池的转化效率, 运用微电子和光子结构分析一维器件模拟程序模拟非晶硅太阳能电池 a-SiC:H/a-Si:H/a-Si:H 结构, 分析比较了不同前端接触透明导电层的功函数  $\Phi_{ITO}$ 、禁带宽度、本征层厚度、掺杂浓度、缺陷态密度等因素对太阳能电池性能的影响. 模拟得到, 在功函数达到 5.1 eV, 禁带宽度 1.8 eV, 本征层厚度 265 nm 等最优化条件下, 非晶硅太阳能电池转化效率达到 9.855%, 比一般非晶硅太阳能电池转化效率高近 2%.

**关键词:** 非晶硅; 太阳能电池; 模拟; 性能参量

**中图分类号:** TM914.4

**文献标识码:** A

**doi:** 10.3788/gzxb20114002.0204

## 0 引言

在光伏产业中, 硅材料太阳能电池由于具有相对成熟的技术, 一直以来都占有太阳能电池产量的一大部分, 而相比于晶体硅的高成本来说, 非晶硅具有生产成本较低, 工艺制作简单, 适合大面积适用等优点, 在当今市场中占据了相对大部分的销售份额. 鉴于晶体硅材料的短缺和薄膜太阳能电池的技术还未十分成熟, 人们的目光又聚焦于非晶硅太阳能电池, 在过去二三十年的发展当中, 非晶硅太阳能电池技术已经比较完善, 再加上成本优势, 占据了很大一部分的市场份额. 然而, 相对于目前完善的制备技术, 其转化效率一直是非晶硅太阳能电池的短板. 单晶硅太阳能电池转化效率达到 14%~18%, 而非晶硅单结太阳能电池的最高转换效率为 13.2%, 一般市场上的非晶硅太阳能电池在 6%~8% 左右, 在太阳光照射下早期的 a-Si 太阳能电池模块的转换效率的衰减一般达到 30%~50%<sup>[1-3]</sup>. 因此, 非晶硅电池的稳定性和转化效率的提高是主要研究方向.

本文应用美国宾夕法尼亚州立大学研发的微电子和光子结构分析一维器件模拟程序 (Analysis of Microelectronic and Photonic Structures, AMPS-1D) 来模拟 p-a-SiC:H/i-a-Si:H/n-a-Si:H 单结太阳能电池结构, 通过不同的特征参量设计分析影响太阳能电池性能特性的主要因素.

## 1 物理模型参量

AMPS-1D 采用包括态密度 (Density of States, DOS) 和载流子寿命 (life time) 两种半导体电子模式分别对器件进行结构模拟, 本设计采用态密度模式模拟. 在该模式下, 半导体的电子态包括价带、导带扩展带和价带、导带尾定域态以及隙间定域态, 因此能够从多方面反映太阳能电池的性能参量情况. 其中的带尾定域态主要由于键角畸变引起, 隙间定域态主要是由悬键造成<sup>[4]</sup>. 对 a-SiC:H/a-Si:H/a-Si:H 太阳能电池结构建立泊松方程来表示其空间电荷效应<sup>[5]</sup>

$$\epsilon(x) \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = \rho(x) \quad (1)$$

式(1)中,  $\epsilon(x)$  是材料介电常量;  $\varphi(x)$  为局部真空能级, 它的数值与电子静电势相同, 但符号相反, 单位为 eV. 方程右边空间电荷密度  $\rho(x)$  则表示为

$$\rho(x) = q \times [p(x) - n(x) + N_D^+(x) - N_A^-(x) + p_i(x) - n_i(x)] \quad (2)$$

式(2)中,  $n(x)$ 、 $p(x)$  为自由载流子浓度;  $n_i(x)$ 、 $p_i(x)$  为局域态上俘获电子空穴浓度;  $N_D^+(x)$ 、 $N_A^-(x)$  为电离施主、受主浓度.

