

温度对 a-Si:H/c-Si 异质结太阳能电池光伏特性的影响

曾喆方竹, 钟春良, 隆雪燕, 余宏伟, 杨迪武

(湖南工业大学 理学院, 湖南 株洲 412007)

摘要: 运用开路电压解析模型和 AMPS 模拟分析温度对 a-Si:H/c-Si 异质结太阳能电池性能的影响及其机理。随着温度 T 的升高, 热电压增大, 开路电压 V_{OC} 减小。当 $T < 270$ K 时, 填充因子 FF 迅速增加; 当 $T \geq 270$ K 时, FF 保持不变, a-Si:H/c-Si 异质结太阳能电池的转化效率在 $T = 270$ K 取得最佳值。低温工作时, 空穴输运受到价带补偿界面势垒的限制, $J-V$ 曲线出现 S-Shape 现象, 填充因子 FF 显著降低。

关键词: 太阳能电池; a-Si:H/c-Si 异质结; 温度; 转换效率

中图分类号: TM914

文献标志码: A

文章编号: 1673-9833(2018)02-0043-06

Effects of Temperature on the Photovoltaic Properties of a-Si:H/c-Si Heterojunction Solar Cells

ZENG Zhefangzhu, ZHONG Chunliang, LONG Xueyan, SHE Hongwei, YANG Diwu

(College of Science, Hunan University of Technology, Zhuzhou Hunan 412007, China)

Abstract: By using the open circuit voltage analytical model and AMPS, a simulation analysis has been made of the effects of temperature on the properties of a-Si:H/c-Si heterojunction solar cells and its mechanism. The increase of temperature T leads to an increase in the thermal voltage and a decrease in the open-circuit voltage. The fill factor FF increases drastically when $T < 270$ K while remains unchanged when $T \geq 270$ K, with the highest conversion efficiency of a-Si:H/c-Si heterojunction solar cells obtained when $T = 270$ K. When at work under a low temperature, the quantum transport is restricted by the barrier of valence band compensation interface, with S-Shape phenomenon occurring in $J-V$, thus significantly reducing the filling factor FF .

Keywords: solar cell; a-Si:H/c-Si heterojunction; temperature; conversion efficiency

1 研究背景

硅异质结太阳能电池采用宽带隙的半导体材料 a-Si:H (或 a-SiC:H) 作为窗口层, 单晶硅 (或多晶硅) 作为吸收层^[1-2], 它既利用了晶体硅生产技术成熟、

转换效率高的优点, 又发挥了薄膜制造沉积温度较低的工艺优势, 具有实现高效、低成本硅太阳能电池的发展前景。a-Si:H/c-Si 异质结太阳能电池由于其转化效率高 (23%) 和所有工艺可以在低温条件下完成的特点, 在光伏应用研究中引起了广泛的关注^[3-5]。

收稿日期: 2017-10-12

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (11374094), 湖南工业大学研究性学习和创新性实验计划基金资助项目 (201611535008), 湖南省自然科学基金资助项目 (2015JJ3060), 湖南省教育厅基金资助项目 (17C0470)

作者简介: 曾喆方竹 (1996-), 男, 湖北荆州人, 湖南工业大学学生, 主要研究方向为集成电路,
E-mail: 549454624@qq.com

通信作者: 钟春良 (1979-), 男, 湖南邵阳人, 湖南工业大学讲师, 博士, 主要从事硅基太阳能电池与大功率器件方面的教学与研究, E-mail: zhongcljust2007@163.com

