

РАСЧЕТ ОПТИМАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ ФОТОПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯ (p)-a-Si:H/(n)-c-Si С ПОМОЩЬЮ АНАЛИТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Введение

Производство электрической энергии с помощью фотоэлектрических преобразователей переживает период стремительного роста во многих странах мира. Солнечные электростанции, используя неисчерпаемую и экологически чистую энергию непосредственно, являются важной альтернативой традиционным способам энергообеспечения. В этих условиях на первый план выходит повышение эффективности солнечных фотопреобразователей, снижение удельного расхода материалов и, в конечном итоге, уменьшение стоимости единицы произведенной электроэнергии.

Экспериментальные исследования в этой области должны основываться на предварительных численных или аналитических расчетах на базе адекватных математических моделей. Математическое моделирование является необходимым этапом в проектировании и разработке электронных устройств, что позволяет получить оптимальную конструкцию прибора и спрогнозировать его дальнейшую модернизацию по улучшению важнейших характеристик и параметров.

В настоящее время в производстве солнечных элементов используют гетеропереходы на основе кристаллического кремния (c-Si) и гидрогенизированного аморфного кремния (a-Si :H), теллурида кадмия (CdTe), диселенида индия (CuInSe_2 – CIS), диселенида галлия (CuGaSe_2 – CGS), а также твердых растворов $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ – CIGS и др. Разнообразие материалов и структур солнечных элементов подтверждает актуальность разработки эффективных численных и аналитических моделей таких фотопреобразователей.

1. Конфигурация фотопреобразователя и выбор математической модели

Исследуемый фотопреобразователь выполнен на основе нескольких слоев и переходов между ними (рис. 1). Приведенная структура используется в солнечном фотопреобразователе, разработанном фирмой SANYO [1].

Структура, приведенная на рис. 1, имеет несколько гетеропереходов, но основным функциональным элементом является переход (p) a-Si: H – (i) a-Si: H – (n) c-Si (резкий анизотипный гетеропереход), моделирование которого будет рассмотрено в данной работе.

Первые изотипные и анизотипные гетеропереходы были изготовлены Андерсоном в 1960 году. Он также впервые предложил подробную модель структуры энергетических зон вблизи границы раздела двух полупроводников различных типов [2].

Позже несколько моделей гетеропереходов были предложены разными учеными, но в отличие от модели Шокли для обычного p-p-перехода ни одна из них не может с достаточной степенью достоверности объяснить все физические явления, которые имеют место в реальном контакте двух различных полупроводников.

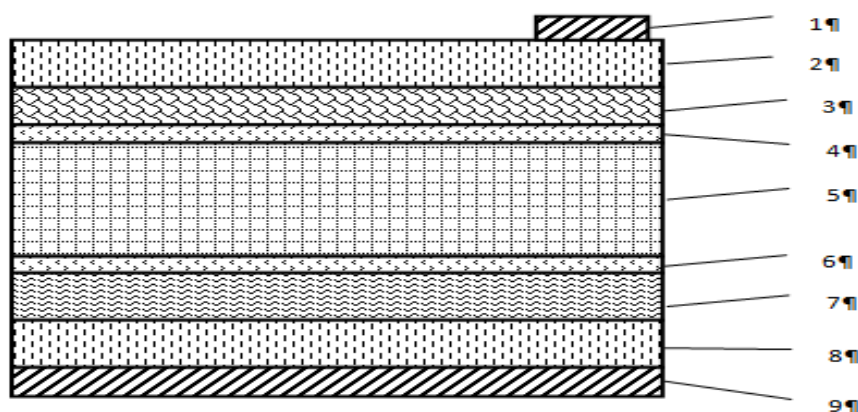
Наиболее важные из этих моделей рассмотрены в монографии Шармы и Пурохит [3]. Согласно анализу авторов для описания основных характеристик и структуры энергетических зон резких анизотипных гетеропереходов предлагаются следующие физические модели:

- диффузионная модель Андерсона;
- эмиссионная модель Перлмана и Фойхт;
- эмиссионно-рекомбинационная модель Долего;
- туннельная модель Редайкера, Стопека и Уорда;
- туннельно-рекомбинационная модель Райбен и Фойхт.

Многочисленные экспериментальные исследования, проведенные позже на основе достижений в технологии формирования высококачественных многослойных полупроводнико-

вых структур, а также технологий измерения их характеристик и параметров, позволили более тщательно подойти к моделированию указанных гетеропереходов. Анализ приведенных моделей токопереноса, выполненный Доннелли, Милнсом, а также Андерсоном, позволяет сделать следующие выводы:

- ни одна из приведенных моделей самостоятельно не может адекватно описать механизм токопереноса на всем интервале изменения внешнего напряжения на гетеропереходе;
- тип используемой модели для конкретной структуры гетероперехода необходимо выбирать, учитывая экспериментальные исследования, поскольку вид вольтамперной характеристики (ВАХ) гетероперехода существенно зависит от использованных материалов, качества контакта, режима работы (в частности, размера внешнего напряжения);
- для большинства исследуемых гетеропереходов структура энергетических зон и ВАХ удовлетворительно описываются модифицированной моделью Андерсона.



