

p 层空穴浓度及厚度对 InGaN 同质结太阳电池性能的影响机理研究*

潘洪英 全知觉†

(南昌大学, 国家硅基 LED 工程技术研究中心, 南昌 330047)

(2019 年 6 月 8 日收到; 2019 年 7 月 25 日收到修改稿)

采用数值模拟的方法, 研究了 p 层空穴浓度和厚度对不同铟组分 InGaN p-i-n 同质结太阳电池性能的影响规律及其内在机理. 模拟计算的结果显示: 随着 p 层空穴浓度和厚度的增加, 太阳电池的转换效率均呈先增加、后略微下降的趋势; 而且铟组分越高, p 层空穴浓度和厚度的影响越大. 为更好地理解这一规律, 本文从太阳电池的收集效率、 $I-V$ 特性、内建电场和载流子输运等方面分析, 阐述了其背后的物理机理; 研究结果对 InGaN 太阳电池的结构设计及实验制备有一定的理论指导意义.

关键词: 数值模拟, InGaN, 同质结, 太阳电池

PACS: 61.72.uj, 85.60.-q, 88.40.hj

DOI: 10.7498/aps.68.20191042

1 引言

III 族氮化物材料因其极具吸引力的固有特性在半导体行业中备受瞩目^[1-4], 其中三元合金 InGaN 材料以其优越的光伏特性得到众多科研工作者的青睐. 通过调节铟组分可以使 InGaN 材料的禁带宽度从 3.4 eV(GaN) 到 0.65 eV(InN) 连续可调^[5,6], 对应的吸收波长覆盖整个可见光太阳光谱^[7]. 此外, InGaN 材料具有高吸收系数 ($\sim 10^5 \text{ cm}^{-1}$)^[8]、高载流子迁移率^[9]、高化学稳定性^[10,11]、高耐辐射性^[12]和高导热性^[7]. 因此, 其具有成为高效太阳电池和空间太阳电池^[12]的巨大潜能.

由于异质结界面势垒的存在, 在理论上, InGaN 同质结相对于异质结具有更好的光伏特性^[13]. 另外, p-i-n 结构中本征层 (i 层) 可以起到拓宽入射光吸收区的作用^[14], 因此 p-i-n 结构比 p-n 结构更具优势. 很多研究团队对 InGaN p-i-n 同质结太阳

电池进行了大量的实验研究, 但是实验室制备出的电池光电转换效率均低于 5%^[14-17]. 众所周知, 太阳电池的转换效率是太阳电池光电性能的综合体现, 也是衡量电池优劣的重要参数; 它由各种影响因素——掺杂、厚度、铟组分、少数载流子寿命、缺陷密度等共同决定. 深入理解上述因素对转换效率的影响机理是改善太阳电池性能的关键. Feng 等^[18]以及 Wu 等^[19]通过模拟研究了 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ p-i-n 同质结太阳电池中 i 层背景掺杂浓度, 铟组分, 厚度和缺陷密度对电池转换效率的影响规律, 但均未对 p 层参数进行研究. 虽然周梅和赵德刚^[20]研究了 p-InGaN 层厚度对 p-i-n 结构 InGaN 单结太阳能电池的短路电流 (J_{sc})、开路电压 (V_{oc})、转换效率等性能的影响, 但未进行深层物理机制的剖析. Benmoussa 等^[21]和 Mesrane 等^[22]通过模拟软件分别优化了 $\text{In}_{0.52}\text{Ga}_{0.48}\text{N}$ pn 结以及 $\text{In}_{0.622}\text{Ga}_{0.378}\text{N}$ pn 结中 p 层的最佳掺杂浓度, 优化后得到的最佳掺杂浓度分别为 $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ 和 $1.5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

* 国家自然科学基金 (批准号: 11674147) 和江西省重点研发计划 (批准号: 20171BBE50052) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: quanzhijue@ncu.edu.cn

他们未考虑器件模型中 p 层掺杂剂 Mg 的离化问题, 且均未就 p 层掺杂浓度对太阳能电池性能的影响规律及其内在机理进行详细分析. 综合他们的结果可得: 对于不同组分的 InGa_xN 太阳能电池, p 层的最佳掺杂浓度不同. 但是目前尚未见有文献对该现象进行解释. 随着组分的增加, InGa_xN 材料的临界厚度变薄^[23]、p 型掺杂困难^[21], 这使得研究 p 层空穴浓度及厚度的影响机理变得十分重要而迫切. 本文通过数值模拟, 分别研究 p 层空穴浓度和厚度对不同组分 In_xGa_{1-x}N p-i-n 同质结太阳能电池转换效率的影响规律, 并从物理机理上分析形成这一影响规律的内在原因. 本文的研究将有助于理解 p 层参数对电池转换效率的影响规律, 为实验现象的合理分析提供详细的理论支持, 对今后 InGa_xN 同质结太阳能电池的设计及制备有一定的指导作用.

2 数值模型

模拟求解的主要物理方程包括输运方程 (漂移扩散输运模型和能量平衡输运模型)、泊松方程、自由空穴的连续性方程和自由电子的连续性方程等. 本文通过商业模拟软件 ATLAS^[24] 模块建立 InGa_xN p-i-n 同质结太阳能电池数值模型, 在 300 K, 一个太阳 AM1.5(100 mW/cm²) 的辐照环境下进行一系列的器件性能模拟.