温度是影响半导体器件性能的敏感参数,其高低会影响太阳能电池PN结的性能(如反向饱和电流),电池的性能随着温度的升高而下降,呈现负温度系数。 a-Si:H/c-Si 异质结太阳能电池的温度系数较传统的晶硅太阳能电池好^[6],即便在户外低温工作条件下,仍能表现出较好的输出特性。但 a-Si:H/c-Si 异质结与晶硅太阳能电池存在结构上的差别,其在界面处存在影响载流子的输运界面势垒,影响太阳能电池的性能^[4-5,7],因此工作温度对 a-Si:H/c-Si 异质结太阳能电池性能的影响有待研究。本文运用 AMPS 软件模拟分析温度对 a-Si:H/c-Si 异质结太阳能电池性能的影响以及低温工作时 $J-V$ 曲线出现 S-Shape 现象的机理。

2 理论研究

异质结是由两种不同的半导体材料组成的 PN 结。图 1 表示 $(\text{n}^+)\text{a-Si:H}$ 与 $(\text{p})\text{c-Si}$ 两种半导体材料异质结形成前后的热平衡能带图。

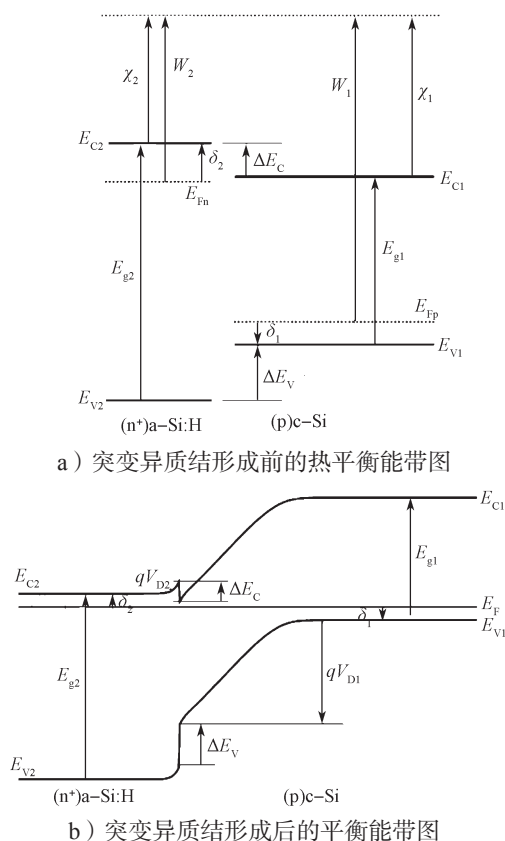


图 1 $(\text{n}^+)\text{a-Si:H}/(\text{p})\text{c-Si}$ 突变异质结形成前后的平衡能带图
Fig.1 Equilibrium energy band diagrams before and after $(\text{n}^+)\text{a-Si:H}/(\text{p})\text{c-Si}$ heterojunctions

图 1 中, $(\text{n}^+)\text{a-Si:H}$ 表示施主重掺杂的 a-Si:H , $(\text{p})\text{c-Si}$ 表示受主掺杂的晶体硅; E_{g1} 、 E_{g2} 分别为 c-Si 和 a-Si:H 的禁带宽度; δ_1 和 δ_2 为 c-Si 和 a-Si:H 的

激活能; W_1 、 W_2 分别为 c-Si 和 a-Si:H 的电子功函数,即真空电子能级与 c-Si 和 a-Si:H 的费米能级 E_{Fn} 、 E_{Fp} 的能量差; χ_1 、 χ_2 为真空电子能级与 c-Si 和 a-Si:H 的导带底 E_{C1} 、 E_{C2} 的能量差,即电子的亲合能; E_{V1} 、 E_{V2} 为 c-Si 和 a-Si:H 的价带顶。当这两块导电类型相反的半导体材料紧密接触形成异质结时,电子将从 $(\text{n}^+)\text{a-Si:H}$ 流向 $(\text{p})\text{c-Si}$, 同时空穴在与电子相反方向流动,直至两块半导体的费米能级相等时为止,即 $E_F = E_{Fn} = E_{Fp}$ 。热平衡状态时,在交界面的两边形成了空间电荷区,正、负空间电荷间产生电场,也称为内建电场。因为存在电场,所以电子在空间电荷区中各点有附加电势能,使空间电荷区中的能带发生了弯曲。由于没有形成异质结之前的 E_{Fn} 比 E_{Fp} 高,则能带总的弯曲量就是真空电子能级的弯曲量,即

$$qV_D = E_{Fn} - E_{Fp} = W_1 - W_2,$$

式中: q 为电子电荷;