式(2)边界条件为

$$\varphi(0) = \varphi_{b_0} - \varphi_{b_L} \quad (3)$$

$$\varphi(L) = 0 \quad (4)$$

$$J_P(0) = -qS_{P_0}(P_0(0) - P(0)) \quad (5)$$

$$J_P(L) = qS_{P_L}(P(L) - P_0(L)) \quad (6)$$

基金项目: 智能型太阳光导入照明系统的设计与开发项目 (No. 2009C23G2080009) 资助

第一作者: 何卓铭 (1986-), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为太阳能系统设计. Email: hzm43533110@126.com

导师 (通讯作者): 金尚忠 (1963-), 男, 教授, 硕士生导, 主要研究方向为 LED 发光, 光纤传感和光伏发电系统等. Email: jinsz@cjlu.edu.cn

收稿日期: 2010-09-09; 修回日期: 2010-10-20

$$J_N(0) = qS_{N_0}(N(0) - N_0(0)) \quad (7)$$

$$J_N(L) = -qS_{N_L}(N_0(L) - N(L)) \quad (8)$$

式(3)和(4)中,  $\varphi(0)$ ,  $\varphi(L)$  分别表示  $x=0$  和  $x=L$  表面的真空能级.  $\varphi_{b_0}$  是  $x=0$  处势垒高度,  $\varphi_{b_L}$  是  $x=L$  处势垒高度, 选取  $\varphi_{b_0} = 1.20$  eV,  $\varphi_{b_L} = 0.20$  eV. 式(5)~(8)中,  $S_{N_0}$ ,  $S_{N_L}$ ,  $S_{P_0}$ ,  $S_{P_L}$  表示两端表面的电子空穴复合速率;  $N_0(0)$ ,  $N_0(L)$ ,  $P_0(0)$ ,  $P_0(L)$  表示在热力学平衡下  $x=0$  和  $x=L$  处的导带和价带中电子空穴数量;  $N(0)$ ,  $N(L)$ ,  $P(0)$ ,  $P(L)$  表示在偏置电压下的电子空穴数量;  $J_N$ ,  $J_P$  表示局部电子空穴电流密度. 在热力学平衡条件下, 式(5)~(8)都为零.

由于泊松方程(1)为非线性微分方程, 很难得到精确解析解, 通过差分法将其转化为一组差分方程组, 然后在边界条件式(3)和(4)下, 由 Newton-Raphson 解法求解差分方程组. 显然, 在器件给定适当的物理参量, 方程(1)、(3)、(4)求解是在没有任何

先决条件下进行的<sup>[6]</sup>.

设计中, 在 ITO/P 层界面和 N/metal 层界面处的电子空穴界面复合速率设定为  $1 \times 10^7$  cm/s. 正表面反射系数设定为 0.1, 背面反射系数为 0.6 (在理想条件下计算转化效率除外). 光源选择太阳模拟器 AM1.5,  $1000$  W/m<sup>2</sup>. 不同半导体材料对光有不同的吸收系数, 最主要的是本征吸收

$$\alpha(\hbar\nu) = A(\hbar\nu - E_g)^{\frac{1}{2}}, \hbar\nu \geq E_g \quad (9)$$

式(9)中,  $A$  为常量. 当  $\hbar\nu = E_g$  时, 是能够引起本征吸收的最低限度光子能量, 称为本征吸收限. 实验证明, 当  $\hbar\nu \geq E_g$ , 本征吸收产生连续的光谱. 而  $\hbar\nu < E_g$  时, 也存在一定的吸收, 包括激子吸收和自由载流子吸收等等. 对应于某一特定的频率, 其总的吸收系数为各吸收过程的吸收系数之和<sup>[7]</sup>. 如式(10)

$$\alpha = \sum_i \alpha_i \quad (10)$$

其他参量均选用典型物理参量, 见表 1.

