

文章编号: 1672-8785(2017)03-0031-06

能带匹配对 β -FeSi₂(n)/c-Si(p) 太阳能电池转化效率的影响

刘振芳 刘淑平 聂慧军

(太原科技大学应用科学学院, 太原 030024)

摘 要: 运用 AFORS-HET 软件对 TCO/ β -FeSi₂(n)/a-Si(i)/c-Si(p)/ μ c-Si(p⁺) 型太阳能电池各层结构之间的能带匹配进行了模拟。模拟结果表明, 透明导电氧化膜与 n 型层间的能带匹配对太阳能电池的转化效率、开路电压和填充因子有较大影响, 可以通过能带匹配有效地提高太阳能电池的转化效率。导带补偿会阻碍少数载流子的输运, 界面态会加快少数载流子在界面的复合, 降低导带失配, 从而有利于提高太阳能电池的转化效率。衬底与背场的界面电场可以提高太阳能电池的转化效率。

关键词: β -FeSi₂; AFORS-HET; 功函数; 能带失配; 界面态; 转化效率

中图分类号: TM914.4 **文献标志码:** A **DOI:** 10.3969/j.issn.1672-8785.2017.03.006

Influence of Band Matching on the Conversion Efficiency of β -FeSi₂(n)/c-Si(p) Solar Cell

LIU Zhen-fang, LIU Shu-ping, NIE Hui-jun

(School of Applied Science, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan 030024, China)

Abstract: The band matching among layers of a TCO/ β -FeSi₂(n)/a-Si(i)/c-Si(p)/ μ c-Si(p⁺) solar cell is simulated by using the software AFORS-HET. The simulation result shows that the matching of the transparent conductive oxide with the n-type layer has a greater influence on the conversion efficiency, open-circuit voltage and fill factor of a solar cell. The conversion efficiency of the solar cell can be improved effectively through band matching. Since conduction band compensation can hinder the transport of minority carriers and interface state can accelerate the recombination of minority carriers, conduction band mismatching can be reduced. This is beneficial to the improvement of the conversion efficiency of solar cells. The interface electric field between substrate and back field can improve the conversion efficiency of solar cells.

Key words: β -FeSi₂; AFORS-HET; work function; band mismatching; interface state; conversion efficiency

0 引言

1994 年, 日本三洋公司在太阳能电池的发射层和衬底间加入一层非晶硅本征层, 使得异质结太阳能电池转化效率高达 20%, 此后本征

层结构便成为了有效提高太阳能电池转化效率的重要手段^[1]。后来三洋公司用重掺杂非晶硅作为背场, 利用背场对光生少子的势垒效果来减少光生少子在电池背表面的复合, 有效提高了

收稿日期: 2016-12-26

作者简介: 刘振芳 (1989-), 男, 山西吕梁人, 硕士研究生, 主要研究方向为光学器件与光电材料。

E-mail: 245867718@qq.com

太阳能电池的转化效率^[2]。近年来各项实验研究表明,透明导电氧化膜(Transparent Conductive Oxide, TCO)与太阳能电池的能带匹配,也能够提高转化效率^[3]。本征层、背场和 TCO 结构都可以提高太阳能电池的转化效率,因此本文采用 TCO/发射层/本征层/衬底/背场这种结构来模拟太阳能电池的转化效率^[4]。

太阳能电池各层材料的选择直接关系到太阳能电池的性能。传统的晶体硅太阳能电池的转化效率虽然高,但其制造成本过高,并且过高的 pn 结扩散温度容易造成晶片损伤^[5]。虽然非晶硅成本低,光吸收系数高,是一种高效的太阳能电池材料,但其光谱利用率只有 48%,而且还存在光致衰退问题,至今没有彻底解决^[6]。 β -FeSi₂ 是一种直接带隙材料,0.87 eV 的带隙宽度使其光谱利用率达 90%。在制造工艺上, β -FeSi₂ 薄膜技术可以在硅表面外延,而且其制造和废弃过程都不会产生有毒物质,因此 β -FeSi₂ 是一种环境友好的发射层材料^[7]。由于需要在背场重掺杂才能提高转化效率,而且在非晶硅中很难掺杂高浓度的硼,而微晶硅中可以轻易地掺杂高浓度的硼,因此我们选微晶硅作为背场。对于上表面的 TCO,考虑材料的透光性和电阻大小,ZnO 和 ITO 是常用的太阳能电池透明导电膜。ZnO 的透光率大于 ITO,ITO 中铟元素在地壳中的含量较少且有毒,因此选择环境友好材料 ZnO^[8] 作为 TCO。综上所述,本文最终决定对 TCO/ β -FeSi₂(n)/a-Si(i)/c-Si(p)/ μ c-Si(p⁺) 型太阳能电池进行研究。