V_D 为扩散电势,其中 V_{D1} 、 V_{D2} 为 c-Si 、 a-Si:H 一侧的扩散电势。

由图 1 所示,由两块半导体材料的交界面及其附近的能带可反映出两个特点:其一是能带发生了弯曲。 $(\text{n}^+)\text{a-Si:H}$ 的导带底和价带顶的弯曲量为 qV_{D2} ,而且导带底在交界面处形成一向上的“尖峰”。 $(\text{p})\text{c-Si}$ 的导带底和价带顶的弯曲量为 qV_{D1} ,而且导带底在交界面处形成一向下的“凹口”。其二,能带在交界面处不连续,有一个突变。两种半导体的导带底在交界面处的突变 ΔE_C 为

$$\Delta E_C = \chi_1 - \chi_2,$$

而价带顶的突变 ΔE_V 为

$$\Delta E_V = (E_{g2} - E_{g1}) - (\chi_1 - \chi_2),$$

ΔE_C 和 ΔE_V 分别为导带补偿和价带补偿。

将 a-Si:H/c-Si 异质结等效于一个单二极管模型。不考虑电池的串联电阻与并联电阻,当无光照、外加电压 V 时,电池的电流密度应为

$$J = J_0 [\exp(qV/nkT) - 1], \quad (1)$$

式中: J_0 为反向饱和电流密度;

n 为二极管理想因子;

k 为波尔兹曼常数 ($k = 1.380\,650\,5 \times 10^{-23} \text{ J/K}$);

T 为工作温度。

光照时总电流密度为

$$J = J_0 [\exp(qV/nkT) - 1] - J_R, \quad (2)$$

式中 J_R 为光生电流密度。

填充因子 FF 和太阳能电池效率 η 是太阳能电池的导出参数,计算如下:电池输出功率密度为 $PD = JV$; 当 $dPD/dV = 0$ 时,输出功率密度最大,得到最大功率密度点时的电压 V_m 和电流密度 J_m 。太阳能

电池的转换效率 η 是最大功率除以 AM 1.5 入射光能量密度 PD_j ($PD_j=100 \text{ mW/cm}^2$), 即

$$\eta = \frac{J_m \cdot V_m}{PD_j} \times 100\%。$$

太阳能电池的填充因子 FF 可表示为

$$FF = \frac{J_m \cdot V_m}{V_{oc} \cdot J_{sc}} \times 100\%。$$

式中: V_{oc} 为太阳能电池的开路电压;

J_{sc} 为太阳能电池的短路电流密度。

3 模拟方法

本研究运用 AMPS-1D 软件模拟分析结构为 TCO/10 nm(n^+)a-Si:H/300 μm (p)c-Si/Al 的太阳能电池。影响异质结太阳能电池光伏特性的关键问题是界面态。在模拟中, a-Si:H 定域态用 DOS 模式^[8-9], 由双 Guass 分布带隙态以及指数分布的 Urbach 带尾态组成。为了分析 a-Si:H/c-Si 异质结的界面问题, 在 c-Si 和 a-Si:H 之间引入一层非常薄的“界面层”(5 nm), 界面态为 $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}/\text{eV}$ 。模拟光照条件 AM 1.5 (100 mW/cm^2), 有效波段范围为 0.38~1.10 μm 。a-Si:H 和 c-Si 的模拟参数见表 1。