表 1 非晶硅电池典型设计参量  
Table 1 The specific design parameters of amorphous silicon cells

Parameters	a-sic : H	i-a-si	a-si
Thickness/nm	8	250	15
Electron affinity $\chi$ /eV	4.0	3.9	3.9
Mobility gap $E_g$ /eV	1.92	1.80	1.80
Optical band gap $E_{opt}$ /eV	1.85	1.72	1.72
Relative permittivity $\epsilon$	11.90	11.90	11.90
Effective density of states $N_c$ /(cm <sup>-3</sup> · eV <sup>-1</sup> )	$2.5 \times 10^{20}$	$2.5 \times 10^{20}$	$2.5 \times 10^{20}$
Effective density of states $N_v$ /(cm <sup>-3</sup> · eV <sup>-1</sup> )	$2.5 \times 10^{20}$	$2.5 \times 10^{20}$	$2.5 \times 10^{20}$
Electron mobility $\mu_n$ /(cm <sup>-3</sup> · V <sup>-1</sup> · s <sup>-1</sup> )	1	10	1
Hole mobility $\mu_p$ /(cm <sup>-3</sup> · V <sup>-1</sup> · s <sup>-1</sup> )	0.1	1	0.1
Doping $N_D$ /cm <sup>-3</sup>	0	0	$5 \times 10^{18}$
Doping $N_A$ /cm <sup>-3</sup>	$5 \times 10^{18}$	0	0
Valence band tail states characteristic energy $E_D$ /eV	0.19	0.05	0.05
Conduction band tail states characteristic energy $E_A$ /eV	0.07	0.03	0.03
Tail density of states $G_{D0}G_{A0}$ /eV	$10^{21}$	$10^{21}$	$10^{21}$
Electron capture cross section/cm <sup>-2</sup>	$10^{-17}$	$10^{-17}$	$10^{-17}$
Hole capture cross section/cm <sup>-2</sup>	$10^{-15}$	$10^{-15}$	$10^{-15}$
Band to band distribution of localized states	$9.5 \times 10^{18}$ double Gaussian distribution	$5 \times 10^{15}/5 \times 10^{16}$ Gaussian distribution	$5 \times 10^{17}/5 \times 10^{16}$ Gaussian distribution
Electron capture cross section/cm <sup>-2</sup>	$10^{-15}$	$10^{-15}$	$10^{-15}$
Hole capture cross section/cm <sup>-2</sup>	$10^{-14}$	$10^{-14}$	$10^{-14}$

## 2 分析与结论

### 2.1 功函数 $\Phi_{ITO}$ 的影响

对于非晶硅太阳能电池的性能影响很大的是前端接触的透明导电层 TCO/P 层, 透明导电层 (Transparent Conductive Layer, TCO) 通常都是由透明导电材料 (Indium Tin Oxide, ITO) 构成, 其功

函数  $\Phi_{ITO}$  的大小直接关系到非晶硅太阳能电池的各项性能参量, 一般其数值为 4.3~5.2 eV<sup>[8]</sup>. 不同的功函数使得非晶硅电池的内建电势有差异, 而内建电势的改变直接影响到载流子的漂移和复合. 图 1 为不同功函数  $\Phi_{ITO}$  对应的内建电势  $V_b$ .

可以看出: 功函数  $\Phi_{ITO}$  和内建电势  $V_b$  几乎成正比关系. 而正面过低的内建电势则会阻碍空穴

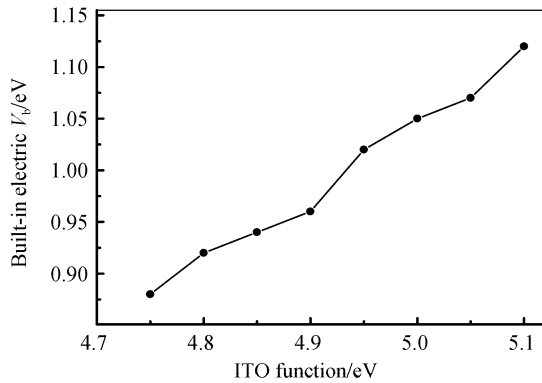


图1 功函数  $\Phi_{\text{ITO}}$  与内建电势  $V_b$  关系

Fig. 1 Relationship of function  $\Phi_{\text{ITO}}$  and built-in electric  $V_b$  穿过 P 层到达 ITO 层表面. 图 2 表示由不同功函数  $\Phi_{\text{ITO}}$  引起的电场变化以及各项参量性能变化情况.