目前国内外对于 β -FeSi₂ 的研究大多集中于材料本身的制造工艺,对太阳能电池数值的模拟研究较少,而且对 β -FeSi₂(n)/c-Si(p) 太阳能电池数值的模拟大多集中于太阳能电池结构参数的模拟与优化,即通过对太阳能电池的发射层、本征层、背场层的厚度以及掺杂浓度的模拟与优化,得出厚度和浓度等最佳参数^[9]。本文将研究 β -FeSi₂(n)/c-Si(p) 太阳能电池各层能带匹配和界面态对载流子运输的影响,具体了解能带匹配对电池转化效率的影响机理,从而优化提高 β -FeSi₂(n)/c-Si(p) 的转化效率。重点分析:(1)TCO

与发射层 β -FeSi₂(n) 的能带匹配对转化效率的影响;(2)本征层 a-Si(i) 与衬底 c-Si(p) 的导带失配对电池转化效率的影响;(3)界面态的作用机理和对太阳能电池转化效率的影响。

1 电池结构与参数

AFORS-HET 是由德国 Stangle 教授等人设计开发的一款异质结太阳能电池数值模拟软件,本文用其来模拟图 1 中的 TCO/ β -FeSi₂(n)/a-Si(i)/c-Si(p)/ μ c-Si(p⁺) 结构异质结太阳能电池。太阳光通过电池发射层 β -FeSi₂(n) 和非晶硅本征层,在基区 c-Si(p) 被吸收,同时产生光生电子空穴对;光生少子在内建电场作用下向发射区和结区漂移,在两端累积形成光生电场^[10]。电池上表面的金字塔形陷光结构可使太阳光在 TCO 表面进行多次反射,以减少光损失。内部层之间同样采用陷光结构,有利于提高太阳能电池的效率^[11]。

电池的各层模拟参数在表 1 中列出。除可变参数外,其他参数均取 AFORS-HET 默认值。模拟光照条件为 AM1.5、辐照度 100 mW/cm²。

模拟时,各层的缺陷设定为:a-Si(i) 具有 Urbach 带尾,带尾的态密度均为 $2 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$,对于 p/n 型非晶硅,类施主/类受主的特征能量分别为 0.12 eV/0.08 eV、0.05 eV/0.035 eV、0.094 eV/0.068 eV;c-Si(n) 存在氧空位缺陷,其特征态密度为 $1 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$,特征能量为 0.56 eV; μ c-Si(p⁺) 取缺陷态密度为 $6 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$,类施主/类受主的高斯峰峰值能量为 1.1 eV/1.2 eV,峰值半宽为 0.22 eV/0.22 eV^[12]。