In_xGa_{1-x}N p-i-n 同质结太阳能电池结构如图 1 所示. 整个器件面积为 100 μm × 100 μm. 由于是同质结, 器件内部界面处由极化产生的等效界面电荷为零; 另外, 考虑到表面态的补偿作用, 整个器件上、下表面由极化产生的束缚电荷均被假设为零. GaN 中 Mg 受主的热激活能高达 140—220 meV, Mg 受主的离化率为 1%—5%^[25,26], 使得 p 型 GaN 空穴浓度很低. 所以在模型中 p 型 In_xGa_{1-x}N 材料中 Mg 掺杂剂的离化率设为 1%^[27]; 电池表面无光反射; 电池的电极接触为欧姆接触且阳极的遮光面积为 5%^[28]; 前表面和背表面复合速度为 1 × 10⁴ cm/s^[28]; 复合模型为俄歇复合和 Shockley-Read-Hall (SRH) 复合, 电子和空穴的俄歇复合系数均为 1.4 × 10⁻³⁰ cm⁶/s^[29], In_xGa_{1-x}N 材料的 SRH 少子寿命设定为 1 ns^[30]. 表 1 中的参数作为器件结构的基准参数, 通过仅改变其中的某一个参数来模拟计算该参数对太阳能电池性能的影响规律.

In_xGa_{1-x}N 三元合金的禁带宽度可通过 (1) 式^[31]

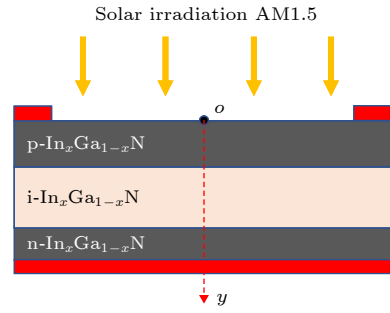


图 1 In_xGa_{1-x}N p-i-n 同质结太阳能电池结构示意图 y 是距离 p 层表面的位置, $y = 0$ 代表 p 层表面

Fig. 1. Schematic of In_xGa_{1-x}N p-i-n homojunction solar cells. y is the position measured from the p-layer surface and $y = 0$ represents the p-layer surface.

表 1 In_xGa_{1-x}N p-i-n 同质结器件中的基准参数
Table 1. Parameters of baseline for In_xGa_{1-x}N p-i-n homojunction solar cells.

参数	基准值
组分/%	20, 40, 60
少子寿命/ns	1
p层掺杂激活浓度/cm ⁻³	5 × 10 ¹⁷
i层掺杂浓度/cm ⁻³	1 × 10 ¹⁷
n层掺杂浓度/cm ⁻³	5 × 10 ¹⁷
p层厚度/μm	0.2
i层厚度/μm	0.4
n层厚度/μm	2
表面复合速度/cm·s ⁻¹	1 × 10 ⁴

计算得到:

$$E_g(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = E_{g,\text{InN}}x + E_{g,\text{GaN}}(1-x) - bx(1-x), \quad (1)$$

式中, $E_{g,\text{InN}} = 0.65$ eV 和 $E_{g,\text{GaN}} = 3.42$ eV 分别为 InN 与 GaN 的禁带宽度; b 为 In_xGa_{1-x}N 的弯曲因子, 值为 1.43 eV^[32].

In_xGa_{1-x}N 三元合金的吸收系数可根据 (2) 式^[28] 计算得到:

$$\alpha(E) = 10^5 \times \sqrt{a(E - E_g) + b(E - E_g)^2} \text{cm}^{-1}, \quad (2)$$

式中, E 为入射的光子能量; E_g 为材料的禁带宽度; a 和 b 为拟合参数^[33], 拟合参数在模拟文献中很容易找到^[8,28,32,34].

电子亲和势 (E_a) 的表达式为

$$E_a(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = E_{a,\text{InN}}x + E_{a,\text{GaN}}(1-x) + cx(1-x), \quad (3)$$

式中, $E_{a,\text{InN}} = 5.6$ eV, $E_{a,\text{GaN}} = 4$ eV, 分别为 InN 与 GaN 的电子亲和势; $c = 0.8$ eV 是弯曲因子^[34].

GaN 及 InN 的电子迁移率和空穴迁移率分别通过 (4) 式^[35] 计算得到:

$$\mu_{e,h} = \mu_{\min} + \frac{(\mu_{\max} - \mu_{\min})}{\left\{1 + \left(\frac{N}{N_g}\right)^\gamma\right\}}, \quad (4)$$

式中, N 为掺杂浓度; μ_{\max} , μ_{\min} 和 γ 为指定半导体材料的参数^[28].

$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 三元合金的电子迁移率 ($\mu_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N},e}$) 和空穴迁移率 ($\mu_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N},h}$) 则分别通过线性插值进行计算, 见 (5) 和式 (6).

$$\mu_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N},e} = \mu_{\text{InN},e}x + \mu_{\text{GaN},e}(1-x), \quad (5)$$

$$\mu_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N},h} = \mu_{\text{InN},h}x + \mu_{\text{GaN},h}(1-x), \quad (6)$$

(5) 和 (6) 式中, $\mu_{\text{InN},e}$, $\mu_{\text{InN},h}$ 分别为 InN 的电子迁移率和空穴迁移率; $\mu_{\text{GaN},e}$, $\mu_{\text{GaN},h}$ 分别为 GaN 的电子迁移率和空穴迁移率. 均可通过 (4) 式计算得到.

载流子产生率 $G(y)$ ^[19] 可表示为

$$G(y) = \int g(\lambda, y) \frac{\lambda}{hc} d\lambda, \quad (7)$$

(7) 式中, $g(\lambda, y) = -\frac{dI(\lambda, y)}{dy} = I_0(\lambda) \alpha(\lambda) e^{-\alpha(\lambda)y}$, λ 为入射光波长, h 为普朗克常数, c 为光在真空中的传播速度.