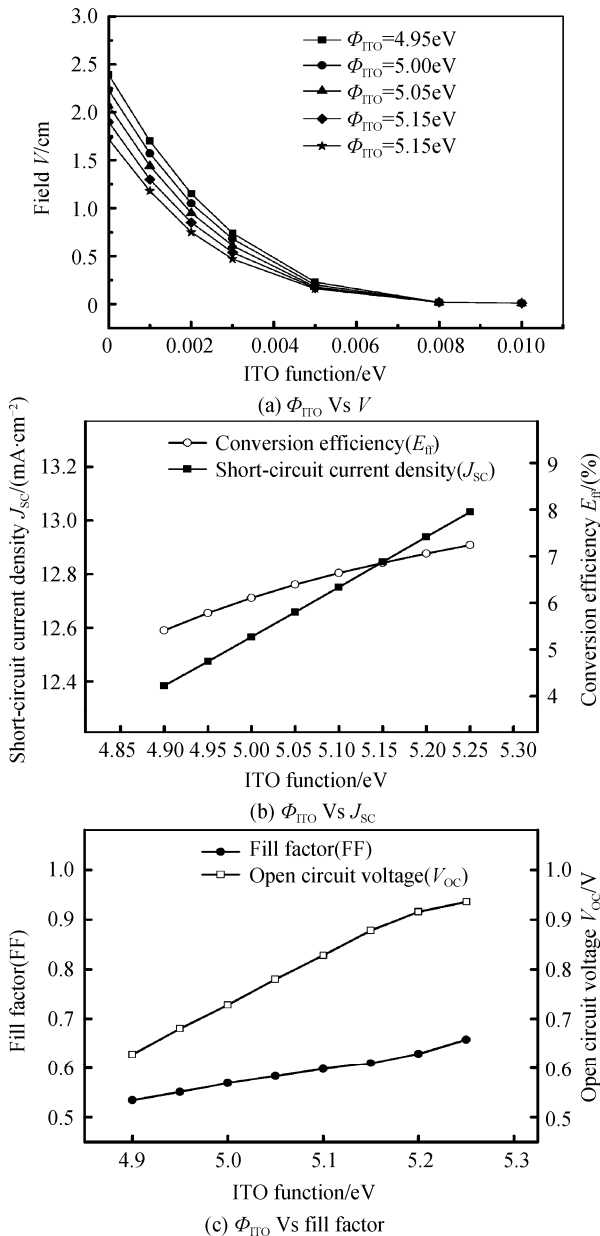


图2  $\Phi_{\text{ITO}}$  与各参量性能的关系

Fig. 2 Relationship of ITO function and various parameters' performance

从图 2 可以得知:随着功函数  $\Phi_{\text{ITO}}$  的减小,其 P 层上的电场不断增大,由于 P 层处低电势的电场作用下,空穴向 ITO 层飘移将受到更大的阻力,从而增大了空穴在 P 层内的电子空穴复合几率. 图 2(b) (c) 列出了不同功函数条件下的短路电流密度  $J_{\text{sc}}$ 、开路电压  $V_{\text{oc}}$ 、太阳能电池效率、填充因子 FF. 随着前表面 ITO 功函数  $\Phi_{\text{ITO}}$  的增大,非晶硅电池的各项性能参量指标都明显提高. 短路电流密度  $J_{\text{sc}}$  从  $12.6 \text{ mA/cm}^2$  增加到  $12.9 \text{ mA/cm}^2$ ; 填充因子从 0.53 增加到 0.66; 开路电压从 0.64 V 增加到 0.94 V, 逐渐趋向于某一特定值平衡状态; 转化效率从 4.3% 线性增大到 8%. 故选择功函数较高 (5.1 eV 左右) 的 ITO 生长在太阳能电池上, 会取得较好的性能指标.

## 2.2 本征层厚度的最佳设计

一般来说,非晶硅太阳能电池的 N 型层、P 型层相对于本征层来说较薄,故光电流主要来自其本征层吸收光子而产生的光生载流子<sup>[9]</sup>. 而对于某种确定的禁带宽度的半导体材料,可以设计其本征层的最佳厚度.