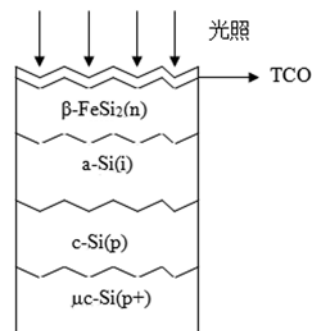


图 1 HIT 太阳能电池的结构示意图

表 1 电池的主要参数

结构参数	β -FeSi ₂ (n)	a-Si(i)	c-Si(p)	μ c-Si(p ⁺)
层厚 /nm	2	2	30000	5
介电常数	31	11.9	11.9	11.9
电子亲和势 /eV	4.71	3.5~4	4.05	4.05
带隙 /eV	0.87	1.72	1.12	1.6
光学带隙 /eV	1.12	1.72	1.12	1.6
有效导带密度 /cm ⁻³	1.7×10^{18}	1.0×10^{20}	2.84×10^{19}	3×10^{19}
有效价带密度 /cm ⁻³	1.7×10^{18}	1.0×10^{20}	1.04×10^{19}	2×10^{19}
电子迁移率 /cm ⁻² v ⁻¹ s ⁻¹	206	5	1041	50
空穴迁移率 /cm ⁻² v ⁻¹ s ⁻¹	168	1	412	5
受主掺杂浓度 /cm ⁻³	0	0	1.5×10^{16}	可变
施主掺杂浓度 /cm ⁻³	7×10^{20}	0	0	0
电子热速度 /cm·s ⁻¹	1.0×10^7	1.0×10^7	1.0×10^7	1.0×10^7
空穴热速度 /cm·s ⁻¹	1.0×10^7	1.0×10^7	1.0×10^7	1.0×10^7
层密度 /g·cm ⁻³	2.328	2.328	2.328	2.328
电子俄歇复合系数 /cm ⁶ ·s ⁻¹	0	0	2.2×10^{-31}	0
空穴俄歇复合系数 /cm ⁶ ·s ⁻¹	0	0	9.9×10^{-32}	0
带间复合系数 /cm ³ ·s ⁻¹	0	0	9.5×10^{-15}	0

2 结果分析与讨论

2.1 TCO 功函数与 n 型层的能带匹配

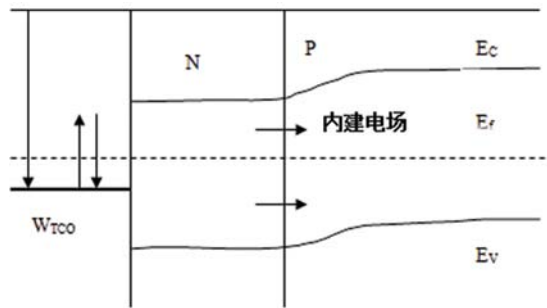


图 2 TCO 与 n 型层间能带匹配示意图

透明导电膜与半导体的接触为肖特基接触。由图 2 可知, 对于有 TCO 的异质结太阳能电池, 透明导电膜的功函数与费米能级存在高低落差。为了到达平衡, 电子会被低费米能级俘获。这样, 在 TCO/n 型材料接触面上就会形成界面电场, 其方向由 TCO 功函数大小和 n 型材料的带隙宽度决定^[13]。对于 TCO/ β -FeSi₂(n)/c-Si(p) 太阳能电池, 透明导电膜的功函数与 n 型 FeSi₂ 的费米能级存在高低落差, 由于 β -FeSi₂ 的带隙

宽度为定值, 所以本文中界面电场的方向由 TCO 功函数的大小决定^[14]。

β -FeSi₂(n) 的费米能级为 4.5 eV, TCO 取值为 4.1~5.0 eV。当 WTCO 大于 4.5 eV 即 WTCO 低于 β -FeSi₂(n) 的费米能级时, β -FeSi₂(n) 的电子流向 TCO, 形成了一个由 β -FeSi₂(n) 指向 TCO 的界面电场。由于界面电场的方向与电池本身内建电场的方向相反, 故该界面电场会削弱内建电场的强度。当 WTCO 小于 4.5 eV, WTCO 高于 β -FeSi₂(n) 的费米能级时, 电子由 TCO 流向 β -FeSi₂(n), 形成一个由 TCO 指向 β -FeSi₂(n) 的界面电场, 其方向与内建电场的方向一致, 故该电场会增强内建电场的强度^[15]。

图 3 为太阳能电池的性能随透明导电膜功函数变化的曲线。随着功函数的增大, 电池的开路电压、填充因子和转化效率的变化较大, 短路电流略微下降。这是因为当 WTCO 大于 4.5 eV 时, 界面电场的方向与内建电场的方向相反, 削弱了内建电场的强度; 随着 WTCO 的减小, 透明导电膜的功函数与 n 型 FeSi₂ 的费米能级的高低落差在减小, 流向 TCO 的电子减少, 指向