在整个 p-i-n 太阳能电池结构中, 收集效率 $\eta_{\text{Collection}}$ (collection efficiency) 定义为光生电流产生的电荷载流子数与光生电荷载流子总数之比^[18]. 表达式如下:

$$\eta_{\text{Collection}} = \left(\frac{J_{\text{sc}}}{q}\right) / \int G(y) dy, \quad (8)$$

式中, J_{sc} 为太阳能电池的短路电流密度, q 为电子电荷量.

太阳能电池的转换效率 $\eta_{\text{Conversion}}$ 由方程 (9)^[22] 给出:

$$\eta_{\text{Conversion}} (\%) = \frac{I_{\text{sc}} \times V_{\text{oc}} \times FF}{P_{\text{in}}}, \quad (9)$$

式中, P_{in} 为太阳光谱的入射功率, I_{sc} 为短路电流, V_{oc} 为开路电压, FF 为太阳电池的填充因子.

$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 三元合金的介电常数、电子质量、空穴质量等均通过线性插值进行计算获得. 模拟中, GaN 与 InN 的光学和电学参数来源于参考文献^[28].

3 结果与讨论

3.1 p 层空穴浓度对电池转换效率的影响

图 2(a) 为电池转换效率随 p 层空穴浓度的变化图, 整体趋势为: 随着空穴浓度的增加, 转换效率先增加后略微下降. 但对于不同铟组分的同质结电池, 其达到最大转换效率的空穴浓度不同. 铟组分为 20%, 40% 和 60% 的同质结分别在 1×10^{17} , 2×10^{17} 及 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 时获得最大转换效率, 其与 $3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 所对应的最小转换效率之间的降低率分别为 9.13%, 40.62% 及 62.27%. 降低率随着铟组分的增加而增大, 说明 p 层空穴浓度对高铟组分太阳能电池转换效率的影响更大. 那么当 p 层空穴浓度改变时, 影响电池转换效率的主导因素是什么? 本文通过收集效率, 内建电场及 $I-V$ 曲线来分析其内在机理.

通过分析不同铟组分太阳能电池在光照下的内建电场 (图 3(a), (c), (e)), 发现空穴浓度降低, 主电场区的电场强度也随之降低 (本文把 p 层与 i 层

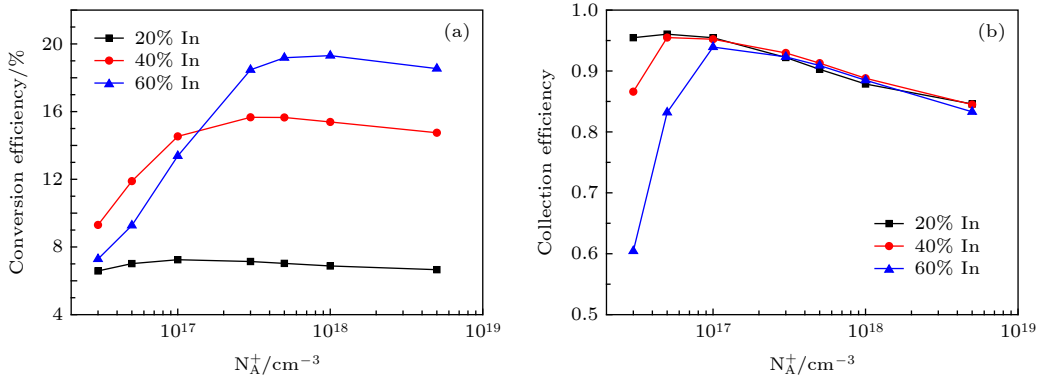


图 2 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$, $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{N}$ 和 $\text{In}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{N}$ p-i-n 同质结电池中, (a) 转换效率和 (b) 收集效率随 p 层空穴浓度 N_A^+ 的关系
Fig. 2. (a) Conversion efficiencies and (b) collection efficiencies with various N_A^+ for $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$, $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{N}$, $\text{In}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{N}$ p-i-n homojunction solar cells, respectively.