表 1 模拟中所用 a-Si:H 与 c-Si 的主要参数

Table 1 Main parameters of a-Si:H and c-Si included in the simulation

结构参数	c-Si	a-Si:H
厚度 /nm	3×10^5	10
介电常数	11.9	11.9
空穴亲和能 /eV	4.05	3.85
禁带宽度 E_g /eV	1.12	1.80
掺杂浓度 / cm^{-3}	1×10^{16}	1×10^{19}

器件的 J - V 特性以及各种参数是基于确定边界条件下求解 PN 结的 Poisson 方程和连续性方程而得到的。PN 结的 Poisson 方程为

$$\frac{d}{dx} \left[\epsilon(x) \frac{d\Psi(x)}{dx} \right] = q[p(x) - n(x) + N_D^+(x) - N_A^-(x) + p_t(x) - n_t(x)], \quad (3)$$

式中: x 为太阳能电池 c-Si 中某点到异质结界面的距离, 即深度;

$\Psi(x)$ 为电子的静电势;

$\epsilon(x)$ 为介电常数;

$n(x)$ 为自由电子浓度;

$p(x)$ 为自由空穴浓度;

$n_t(x)$ 为受陷电子浓度;

$p_t(x)$ 为受陷空穴浓度;

$N_A^-(x)$ 为电离受主浓度;

$N_D^+(x)$ 为电离施主浓度。

稳态时, 载流子浓度服从 Fermi-Dirac 统计分布, 则式 (3) 中各项可表示为

$$p(x) = N_{v1} F_{1/2} \left(\frac{E_v - E_F}{kT} \right),$$

$$n(x) = N_{c1} F_{1/2} \left(\frac{E_F - E_c}{kT} \right),$$

$$n_t(x) = \int_{E_{v1}}^{E_{c1}} g_A(E) f_A(E) dE,$$

$$p_t(x) = \int_{E_{v1}}^{E_{c1}} g_D(E) f_D(E) dE。$$

式中: N_{v1} 、 N_{c1} 分别为 c-Si 价带顶和导带底有效态密度;

$F_{1/2}$ 为费米积分;

$g_A(E)$ 为 E_{c1} 和 E_{v1} 之间类受主定域态的分布函数;

$g_D(E)$ 为 E_{c1} 和 E_{v1} 之间类施主定域态的分布函数;

$f_A(E)$ 为空穴占据能量为 E 的类受主定域态的概率;

$f_D(E)$ 为电子占据能量为 E 的类施主定域态的概率。

通过连续性方程计算器件在不同偏置电压时的电流输出可以得到器件的 J - V 特性。由电子输运理论可知, 电子和空穴电流密度为

$$J_n(x) = q\mu_n n(x) \frac{dE_{Fn}}{dx},$$

$$J_p(x) = q\mu_p p(x) \frac{dE_{Fp}}{dx}。$$

式中: E_{Fn} 、 E_{Fp} 分别为电子、空穴的准费米能级;

μ_n 、 μ_p 分别为电子、空穴的迁移率。

由连续性方程有

$$\frac{1}{q} \frac{dJ_n(x)}{dx} = -G_{op}(x) + R(x), \quad (4)$$

$$\frac{1}{q} \frac{dJ_p(x)}{dx} = G_{op}(x) - R(x)。 \quad (5)$$

式中: $G_{op}(x)$ 为光生载流子产生速率;

$R(x)$ 为载流子复合速率。

Poisson 方程 (3) 和连续性方程 (4) (5) 是相互关联的非线性微分方程组, 一般难于分析求解, 但是在确定的边界条件下可以通过数值计算求解出 $\Psi(x)$ 、 $n(x)$ 、 $p(x)$ 、 E_{Fn} 和 E_{Fp} , 由此可以求出器件的 J - V 特性、能带分布、界面复合效率, 进而得到其开路电压、短路电流、转换效率和填充因子。AMPS 将器件分成若干个计算单元, 并且保证每一界面处计算单元不大于 0.2 nm, 然后运用 Newton-Raphson 方法进行数值计算。