TCO 的界面电场强度减小, 对内建电场的抵消作用减小; 当 WTCO 等于 4.5 eV 时, 透明导电膜的功函数与 n 型 FeSi₂ 的费米能级不存在高低落差, 界面电场消失, 对内建电场的抵消作用消失; 当 WTCO 小于 4.5 eV 时, 随着 WTCO 的减小, 透明导电膜的功函数与 n 型 FeSi₂ 的费米能级又存在高低落差, 界面电场产生且随着 WTCO 的减小而增大; 当 WTCO 减小到 4.3 eV 时, 流向 β -FeSi₂(n) 的电子达到饱和, 界面电场不再增加, 电池性能达到最佳。

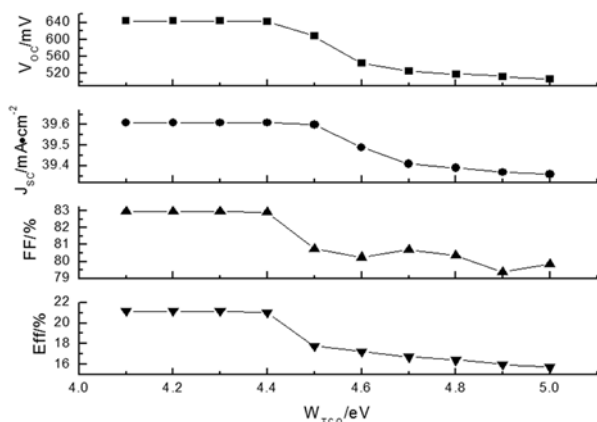


图 3 WTCO 对太阳能电池性能的影响

2.2 本征层与衬底的能带匹配

异质结太阳能电池各层采用不同的半导体材料, 层与层之间接触面两端半导体材料的禁带宽度和电子亲和势不同, 界面处的能带不再连续, 在本征层 a-Si 和衬底 c-Si 之间会产生能带失配。根据能带失配的定义, $\Delta E_C = \Delta\chi, \Delta E_V = \Delta E_g - \Delta\chi$ (式中, ΔE_C 和 ΔE_V 分别是本征层 a-Si 和衬底 c-Si 的导带和价带能量差, $\Delta\chi$ 是本征层 a-Si 和衬底 c-Si 的电子亲和势差, ΔE_g 是本征层 a-Si 和衬底 c-Si 的带隙差, 这里 ΔE_g 、 $\Delta\chi$ 取绝对值)。由于光生少数电子会受到导带失配所产生的势垒的阻碍, 导带失配越大, 越不利于电子的通过^[16]。由图 4 可知, 忽略界面态时, 太阳能电池的各项参数随本征层与衬底导带失配的增大而降低。随着 ΔE_C 的增大, 太阳能电池的整体性能呈下降趋势。当 $\Delta E_C \geq 0.5$ eV 时, 太阳能电池的效率几乎为零。由于导带失配会对光生电

子产生势垒效果, 导带失配越大, 越不利于电子通过, 因此本文中的导带失配控制在 0.2 eV 以内, 降低了本征层与衬底的导带失配, 因而是有利于电子通过的。

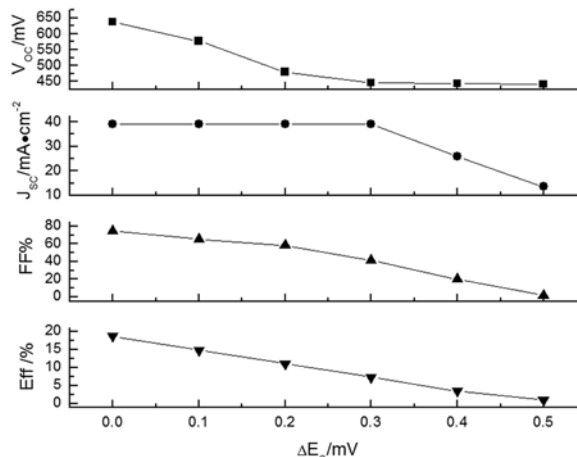


图 4 导带失配对太阳能电池性能的影响

异质结太阳能电池中, 界面态也是影响太阳能电池转化效率的一个不可忽略的关键因素。异质结电池的各层采用不同的半导体材料, 由于界面两端晶体原子的周期性排列发生改变, 在界面或界面附近会产生缺陷和悬挂键, 形成少子的势阱。这些界面态在电中性时低于界面两端的费米能级, 为了达到平衡, 界面两端半导体体内的电子会被界面态俘获, 在界面处形成一个势能尖峰; 电子想要通过界面, 就需要有足够的能量越过这个势能尖峰; 界面态越大, 界面电阻就越大, 所以界面态是通过加快少数载流子的复合速率来影响电池转化效率的^[17]。