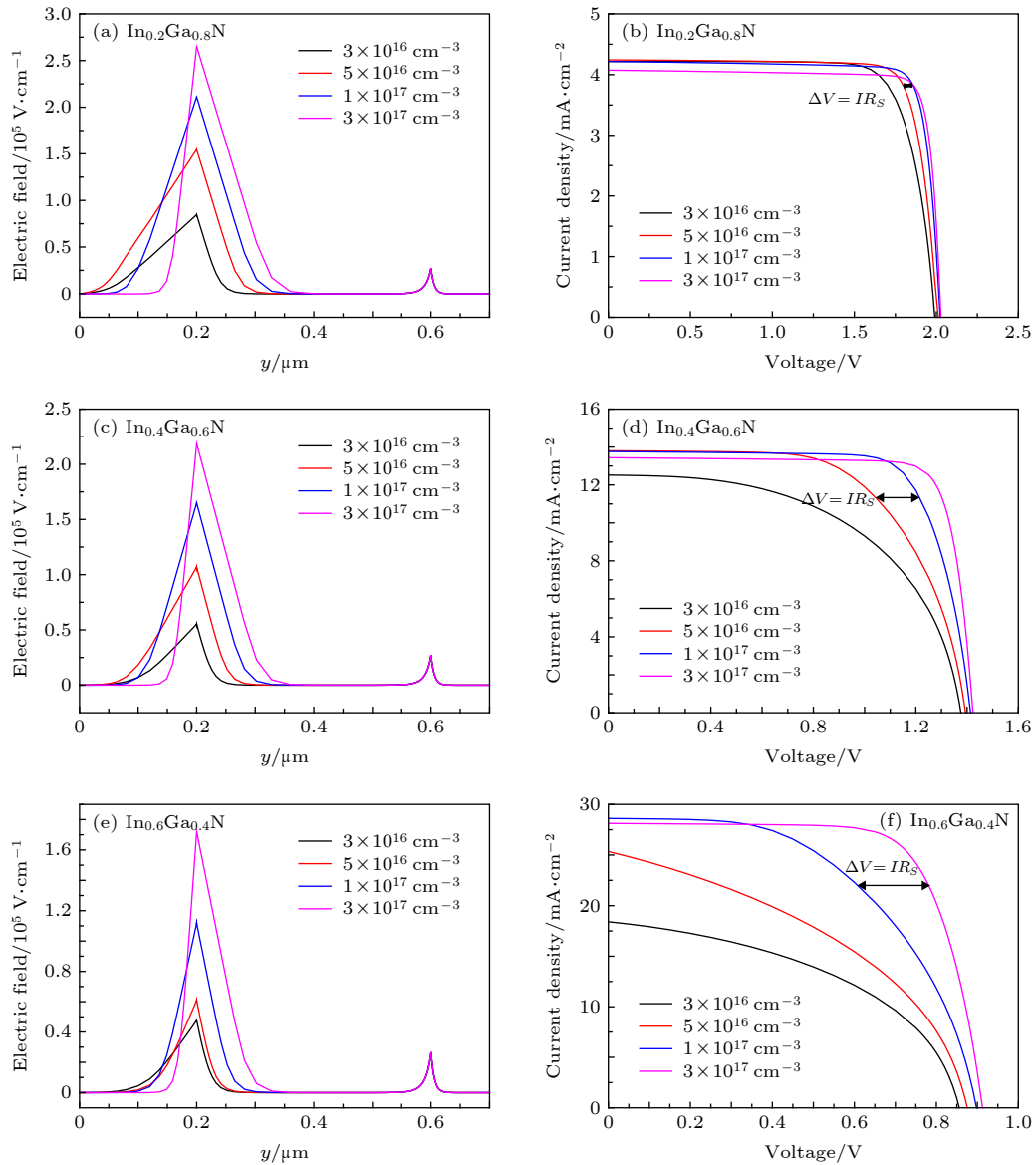


图 3 (a) $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$, (c) $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{N}$ 和 (e) $\text{In}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{N}$ p-i-n 同质结在零偏压及光照下, 不同空穴浓度 (N_A^+) 下的内建电场; (b) $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$, (d) $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{N}$ 和 (f) $\text{In}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{N}$ p-i-n 同质结在不同空穴浓度 (N_A^+) 下的 I - V 曲线

Fig. 3. Under AM1.5 illumination and zero bias, electric-field of (a) $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$, (c) $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{N}$ and (e) $\text{In}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{N}$ p-i-n homojunction solar cells with various hole concentration (N_A^+); I - V curves of (b) $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$, (d) $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{N}$ and (f) $\text{In}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{N}$ p-i-n homojunction solar cells with various hole concentration (N_A^+), respectively.

之间的内建电场称为主电场, n 层与 i 层之间的电场称为副电场). 这会使得主电场对光生电子空穴对的分离能力减弱, 最终导致收集效率和转换效率的降低. 图 2(b) 为不同镉组分太阳电池的收集效率随空穴浓度的变化图, 图中表明, 收集效率在达到最大值前, 随着空穴浓度的降低而降低. 这与上述分析相吻合. 图 2(b) 中收集效率随空穴浓度改变的变化趋势与图 2(a) 中转换效率的变化趋势一致. 那么, 收集效率是否就是影响转换效率的主要原因呢?

通过进一步比较图 2(a) 和图 2(b), 发现转换效率达到最大值所对应的空穴浓度比收集效率达到最大值所对应的空穴浓度更大. 例如 $\text{In}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{N}$ 在空穴浓度为 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 时达到最大转换效率, 而在 $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 就已经达到最大收集效率. 这说明随着 p 层空穴浓度的变化, 光生载流子的收集效率并不是制约电池转换效率的唯一因素. 通过比较不同空穴浓度下的 I - V 曲线 (如图 3(b), (d), (f)), 发现短路电流密度 (J_{sc}) 相差很小时 (即收集效率相差不大), I - V 曲线的最大功率点会随着空穴浓度

的降低而塌陷. 这是因为空穴浓度越低, 串联电阻 (体电阻) 越大. 对于 p 型半导体, 其电导率 $\sigma = pq\mu_p$ (式中 p 为 p 型半导体中的空穴浓度), 假设钢组分对 μ_p 的影响忽略不计, 那么不同钢组分的太阳能电池因空穴浓度变化引起的串联电阻的阻值变化相同. 由于钢组分越高, 其产生的电流密度越大, 那么串联电阻带来的功率损耗就越大, 最终导致最大功率点的塌陷程度越严重. 所以当主电场强度不再成为阻碍电子空穴对分离的原因时, 串联电阻依然是影响电池转换效率的一大因素, 这也就是为什么收集效率已经达到了最大值, 而转换效率还未达到最大值的内在原因. 而图 2(a) 中的转换效率达到最大值后, 随着 p 层空穴浓度的增加, 转换效率会略微降低的原因则是因为随着 p 层掺杂浓度的增加, 少数载流子的迁移率会降低, 导致收集效率减小 (如图 2(b) 所示), 进而降低了转换效率.