图 3 是在某一特定的带尾、隙间定域态模拟情况下,各层材料的禁带宽度确定后,改变其本征层的厚度,得出的  $J_{\text{sc}}$  和  $E_{\text{ph}}$  性能参量指标. 从图 3 中可以看出:在本征层厚度变化过程中,存在一个最佳值点使得其转化效率达到最大. 而上述模拟值的最佳本征层厚度为 250 nm, 对应的转化效率达到 9.093%. 如果改变本征层材料的禁带宽度,太阳能电池的最高转化效率的最佳厚度点会有所变化<sup>[10]</sup>. 表 2 为不同禁带宽度对应的最佳本征层厚度,  $d$  表示  $i$  层厚度值.

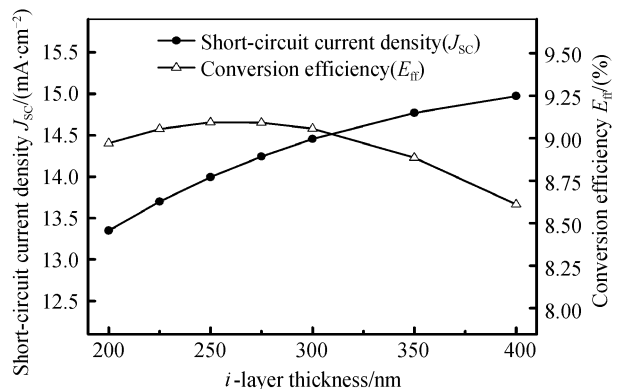


图3 本征  $i$  层厚度对各项参量性能的影响

Fig. 3 The effect of  $i$ -layer thickness to performance of the parameters

非晶硅的禁带宽度大约在 1.5~2.1 eV 左右. 从表 2 不同禁带宽度对转化效率的影响可以看出:随着禁带宽度的变大,太阳能电池转化效率呈由小变大再变小的趋势,在约 1.8 eV 左右处达到最佳值;而禁带宽度的变化,使得  $i$  层的最佳厚度也发生变

表 2 禁带宽度对最佳 i 层厚度的影响  
Table 2 The effect of Band-gap to the best i-layer thickness

$E_g/\text{eV}$	$d/\text{nm}$	$E_{\text{eff}}/\%$							
		235	240	250	255	260	265	270	275
1.5		7.180	7.182	7.186	7.187	7.186	7.186	7.185	7.181
1.6		7.184	8.187	8.192	8.193	8.195	8.193	8.191	8.196
1.7		9.169	9.172	9.181	9.184	9.184	9.187	9.185	9.181
1.8		9.822	9.830	9.844	9.848	9.850	9.855	9.854	9.850
1.9		9.161	9.616	9.622	9.621	9.621	9.619	9.618	9.610
2.0		9.189	9.195	9.193	9.189	9.183	9.182	9.173	9.161

化,从  $E_g = 1.5 \text{ eV}$  的 255 nm 到  $E_g = 1.8 \text{ eV}$  的 265 nm、 $E_g = 2.0 \text{ eV}$  的 240 nm,可以看出不同的禁带宽度对本征层最佳厚度也产生一定影响,其趋势也是由小变大再变小.结合上述两种情况,可以选择禁带宽度在 1.8 eV 和本征层大约为 265 nm 厚度时可达最大转化效率 9.855%.

### 2.3 掺杂浓度和隙态密度的影响

在理想条件下,即正面反射系数为 0,背面反射系数为 1,接触面之间为理想的欧姆接触,TCO/P 以及 N/metal 界面不存在界面态,其他参量同表 1 给出,非晶硅太阳能电池的转化效率可达 13.227%.但是,实际太阳能电池的工作中,在介质结合面上都存在大量的界面态,图 4 给出了用高斯分布模拟的不同隙间定域态的转化效率.