同时考虑导带失配和界面态对太阳能电池转化效率的影响时, 先取界面态为定值, 随着导带失配的增大, 太阳能电池的性能参数会减小, 逐渐加大界面态, 太阳能电池的性能会大幅度降低。由图 5~ 图 8 可知, 太阳能电池的各项参数随着导带失配的增大而降低。界面态越大, 电池性能参数下降的幅度越大。当导带失配和界面态取值很小时 ($\Delta E_C < 0.2$ eV, $D_{it} < 10^{10}$ cm⁻²), 随着导带失配和界面态的增大, 太阳能电池的性能整体呈下降趋势; 当界面态取值较大

时 ($0.2 \text{ eV} < \Delta E_C < 0.5 \text{ eV}$, $10^{10} \text{ cm}^{-2} < D_{it} < 10^{12} \text{ cm}^{-2}$), 随着导带失配的增大, 太阳能电池的各项参数大幅度下降。由于界面态的增大会直接影响太阳能电池性能的各项参数, 界面态是提高太阳能电池转化效率的一个不可忽略的关键因素。

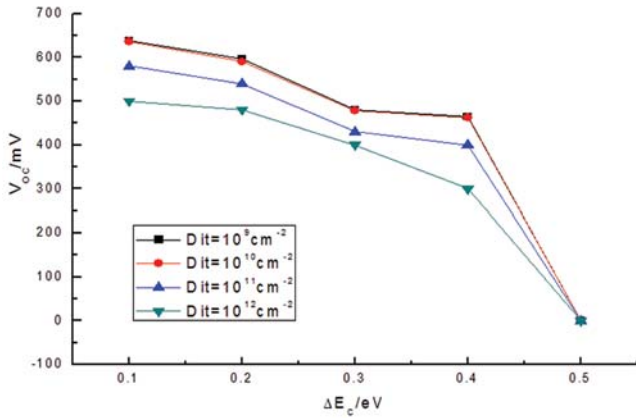


图 5 界面态不同时导带失配对开路电压的影响

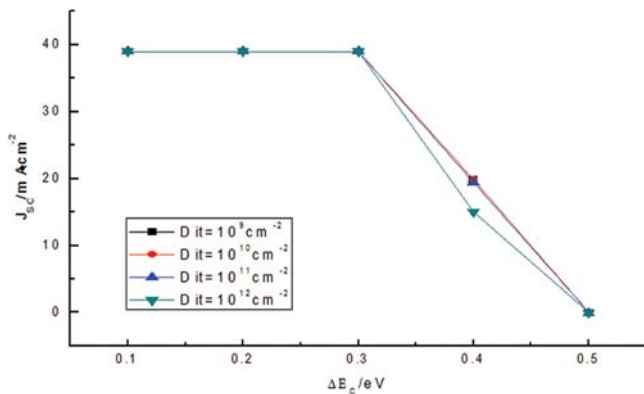


图 6 界面态不同时导带失配对短路电流的影响

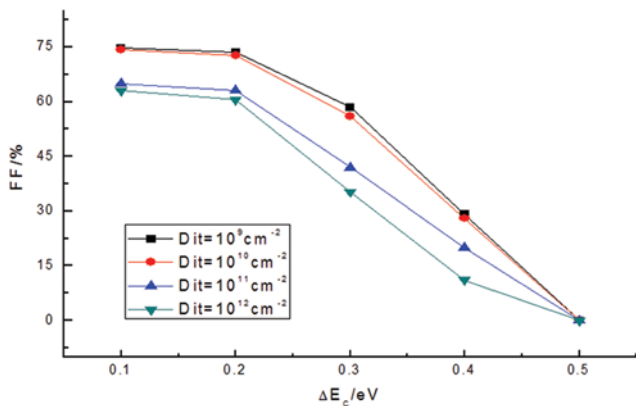


图 7 界面不同态时导带失配对填充因子的影响

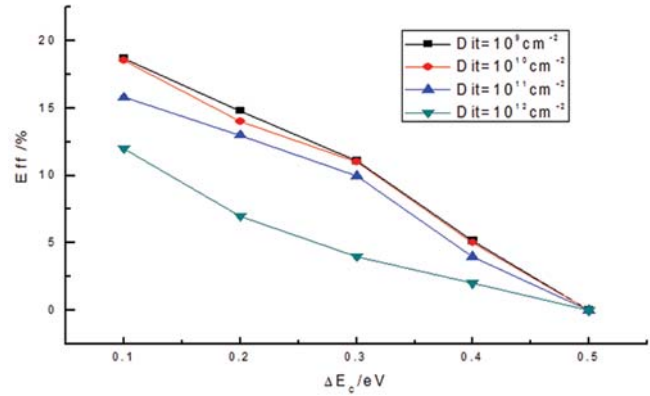


图 8 界面态不同时导带失配对转化效率的影响

2.3 背场的能带补偿对太阳能电池性能的影响

本文以 $\mu\text{-Si}(\text{p}^+)$ 作为 $\beta\text{-FeSi}_2(\text{n})/\text{c-Si}(\text{p})$ 太阳能电池的背场。由于 $\mu\text{-Si}(\text{p}^+)$ 是重掺杂, 在衬底和背场之间会产生由衬底指向背场的界面电场。该电场的方向与内建电场的方向一致, 因此 $\mu\text{-Si}(\text{p}^+)$ 背场可以提高电池开路电压和载流子收集效率。