图 2(a) 中还表明高钢组分的太阳能电池需在相对更高的空穴浓度下才能达到最佳转换效率. 通过分析发现这背后的原因有两个: 其一, 同一空穴浓度下, 钢组分越高, 材料带隙越窄, pn 结的内建电场场强降低, 即光照下的主电场场强越弱. 如图 3(a) 和图 3(e) 所示, $\text{In}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{N}$ 需要在高于 $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 的空穴浓度下的电场强度才能与 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ 在 $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 的空穴浓度下的内建电场强度相当. 当电场强度低于某一临界值时, 其分离能力不足以将绝大部分光生电子空穴对分离, 会对收集效率造成不利影响; 只有当电场强度达到或超过该临界值时, 其对载流子的收集才不会造成影响. 本文把该临界值所对应的电场称为“阈值电场”. 其二, 钢组

分越高, 能吸收的太阳光谱波段越宽, 其光生载流子越多, 所需的阈值电场就越高. 因此, 高钢组分的电池在更高的空穴浓度下才能达到最大转换效率.

综上, 当空穴浓度很低时, 内建电场和串联电阻共同限制了电池的转换效率; 随着空穴浓度的增加, 内建电场达到阈值, 对收集效率不再产生影响; 此时, 串联电阻的影响尽管减弱, 但它仍旧会降低有效输出功率, 限制了转换效率; 当空穴浓度很大时, 迁移率成了限制转换效率的因素. 不同钢组分的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ p-i-n 同质结电池所对应的最优空穴浓度不同, 钢组分越高, 空穴浓度也需更高. 在空穴浓度低于 $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 时, $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{N}$ 太阳能电池比 $\text{In}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{N}$ 太阳能电池的转换效率更高 (如图 2(a) 所示). 在实验中, 钢组分越高, p 型掺杂越困难, $x > 60\%$ 的 p 型 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 甚至还会发生表面反型 [36,37]; 因此, 当工艺上无法实现合适的 p 层空穴浓度时, 不应一味追求高钢组分, 否则会产生适得其反的效果.

3.2 p 层厚度对电池转换效率的影响

$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 合金的带边吸收系数高达 10^5 cm^{-1} , 几百纳米的厚度就可以吸收绝大多数入射光 [38]. 图 4(a) 为转换效率随 p 层厚度变化的曲线图, 由图可知, 转换效率达到最大值后会随着 p 层厚度的增大而降低. 这是由于 p 层厚度增大, 收集效率降低造成的 (如图 4(b) 所示). 在同质结中, p 层也会吸收大量的入射光, 为了让 i 层尽可能多地吸收入射光, p 层厚度是否越薄越好呢? 周梅等人通过数值模拟研究 p 层厚度对 InGaN p-i-n 太阳能电池的

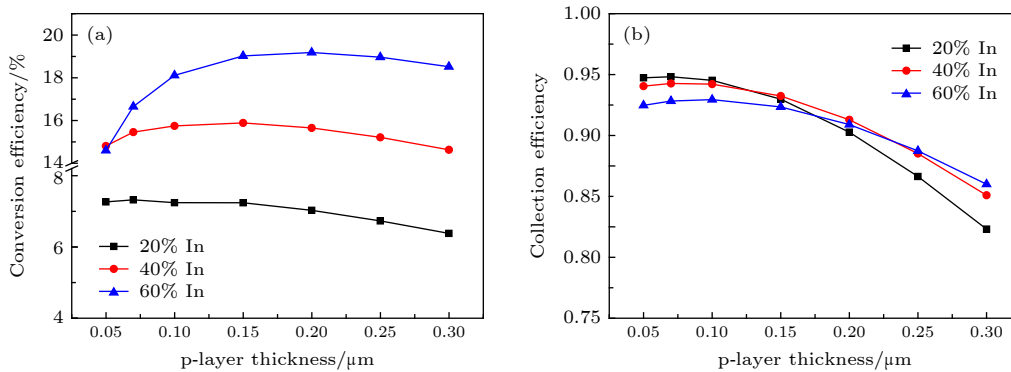


图 4 $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$, $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{N}$ 和 $\text{In}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{N}$ p-i-n 同质结电池中, (a) 转换效率和 (b) 收集效率随 p 层厚度的变化

Fig. 4. (a) Conversion efficiency and (b) collection efficiency versus p-layer thickness for $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$, $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{N}$ and $\text{In}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{N}$ p-i-n homojunction solar cells, respectively.

影响发现太阳能电池的转换效率会随着 p 层厚度的增加而单调降低, 他们认为造成这一现象的原因是由于短路电流会随着 p 层厚度的增加而持续降低^[20]. 但在本文中, 随着 p 层厚度的增加, InGa_{0.6}N 太阳能电池的转换效率先增加后降低 (如图 4(a) 所示), 与周梅等人所报道的变化规律不同. 那么导致图 4(a) 所示的变化规律的因素是什么? 有研究者指出: 当把表面复合纳入考虑后, 在 p 层厚度很薄时, 太阳能电池转换效率较低是由于 p 层表面离耗尽区太近使收集效率降低造成的^[22]. 但是本文中太阳能电池的收集效率并没有随着 p 层厚度的减薄而急剧下降 (如图 4(b) 所示).