4 结果分析与讨论

(p⁺)a-Si:H/(n)c-Si 异质结太阳能电池的开路电压 V_{OC} 的解析模型为^[10]。

$$V_{OC} = E_{gl} - \delta_1 - \frac{kT}{q} \ln \frac{N_{V1}}{\Delta p \left(1 - \frac{S_n}{D_n/L_n + S_n} \right)} \quad (6)$$

式中: Δp 为光照开路时 c-Si 中性区的非平衡少数子浓度;

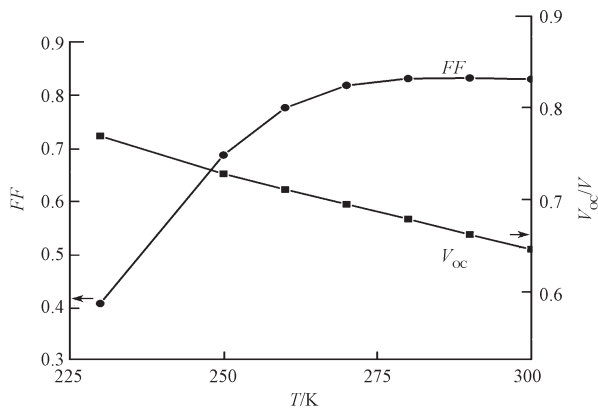
S_n 为 c-Si 界面有效复合速率, 下标 n 表示 n 型半导体或电子对应的参数;

D_n 为电子扩散系数;

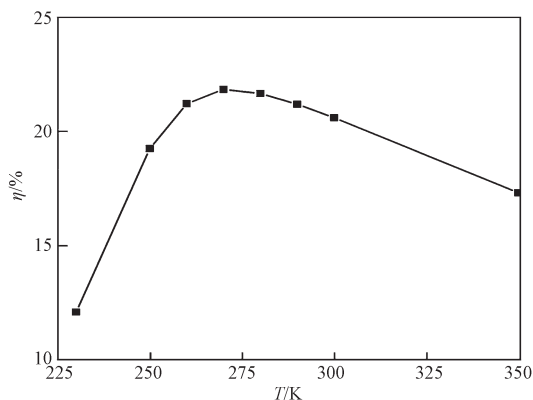
L_n 为电子扩散长度;

T 为工作温度。

由式(6)可知, 忽略温度对禁带宽度 E_{gl} 的影响, 随着温度 T 增大, 热电压增大, V_{OC} 减小。图2为 AMPS 模拟计算所得 (p⁺)a-Si:H/(n)c-Si 异质结太阳能电池的光伏性能随温度 T 的变化关系。



a) 开路电压与填充因子



b) 转换效率

图2 不同温度时 (p⁺)a-Si:H/(n)c-Si 太阳能电池的光伏特性曲线

Fig. 2 Effect curves of temperature on the photovoltaic properties of (p⁺) a-Si:H/(n) c-Si heterojunction solar cells

由图2可知, 随着工作温度 T 的增大, 开路电

压 V_{OC} 减小。在 $T > 250$ K 时, V_{OC} 随着温度 T 的增大而线性减小, 与 a-Si:H/c-Si 异质结太阳能电池的解析模型计算结果相一致; $T \leq 250$ K 时, V_{OC} 偏离线性关系。温度 T 由 230 K 升高至 270 K 时, 填充因子 FF 迅速增加, 在 $T \geq 270$ K 时保持不变。综合温度对 V_{OC} 与 FF 的影响, (p⁺)a-Si:H/(n)c-Si 异质结太阳能电池的转化效率在 $T=270$ K 时最佳。当 $T \geq 270$ K 时, a-Si:H/c-Si 异质结太阳能电池的转化效率呈线性下降, 温度系数为 $-0.28\%/C$, 与单晶硅太阳能电池的 $-0.5\%/C$ 的温度系数相比, 具有更稳定的温度特性。