理论上, 衬底与背场能带的不连续会使得衬底与背场之间产生能带失配。导带失配对光生电子产生的势垒效果, 会影响少数载流子在衬底与背场之间的运输和少数子在背表面的复合速率, 从而影响太阳能电池的转化效率。当我们分别取 $\Delta E_C = 0.05 \text{ eV}$ 、 0.25 eV 、 0.45 eV 时, 太阳能电池的各项参数基本保持不变。因此衬底与背场之间的界面电场能提高太阳能电池的转化效率^[18]。

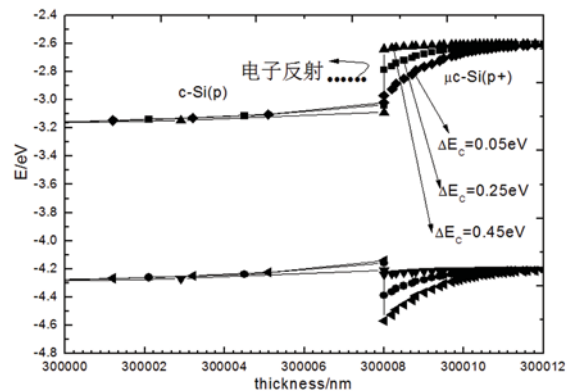


图 9 背场导带失配的能带示意图

3 结论

通过分析TCO与n型材料的能带匹配、本征层与衬底的导带失配及背场的作用原理可知,TCO与n型材料的费米能级存在高低落差,使得在TCO/n型材料之间会产生一个界面电场。当界面电场的方向与内建电场的方向一致时,内建电场的强度增大,此时的TCO可以有效提高太阳能电池的转化效率。光生少数电子会受到导带失配所产生的势垒阻碍。导带失配越大,越不利于电子的通过。当导带失配增大到大于0.2 eV时,太阳能电池的各项参数会大幅下降,因此导带失配应限制在0.2 eV以内。背场处由于浓度差产生的与内建电场方向一致的界面电场会增大太阳能电池的转化效率,衬底与背场之间的能带补偿对于提高太阳能电池转化效率的作用微小。界面态可以加快少数载流子的复合速率,界面态越大,太阳能电池转化的效率就越低。综上所述,当 $W_{TCO}=4.3$ eV时,导带失配和界面态的取值很小($\Delta E_C < 0.2$ eV, $D_{it} < 10^{10}$ cm^{-2}),背场浓度 $N_a=5 \times 10^{20}$ cm^{-3} 时,TCO/ β - $\text{FeSi}_2(\text{n})/\text{a-Si}(\text{i})/\text{c-Si}(\text{p})/\mu\text{c-Si}(\text{p}^+)$ 结构太阳能电池的性能最佳,各项参数达到最高, V_{OC} 为740.2 mV, J_{SC} 为43.67 $\text{mA} \cdot \text{cm}^{-2}$, FF 为70.1%, E_{ff} 为22.66%。