为澄清这一问题, 本文进一步分析了不同表面复合速度下, In_{0.6}Ga_{0.4}N p-i-n 同质结太阳能电池 J_{sc} 和转换效率随 p 层厚度变化的曲线, 如图 5 所示. 由图可知, 随着表面复合速度的增大, J_{sc} 呈现下降的趋势. 这说明表面复合速度越大, 会造成短路电流的减小, 从而导致转换效率的降低. 但在同一表面复合速度下, 即使表面复合速度非常大 ($= 1 \times 10^6$ cm/s) 时, J_{sc} 未如文献^[22] 那样随着 p 层厚度的减小而降低, 反而是单调增加的, 这是因为 p 层越薄, p 层被主电场覆盖的区域占 p 层的比重就越大, 更有利于 p 层产生的光生载流子的分离. 且 p 层越薄, 主电场离阳极的距离就越短, 载流子的运输距离变短, 也有利于光生载流子的收集; 同时, 在 p 层厚度小于 0.1 μm 后, 仍旧存在转换效率随着 p 层厚度的减小而降低的现象; 而且, 表面复合速度越大, 最佳的 p 层厚度反而越薄, 如图 5(b) 所示. 由此可知, 尽管表面复合速度对转换效率的影响很大, 但其显然并不是“转换效率随着

p 层厚度减薄而下降”现象的主要原因, 即图 4(a) 中 p 层厚度较薄时, 转换效率随着 p 层厚度减薄而下降的现象可能并不是如文献^[22] 所述的由于 p 层表面离耗尽区太近造成, 而可能是由另一物理机理造成的.

为了探究上述的疑惑——p 层厚度较薄时, 转换效率为什么会随着 p 层厚度的减薄而下降? 本文比较了不同铟组分太阳能电池在不同 p 层厚度下的 $I-V$ 曲线 (图 6(a)), 发现 p 层厚度越薄, 不同铟组分太阳能电池的 $I-V$ 曲线上的最大功率点均存在不同程度的坍塌现象, 该现象显然是由串联电阻造成的. 分析其机理: 当 p 层厚度越薄, 沿平行于 pn 结的载流子横向运输的比重逐渐增大; 同时横向运输的截面积减小, p 层载流子横向运输受到的阻碍就越大; 这两者都会使得串联电阻增大, 即串联电阻会随着 p 层厚度的减薄而增大. 串联电阻越大, 填充因子就会越小, 电池的转换效率也会随之降低. 我们根据电阻计算公式 $R = \rho \frac{l}{S}$ (ρ 为电阻率, S 为 p 层横向截面积, l 为 p 层厚度) 计算了整个 p 层的横向电阻. 图 6(b) 为 In_{0.6}Ga_{0.4}N p-i-n 太阳能电池在不同 p 层厚度下, 整个 p 层的横向电阻阻值, 可知当 p 层厚度降低时, 其横向电阻会急剧增大. 这从侧面证明了 p 层厚度的减薄, 会导致载流子在 p 层横向运输时受到的阻碍增大. 图 6(a) 还表明, 铟组分越高, 最大功率点坍塌越严重. 根据 $\Delta V = IR_s$, 铟组分越高, 其光生电流密度越大, 其串联电阻 (R_s) 的分压 ΔV 则越大, 串联电阻带来的功率损耗也越大. 这解释了图 4(a) 中 60% 铟组分太阳能电池转换效率的降幅大于 20% 和 40% 铟组分太阳能电池的降幅的现象.

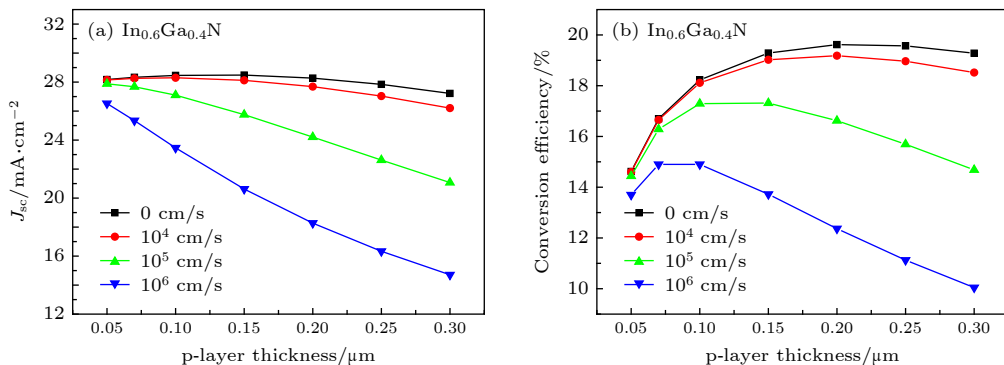


图 5 不同表面复合速度下, In_{0.6}Ga_{0.4}N p-i-n 同质结太阳能电池在不同 p 层厚度下的 (a) 短路电流密度 (J_{sc}) 和 (b) 转换效率
 Fig. 5. (a) Short current density (J_{sc}) and (b) conversion efficiency of In_{0.6}Ga_{0.4}N p-i-n homojunction solar cells with various p-layer thickness at different surface recombination velocities.

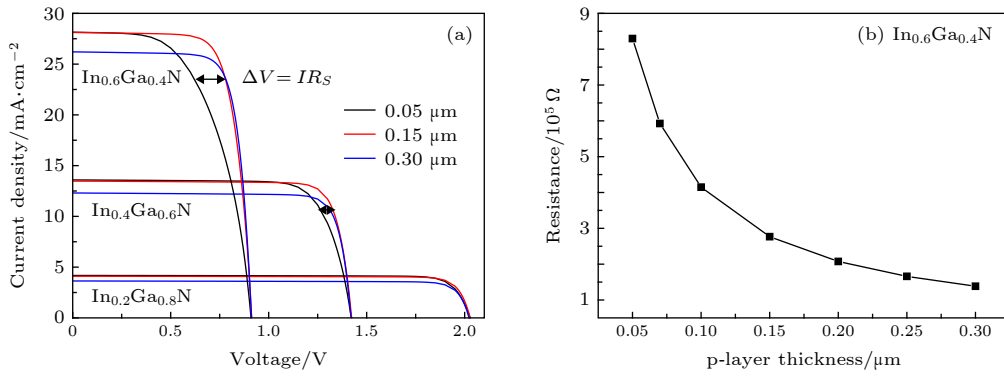


图 6 (a) $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$, $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{N}$ 和 $\text{In}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{N}$ p-i-n 同质结电池在不同 p 层厚度下的 I - V 曲线; (b) 不同 p 层厚度下 $\text{In}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{N}$ p-i-n 同质结电池 p 层的横向电阻

Fig. 6. (a) I - V curves of $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$, $\text{In}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{N}$ and $\text{In}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{N}$ p-i-n homojunction solar cells with various p-layer thickness and (b) the lateral resistance of p-layer for $\text{In}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{N}$ p-i-n homojunction solar cells.