下面分析填充因子 FF 随温度 T 下降而显著降低以及 $T \leq 250$ K 时 V_{OC} 偏离线性关系的机理。不同温度时 (p⁺)a-Si:H/(n)c-Si 异质结太阳能电池的 $J-V$ 曲线如图3所示。

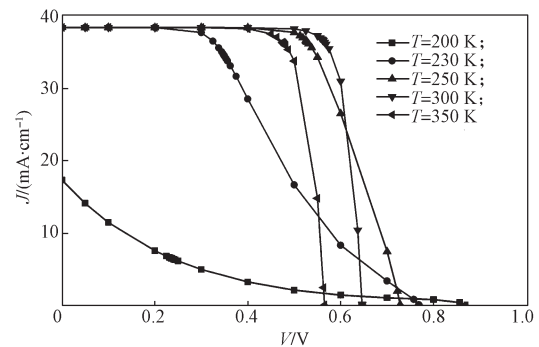


图3 不同温度时太阳能电池的 $J-V$ 曲线

Fig. 3 $J-V$ curves of solar cells under different temperatures

由图3可知, 在 $T \leq 250$ K 时, $J-V$ 曲线出现明显的 S-Shape 现象^[11]。光态 $J-V$ 曲线发生异常拐弯现象, 即 $J-V$ 曲线为非方形, 称之为 S-Shape 现象。而同质结太阳能电池中 $J-V$ 曲线没有出现 S-Shape 现象^[11]。同质结与异质结一个本质区别在于异质结界面存在能带不连续性, 即能带补偿, 异质结中载流子输运还受到能带突变量的影响。(p⁺)a-Si:H/(n)c-Si 异质结太阳能电池 c-Si 中的空穴相对同质结而言需要更多的 ΔE_v 能量才可越过界面。一般情况下, 空穴越过界面势垒 ΔE_v 形成的概率正比于 $\exp(-\Delta E_v/kT)$ 。低温时, c-Si 中空穴输运将受到界面势垒的限制, 在 c-Si 界面附近聚集。

图4为利用 AMPS-1D 软件模拟计算所得不同温度下热平衡和光照短路时 c-Si 中空穴的分布。对比 $T=300$ K 和 $T=230$ K 下光照短路和热平衡时 c-Si 界面附近空穴的浓度可以发现, $T=230$ K 时空穴在 c-Si 界面附近大量聚集, 该现象说明空穴输运受到界面势垒的限制。

为了保持电荷中性, a-Si:H 耗尽区的宽度增加,

c-Si 耗尽区的宽度减小。这将导致 a-Si:H 层电势降落显著增加, c-Si 耗尽区的电势降落显著减小。图 5 为 AMPS-1D 软件模拟计算所得不同温度下热平衡和光照短路时 (p^+) a-Si/(n)c-Si 异质结的能带图。

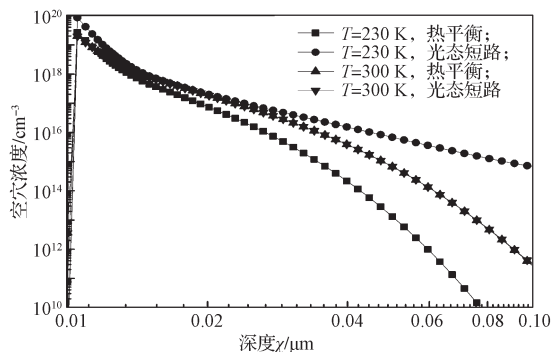


图 4 不同温度下热平衡与光照短路时空穴的分布

Fig. 4 Distribution of heat balance under different temperatures and cativation under various degrees of illumination