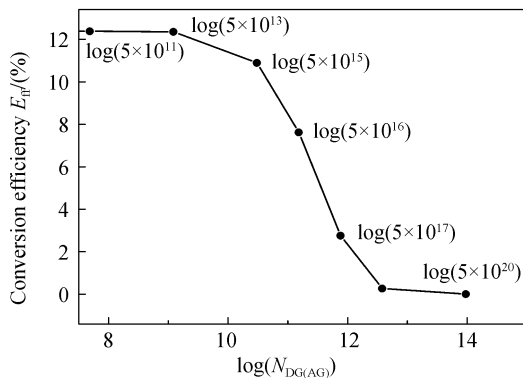


图 4 不同缺陷态密度对转化效率的影响

Fig. 4 The effect of different defect density of states to conversion efficiency

图 4 中,  $N_{\text{DG}}$  为高斯施主态密度,  $N_{\text{AG}}$  为高斯受主态密度,单位为  $\text{cm}^{-3}$ .从图 4 看出,随着缺陷态密度  $N_{\text{DG}}$  ( $N_{\text{AG}}$ ) 的增大,其转化效率由理想无界面态时的 12.37% 逐渐降低直至无法工作.当缺陷态密度小于  $5 \times 10^{13}$  时,转化效率几乎与理想状态下相同,当缺陷态大于  $5 \times 10^{18}$  时,转化效率已经降到 1% 以下.在一般情况下,缺陷态密度在  $10^{15} \sim 10^{17}$  左右,在这区域对应的转化效率变化趋势非常明显,因此改进生产工艺,改善非晶硅材料的缺陷态密度能有效地提高太阳能电池的转化效率.

影响隙态密度的因素很多,其中掺杂浓度的改

变也可能对隙态密度产生影响.图 5 表示在不考虑影响其他半导体物理参量(如禁带宽度变化)的情况下,掺杂浓度对太阳能电池的性能影响的变化关系.

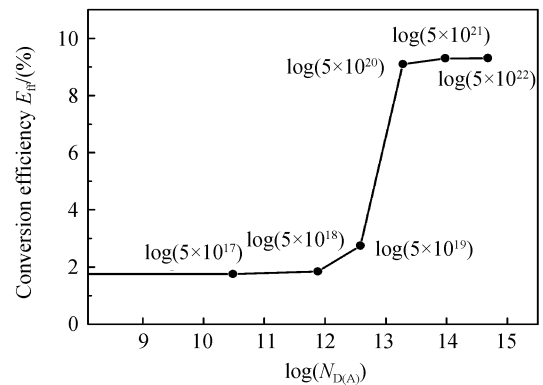


图 5 掺杂浓度对转化效率的影响

Fig. 5 The effect of doping to conversion efficiency

可以看出,随着掺杂浓度的变大,其转化效率由一个近似无掺杂状态非正常工作的转化效率,逐渐变为一个正常工作的太阳能电池转化效率,最后趋近于一个极限值.但是该情况是在理想的状态下模拟,由半导体理论可知:当掺杂浓度高于一定程度的时候,也就是达到通常所说的中等掺杂情形,会发生杂质的电离能开始下降的现象,使得  $N_{\text{D}}^+ \ll N_{\text{D}}$ ,  $N_{\text{A}}^+ \ll N_{\text{A}}$ .当接近重掺杂情形时,杂质带和主带将在能量上发生重叠,会降低禁带宽度,也会对缺陷态密度产生影响,从而使得太阳能电池不能正常工作<sup>[6]</sup>.因此,结合各种因素,掺杂浓度一般取在  $10^{18} \sim 10^{20}$  之间最佳,即能满足高的转化效率,也能降低掺杂工艺的难度.

## 3 结论

综上所述,对于非晶硅太阳能电池,影响其各项性能参量的因素很多,包括正面生长的 ITO 材料的功函数、本征层厚度、掺杂浓度、材料的禁带宽度、缺陷态等等.本文运用了 AMPS-1D 程序模拟设计了非晶硅太阳能电池的各种参量对性能的影响以及分析各种影响的理论依据.通过软件模型模拟,在最优化条件功函数达到 5.1 eV,禁带宽度 1.8 eV,本征层厚

度 265 nm 等,得到非晶硅转化效率达到 9.885%,比市场上一般非晶硅太阳能电池 6%~8%提高了将近 2%左右.本文为实际生产非晶硅太阳能电池的制作,改进工艺条件,提高转化效率起到了指导作用.