参考文献

- [1] 吕雁文,刘淑平,聂慧军.数值模拟提高 $\mu\text{c-Si:H}(\text{n})/\text{c-Si}(\text{p})$ 异质结太阳能电池的界面载流子传输质量[J].*光电子技术*, 2015,35(4):246-252.
- [2] 李浩,曾湘波,谢小兵,等. HIT太阳能电池的界面钝化研究[C].中国光伏大会暨国际光伏展览会, 2012.
- [3] 邸明东. P型衬底 $\text{a-Si:H}/\text{c-Si}$ 异质结太阳能电池背面场和界面性质数值模拟研究[D].江苏大学, 2010.
- [4] 杨光.基于非晶硅薄膜太阳能电池的实验与仿真研究[D].电子科技大学, 2012.
- [5] 吕雁文,刘淑平,聂慧军. $\mu\text{c-Si:H}(\text{n})/\text{c-Si}(\text{p})$ 异质结太阳能电池性能的模拟研究[J].*通信电源技术*, 2015,32(4):63-65.
- [6] 侯国付.新型薄膜窄带隙光伏材料 $\beta\text{-FeSi}_2$ 的研究进展[J].*激光与光电子学进展*, 2009(08):61-66.
- [7] 许文英,陈凤翔,王嘉赋. $\text{n-}\beta\text{-FeSi}_2/\text{p-Si}$ 异质结太阳电池的计算机模拟[J].*武汉理工大学学报*,2013(09):21-24.
- [8] 郭阳雪,孔祥洪,杨渭,等.硅太阳能电池输出功率与负载匹配特性[J].*实验室研究与探索*, 2011,30(7):20-22.
- [9] 杨达伟,高华,杨乐.晶体硅太阳能电池烧结匹配性研究[J].*电子工艺技术*, 2013(1):47-49.
- [10] 袁育杰,张楷亮,魏臻,等. n-i-p 微晶硅太阳能电池中p型掺杂层对其性能的影响[J].*中国科学:物理学力学天文学*, 2010(11):141-1415.
- [11] 杨少鹏,李占峰,赵艳新,等. ZnO 薄层对体异质结有机太阳能电池性能的影响[J].*人工晶体学报*, 2011,40(3):589-593.
- [12] 聂慧军,刘淑平,吕雁文,等. $\beta\text{-FeSi}_2(\text{n})/\text{c-Si}(\text{p})\text{HIT}$ 型太阳能电池的模拟与优化[J].*电子元件与材料*, 2015(6):23-27.
- [13] 薛俊明,麦耀华,赵颖,等.薄膜非晶硅/微晶硅叠层太阳能电池的研究[J].*太阳能学报*, 2005,26(2):166-169.
- [14] Niemegeers A, Burgelman M. Effects of the Au/CdTe Back Contact on IV and CV Characteristics of Au/CdTe/CdS/TCO Solar Cells[J]. *Journal of Applied Physics*, 1997,81(6):2881-2886.
- [15] Müller J, Rech B, Springer J, et al. TCO and Light Trapping in Silicon Thin Film Solar Cells[J]. *Solar Energy*, 2004,77(6):917-930.
- [16] 韩大星,王万录,张智.非晶硅电致发光机理及用电致发光谱研究太阳能电池本征层中的缺陷态能量分布[J].*物理学报*, 1999,48(8):1484-1490.
- [17] 金韦利,姜礼华.非晶硅薄膜太阳能电池应用分析[J].*节能*, 2010,29(3):21-24.
- [18] 赵雷,周春兰,李海玲,等. $\text{a-Si}(\text{n})/\text{c-Si}(\text{p})$ 异质结太阳电池薄膜硅背场的模拟优化[J].*物理学报*, 2008,57(5):3212-3218.