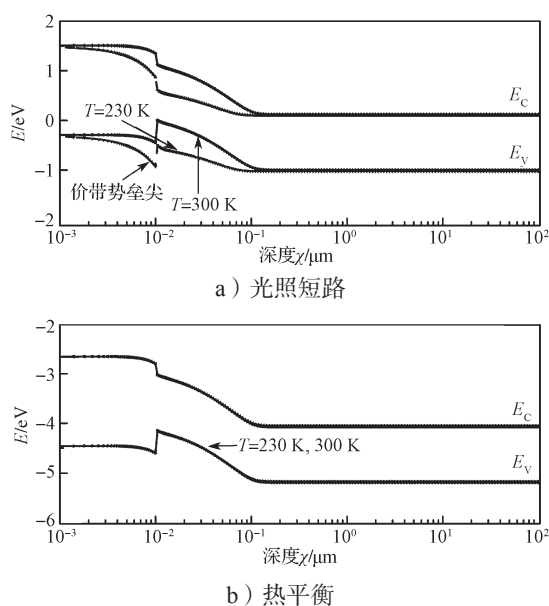


图 5 不同温度下热平衡与光照短路时能带图

Fig. 5 Energy band diagram of a-Si:H/c-Si heterojunctions at different temperatures and short circuit under different degrees of illumination

对比 $T=300\text{ K}$ 和 $T=230\text{ K}$ 时的能带图可以发现: $T=300\text{ K}$ 时, 光照短路时较热平衡时能带分布未发生改变; $T=230\text{ K}$ 时, c-Si 耗尽区的电势降落减小, c-Si 准中性区的价带顶略高于 a-Si:H 界面价带势垒尖, 这是导致空穴输运受到界面势垒限制的原因所在。低温时更多的空穴可以在 c-Si 界面及耗尽区与电子复合, c-Si 界面及耗尽区的复合速率显著增大。图 6 为 AMPS-1D 软件模拟计算所得不同温度下热平衡与光照短路时的能带图。

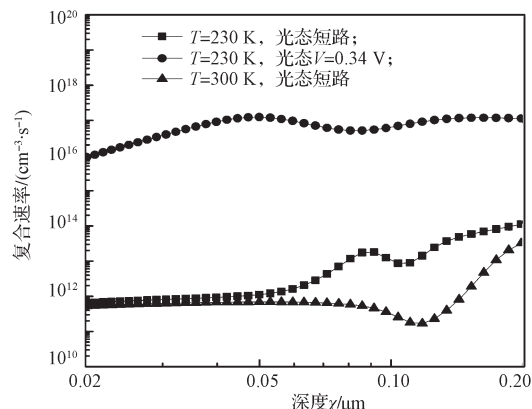


图 6 不同温度下 c-Si 界面及耗尽区的复合速率

Fig. 6 Recombination rate of c-Si interface and depletion region under different temperatures

如图 6 所示, 光电流的损失增大, 发生明显的 S-Shape 现象, 填充因子 FF 显著下降。随着温度的升高, 界面势垒的影响逐渐减小至消除, FF 逐渐增大至几乎不变。

c-Si 界面有效复合速率由少数浓度和界面态决定, 低温时有更多的空穴在 c-Si 界面聚集与电子复合, 界面有效复合速率增大。由上述分析可知, $T>250\text{ K}$ 时, 载流子输运不受界面势垒的影响。由式 (6) 可得, V_{oc} 随着温度 T 的增大而线性减小。随着温度的升高, 界面有效复合速率减小, 对 V_{oc} 有增大的作用, 但温度主要通过热电压来影响开路电压, 界面有效复合速度降低对开路电压的减小起到减缓作用, 使得开路电压与温度曲线在高温时相对于低温时的曲线向上翘。

5 结论

运用开路电压解析模型和 AMPS 模拟分析了温度对 a-Si:H/c-Si 异质结太阳能电池性能的影响可得如下结论:

1) 随着温度的升高, 热电压减小, 开路电压减小。当温度 T 由 230 K 升高至 270 K 时, 填充因子 FF 迅速增加, 在 $T \geq 270\text{ K}$ 时保持不变, a-Si:H/c-Si 异质结太阳能电池的转化效率在 $T=270\text{ K}$ 时最佳。 $T>270\text{ K}$ 时, 随着 T 增大, 转化效率呈线性下降, 温度系数为 $-0.28\%/K$, 比单晶硅电池相具有更稳定的温度特性。

2) 低温工作时, 空穴输运受到价带补偿界面势垒的限制, $J-V$ 曲线出现 S-Shape 现象, 填充因子 FF 显著降低。随着温度的升高, 界面有效复合速率减小, 使得开路电压与温度曲线在高温时相对于低温时的曲线向上翘。

参考文献:

- [1] BARRIO R, GANDIA J J, CARABE J, et al. Surface Recombination Analysis in Silicon-Heterojunction Solar Cells[J]. *Solar Energy Material & Solar Cells*, 2010, 94(2): 282–286.
- [2] HAMASHITA D, MIYAJIMA S, KONAGAI M. Preparation of Al-Doped Hydrogenated Nanocrystalline Cubic Silicon Carbide by VHF-PECVD for Heterojunction Emitter of N-Type Crystalline Silicon Solar Cells[J]. *Solar Energy Material & Solar Cells*, 2012, 107: 46–50.
- [3] MUÑOZ D, VOZ C, MARTIN I, et al. Low Temperature Back-Surface-Field Contacts Deposited by Hot-Wire CVD for Heterojunction Solar Cells[J]. *Thin Solid Films*, 2008, 516(20): 6782–6785.
- [4] TANAKA Y, MATSUKI N, FUJIWARA H. Characterization of a-Si:H Thin Layers Incorporated into Textured a-Si:H/c-Si Solar Cell Structures by Spectroscopic Ellipsometry Using a Tilt-Angle Optical Configuration[J]. *Thin Solid Films*, 2014, 569: 64–69.
- [5] TSUNOMURA Y, YOSHININE Y, TAGUCHI M, et al. Twenty-Two Percent Efficiency HIT Solar Cell[J]. *Solar Energy Material & Solar Cells*, 2009, 93(6/7): 670–673.
- [6] SINGH S, KUMAR S, DWIVEDI N. Band Gap Optimization of P-I-n Layers of a-Si:H by Computer Aided Simulation for Development of Efficient Solar Cell[J]. *Solar Energy*, 2012, 86(5): 1470–1476.
- [7] 苏波, 钟春良, 罗兰娥. CrAlN/TiAlN 纳米多层膜的微结构及其性能研究[J]. *湖南工业大学学报*, 2013, 27(5): 13–17.
- SU Bo, ZHONG Chunliang, LUO Lan'e. Study on Microstructure and Properties of CrAlN/TiAlN Nanostructured Multilayers[J]. *Journal of Hunan University of Technology*, 2013, 27(5): 13–17.
- [8] ZHONG Chunliang, YAO Ruohu, GENG Kuiwei. An Improvement of the Capacitance-Voltage Method to Determine the Band Offsets in a-Si:H/c-Si Heterojunctions[J]. *IEEE Transaction on Electron Devices*, 2014, 61(2): 394–399.
- [9] ZHONG Chunliang, GENG Kuiwei, LUO Lan'e, et al. An Analytical Model to Explore Open-Circuit Voltage of a-Si:H/c-Si Heterojunction Solar Cells[J]. *Journal of Central South University of Technology*, 2016, 23(3): 598–603.
- [10] ZHONG C L, LUO L E, TAN H S, et al. Band Gap Optimization of the Window Layer in Silicon Heterojunction Solar Cells[J]. *Solar Energy*, 2014, 108: 570–575.
- [11] ZHONG C L, GENG K W, YAO R H. S-Shaped $J-V$ Characteristics of a-Si:H/c-Si Heterojunction Solar Cells[J]. *Acta Physica Sinica*, 2010, 59(9): 6538–6544.

(责任编辑: 申剑)