综上, 通过分析 p 层厚度对太阳能电池转换效率的影响发现, 当 p 层厚度降低时, 收集效率会略微降低且载流子在 p 层的横向扩散受阻, 串联电阻增大, 这使得太阳能电池转换效率下降; 镉组分越高, 串联电阻带来的功率损耗越大, 导致高镉组分的太阳能电池转换效率的降幅随 p 层厚度的减薄而增大; 当 p 层厚度超过一定值时, 随着 p 层厚度的增加, p 层表面产生的电子空穴对由于距主电场区较远导致很多电子空穴对因复合而无法被两端的电极收集, 最终导致转换效率下降. 在实验中, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 材料的临界厚度会随着镉组分的增加而降低^[23], 这凸显了 p 层厚度在高镉组分太阳能电池设计中的重要性. 当表面复合速度大于 $1 \times 10^4 \text{ cm/s}$ 时, 为了减小表面复合对 p 层光生电子空穴对的影响, 高镉组分的 p 层厚度不应超过 $0.1 \mu\text{m}$.

4 结 论

本文模拟研究了 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ p-i-n 同质结太阳能电池 p 层空穴浓度和 p 层厚度对太阳能电池性能的影响规律, 并从物理上详细阐述了该变化规律下的内在机理. p 层空穴浓度的增加会使转换效率先增加后略微下降. 当 p 层空穴浓度很低时, 内建电场强较弱, 对光生电子空穴对的分离能力不足导致收集效率下降. 此外, p 层空穴浓度越低, 太阳能电池的串联电阻就越大, 这使得串联电阻带来的功率损耗越大. 所以收集效率降低和串联电阻增大共同导致了转换效率降低. 随着空穴浓度的增大, 内建电场达到阈值, 对收集效率不再产生影响; 此时, 串联电阻的影响尽管减弱, 但它仍旧降低了有效输出

功率, 限制了转换效率; 当空穴浓度很大时, 迁移率成了限制转换效率的主要因素. 模拟结果还表明, p 层厚度的增加也会使转换效率先增加后略微下降. p 层厚度越薄, 沿平行于 pn 结的载流子横向运输的比重逐渐增大; 同时横向运输的截面积减小, p 层载流子横向运输受到的阻碍就越大. 即 p 层越薄, 带来的串联电阻越大. 所以, 随着 p 层厚度的减薄, p 层横向串联电阻的增大是导致转换效率降低的主要原因. 当 p 层厚度超过一定厚度时, 随着 p 层厚度的增加, p 层表面产生的很多电子空穴对因为扩散到主电场距离的增大而复合了, 进而导致收集效率和转换效率的降低. 当表面复合速度大于 $1 \times 10^4 \text{ cm/s}$ 时, 为了减小表面复合对 p 层光生电子空穴对的影响, 高镉组分的 p 层厚度不应超过 $0.1 \mu\text{m}$.

参考文献

- [1] Jain S C, Willander M, Narayan J, Overstraeten R V 2000 *J. Appl. Phys.* **87** 965
- [2] Ambacher O 1998 *J. Phys. D* **31** 2653
- [3] Strite S T, Morkoc H 1998 *JVST B* **10** 1237
- [4] Mohammad S N, Morkoc H 1996 *Prog. Quant. Electron.* **20** 361
- [5] Wang H L, Zhang X H, Wang H X, Li B, Chen C, Li Y X, Yan H, Wu Z S, Jiang H 2018 *Chin. Phys. B* **27** 127805
- [6] Wu J, Walukiewicz W, Yu K M, Iii J W A, Haller E E, Hai L, Schaff W J, Saito Y, Nanishi Y 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 3967
- [7] Bhuiyan A G, Sugita K, Hashimoto A, Yamamoto A 2012 *IEEE J. Photovolt.* **2** 276
- [8] Muth J F, Lee J H, Shmagin I K, Kolbas R M, Casey H C, Keller B P, Mishra U K, Denbaars S P 1997 *Appl. Phys. Lett.* **71** 2572
- [9] Nanishi Y, Saito Y, Yamaguchi T 2003 *Jpn. J. Appl. Phys.* **42** 2549