#### 参考文献

- [1] HU Kong-xun, ZHENG Jun. Amorphous silicon solar cell industry opportunities [J]. *Advanced Materials Industry*, 2007(9): 44-48.  
胡宏勋,郑君.非晶硅太阳能电池产业的机遇[J].*新材料产业*, 2007(9): 44-48.
- [2] LI Yi, HU Sheng-ming. Development trends in amorphous silicon tandem solar cells [J]. *Vacuum Science and Technology*, 2000, **20**(3): 222-225.  
李毅,胡盛明.非晶硅叠层太阳能电池的现状与发展方向[J].*真空科学与技术*, 2000, **20**(3): 222-225.
- [3] SAKURAI M, SAKAI T, LEI Yun. Amorphous silicon solar cell R&D status and trends[J]. *China Construction Solar @ Renewable Energy Sources*, 2007(1): 48-49.  
桜井正博,酒井利明,雷云.非晶硅太阳能电池的现状和研发动向[J].*中国建设动态(阳光能源)*, 2007(1): 48-49.
- [4] HU Zhi-hua, LIAO Xian-bo, ZENG Xiang-bo, et al. Numerical simulation of nc-Si : H/c-Si heterojunction solar cells[J]. *Acta Physica Sinica*, 2003, **52**(1): 217-224.  
胡志华,廖显伯,曾湘波,等.纳米硅(nc-Si : H)晶体硅(c-Si)异质结太阳能电池的数值模拟分析[J].*物理学报*, 2003, **52**(1): 217-224.
- [5] FONASH S J. A manual for AMPS-1D[DB/OL]. [2010-09-11] <http://wenku.baidu.com/view/adf4db8102d276a200292ec2.html>.
- [6] 叶良修.半导体物理学[M].北京:高等教育出版社,2007.
- [7] LIN Hong-sheng, LIN Gang, DUAN Kai-min. Study of stability in a-Si/poly-Si tandem solar cells [J]. *Semiconductor Technology*, 2000, **25**(1): 50-52.  
林鸿生,林罡,段开敏.a-Si/poly-Si叠层太阳能电池稳定性研究[J].*半导体技术*, 2000, **25**(1): 50-52.
- [8] ZHANG Yong, LIU Yan, LÜ Bin, et al. Influence of barrier height of the front contact on the amorphous silicon and microcrystalline silicon heterojunction solar cells [J]. *Acta Physica Sinica*, 2009, **58**(4): 2829-2835.  
张勇,刘艳,吕斌,等.前端接触势垒高度对非晶硅和微晶硅异质结太阳能电池的影响[J].*物理学报*, 2009, **58**(4): 2829-2835.
- [9] SINHA S P, DUBEY G C. Calculation of amorphous silicon solar cell parameters with different doping levels[C]. Energy Conversion Engineering Conference and Exhibit, 2000(IECEC) 35th Intersociety, 2000, **2**: 1205-1212.
- [10] WANG Hong-cheng, LIN Xuan-ying, ZENG Xiao-hua. A computer simulation on optimal design of a-Si : H stacked solar cells[J]. *Journal of Functional Materials*, 2003, **34**(6): 673-675.  
王红成,林璇英,曾晓华.a-Si : H叠层薄膜太阳能电池的最佳设计的计算机模拟[J].*功能材料*, 2003, **34**(6): 673-675.

## Structural Simulations of Amorphous Silicon Solar Cells

HE Zhuo-ming, JIN Shang-zhong, LIANG Pei, CEN Song-yuan

(College of Optical and Electronic Technology, China Jiliang University, Hangzhou 310018, China)

**Abstract:** In order to theoretically improve the conversion efficiency of amorphous silicon solar cells, this article uses AMPS (Analysis of Microelectronic and Photonic Structures) mode was used to module the a-Si solar cells with a structure of TCO/p-a-SiC : H/i-a-Si : H/n-a-Si : H/metal. The intrinsic layer thickness, band gap, doping concentration, defect density of states and other factors were analyzed and compared on the performance of solar cells. The simulation results are as follows: when the work function equals to 5.2 eV, band gap is about 1.8 eV, the intrinsic layer thickness is 265 nm, and amorphous silicon solar cell's conversion efficiency can be 9.855%, which is almost 2% more than the average conversion efficiency of amorphous silicon solar cells.

**Key words:** Amorphous silicon; Solar cell; Simulation; Function parameters