- [10] Wu Y, Sun X J, Jia Y P, Li D B 2018 *Chin. Phys. B* **27** 126101
- [11] Tran B T, Chang E Y, Trinh H D, Lee C T, Sahoo K C, Lin K L, Huang M C, Yu H W, Luong T T, Chung C C 2012 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **102** 208
- [12] Wu J, Walukiewicz W, Yu K M, Shan W, Ager J W, Haller E E, Hai L, Schaff W J, Metzger W K, Kurtz S 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 6477
- [13] Fabien C A M, Moseley M, Gunning B, Doolittle W A, Ponce F A 2014 *IEEE J. Photovolt.* **4** 601
- [14] Cai X M, Zeng S W, Zhang B P 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 183516
- [15] Islam M R, Kaysir M R, Islam M J, Hashimoto A, Yamamoto A 2013 *J. Mater. Sci. Technol.* **29** 128
- [16] Shim J P, Choe M, Jeon S R, Seo D, Lee T, Lee D S 2011 *Appl. Phys. Express* **4** 1166
- [17] Chen X, Matthews K D, Hao D, Schaff W J, Eastman L F 2008 *Phys. Status Solidi* **205** 1103
- [18] Feng S W, Lai C M, Chen C H, Sun W C, Tu L W 2010 *J. Appl. Phys.* **108** 093118
- [19] Wu S, Cheng L, Wang Q 2018 *Superlattice Microst.* **119** 9
- [20] Zhou M, Zhao D G 2015 *Chin. J. Lumin.* **36** 534 (in Chinese)
[周梅, 赵德刚 2015 *发光学报* **36** 534]
- [21] Benmoussa D, Hassane B, Abderrachid H 2013 *International Renewable and Sustainable Energy Conference (IRSEC)* Ouarzazate, Morocco, March 7–9, 2013 p23
- [22] Mesrane A, Rahmoune F, Mahrane A, Oulebsir A 2015 *Int. J. Photoenergy* **2015** 1
- [23] Holec D, Costa P M F J, Kappers M J, Humphreys C J 2007 *J. Cryst. Growth* **303** 314
- [24] Michael S, Bates A, Green M 2005 *Conference Record of the Thirty-first IEEE Photovoltaic Specialists Conference 2005* Lake Buena Vista, FL, USA, Jan. 3–7, 2005 p719
- [25] Fischer S, Wetzel C, Haller E E, Meyer B K 1995 *Appl. Phys. Lett.* **67** 1298
- [26] Bhattacharyya A, Li W, Cabalu J, Moustakas T D, Smith D J, Hergig R L 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 4956
- [27] Chao L, Ren Z, Xin C, Zhao B, Wang X, Yin Y, Li S 2014 *IEEE Photon. Technol. Lett.* **26** 134
- [28] Fabien C A M, Doolittle W A 2014 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **130** 354
- [29] Shen Y C, Mueller G O, Watanabe S, Gardner N F, Krames M R 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 2
- [30] Chang J Y, Yen S H, Chang Y A, Kuo Y K 2013 *IEEE J. Quantum Electron.* **49** 17
- [31] Wu J, Walukiewicz W 2003 *Superlattice Microst.* **34** 63
- [32] Wu J, Walukiewicz W, Yu K M, Ager J W, Haller E E, Lu H, Schaff W J 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 4741
- [33] Walukiewicz W, Iii J W A, Yu K M, Liliental-Weber Z, Wu J, Li S X, Jones R E, Denlinger J D 2006 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **39** 119
- [34] Brown G F, Iii J W A, Walukiewicz W, Wu J 2010 *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **94** 478
- [35] Kuo Y K, Chang J Y, Shih Y H 2012 *IEEE J. Quantum Electron.* **48** 367
- [36] Brown G F, Ager J W, Walukiewicz W, Schaff W J, Wu J 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 6477
- [37] King P D C, Veal T D, Jefferson P H, Mcconville C F, Lu H, Schaff W J 2007 *Phys. Rev. B* **75** 115312
- [38] Neufeld C J, Toledo N G, Cruz S C, Iza M, Denbaars S P, Mishra U K 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 1571

Effects of p-layer hole concentration and thickness on performance of p-i-n InGaN homojunction solar cells^{*}

Pan Hong-Ying Quan Zhi-Jue[†]*(National Institute of LED on Si Substrate, Nanchang University, Nanchang 330047, China)*

(Received 8 June 2019; revised manuscript received 25 July 2019)

Abstract

In this paper, the effects of p-layer hole concentration and p-layer thickness on the performances of InGaN p-i-n homojunction solar cells with different indium components and their intrinsic mechanisms are investigated by numerical simulations. It is found that the conversion efficiency of solar cells first increases and then decreases slightly with the increase of p-layer hole concentration and p-layer thickness. Moreover, the change of p-layer hole concentration and p-layer thickness will cause great changes of the conversion efficiency of the solar cells, especially as the indium composition increases. In order to better clarify and understand the physical mechanism of this phenomenon, the collection efficiency, I - V characteristic, built-in electric field and carrier transport of solar cells are analyzed in this paper. When the hole concentration is insufficient, the built-in electric field is not strong enough to separate the most of the electric-hole pairs. This will reduce the collection efficiency. In addition, the lower the hole concentration, the higher the series resistance of solar cells will be and the more the power loss. So a conclusion can be drawn that the lower hole concentration of p-layer would be accompanied by the reduction of collection efficiency and the increase of series resistance, thus resulting in a lower conversion efficiency. With the increase of the hole concentration which is below an optimal value, the built-in electric field reaches the threshold, which can improve the collection efficiency. At the same time, although the series resistance is reduced to a certain extent, it still reduces the effective output power and limits the conversion efficiency. When the hole concentration is higher than the optimal value, the carrier mobility becomes the main factor limiting the conversion efficiency. As for the p-layer thickness, the simulation results indicate that the lateral transport of carriers from the p-layer to the anode electrodes becomes more obstructive with the thinning of p-layer thickness. This is because when the p-layer thickness decreases, thus causing the p-layer sectional area to decrease, the lateral series resistance becomes higher. It is clear that when the p-layer is too thin, the lateral series resistance is one of the main limiting factors affecting the conversion efficiency of solar cells.

Keywords: numerical simulation, InGaN, homojunction, solar cell**PACS:** 61.72.uj, 85.60.-q, 88.40.hj**DOI:** [10.7498/aps.68.20191042](https://doi.org/10.7498/aps.68.20191042)

^{*} project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11674147) and the Key Research and Development Plan of Jiangxi Province, China (Grant No. 20171BBE50052).

[†] Corresponding author. E-mail: quanzhijue@ncu.edu.cn