1 – фронтальный контакт, 2 – слой ITO, 3 – слой (p) a-Si: H, 4 – слой (i) a-Si: H, 5 – слой (n) c-Si, 6 – слой (i) a-Si: H, 7 – слой (n) a-Si: H, 8 – ITO, 9 – тыльный контакт

Рис.1. Структура солнечного фотопреобразователя

За последние годы был разработан ряд компьютерных моделей гетеропереходов [1], использующих численное решение уравнения Пуассона, учет различных конструктивных и технологических факторов. Однако численные модели более трудоемки при реализации, требуют тщательного анализа условий применимости и адекватного описания граничных условий. Учитывая приведенное, для моделирования основного функционального гетероперехода структуры была выбрана аналитическая модель Андерсона.

Таким образом, имеем n-p гетеропереход (n) c-Si/ (p) a-Si: H в качестве рабочей модели (на первом этапе слой (i) a-Si: H не учитываем), что позволяет использовать модель Андерсона [3]. Параметры, относящиеся к слою (n) c-Si, будем обозначать индексом 1, параметры, которые относятся к слою (p) a-Si: H, – индексом 2.

С целью конкретизации расчетных соотношений необходимо определить значения работы выхода слоев 1 и 2 (W_{e1} и W_{e2}), контактной разности потенциалов $\Delta\phi$, высоты «пичка» ΔW_v руководствуясь соотношениями (расчеты выполняем для температуры 300 K):

$$W_{e1} = \chi_1 + W_{F1} \quad (1)$$

$$W_{e2} = \chi_2 + W_{g2} - W_{F2} \quad (2)$$

$$\Delta\phi = W_{e2} - W_{e1} \quad (3)$$

$$\Delta W_v = \chi_2 + W_{g2} - \chi_1 - W_{g1} \quad (4)$$

где $W_{F1} = kT \ln(N_{c1}/N_{d1})$ – положение уровня Ферми относительно дна зоны проводимости слоя 1;

$W_{F2} = kT \ln(N_{v2}/N_{a2})$ – положение уровня Ферми относительно потолка валентной зоны слоя 2;

$N_{c1} = 2(2\pi m_{c1} kT/h^2)^{1,5}$ – эффективная плотность квантовых состояний в зоне проводимости слоя 1;

$N_{v2} = 2(2\pi m_{v2} kT/h^2)^{1,5}$ – эффективная плотность квантовых состояний в валентной зоне слоя 2;

m_{c1} – эффективная масса электронов в зоне проводимости слоя 1;

m_{v2} – эффективная масса дырок в валентной зоне слоя 2;

h – постоянная Планка.

Основные параметры моделируемого гетероперехода приведены в таблице.

Ширина запрещенной зоны W_{g1} , эВ	1,12
Ширина запрещенной зоны W_{g2} , эВ	1,72
Концентрация примеси N_{d1} , см ⁻³	$1,5 \cdot 10^{16}$
Концентрация примеси N_{a2} , см ⁻³	$7,5 \cdot 10^{19}$
Электронное сродство χ_1 , эВ	4,05
Электронное сродство χ_2 , эВ	3,9
Подвижность электронов μ_{e1} , см ² /В*с	1500
Подвижность электронов μ_{e2} , см ² /В*с	25
Подвижность дырок μ_{p1} , см ² /В*с	500
Подвижность дырок μ_{p2} , см ² /В*с	5
Энергетический уровень акцепторов W_{a2} , эВ	0,045
Энергетический уровень доноров W_{d1} , эВ	0,049
Относительная диэлектрическая проницаемость ϵ_1	11,9
Относительная диэлектрическая проницаемость ϵ_2	11,9
Толщина слоя полупроводника d_1 , мкм	10...300
Толщина слоя полупроводника d_2 , нм	10...10000
Квантовая эффективность a_1	0,3
Квантовая эффективность a_2	0,3
Коэффициент поглощения α_1	10000
Коэффициент поглощения α_2	100000
Коэффициент диффузии неосновных носителей D_1 , м ² /с	$1,3 \cdot 10^{-3}$
Коэффициент диффузии неосновных носителей D_2 , м ² /с	$6,5 \cdot 10^{-5}$
Диффузионная длина неосновных носителей L_1	$5,1 \cdot 10^{-4}$
Диффузионная длина неосновных носителей L_2	$11,4 \cdot 10^{-6}$
Продолжительность жизни неосновных носителей τ_1	$2 \cdot 10^{-4}$
Продолжительность жизни неосновных носителей τ_2	$2 \cdot 10^{-6}$

Неуказанные параметры функциональных слоев гетероперехода взяты из работ [1, 4].

Значения коэффициентов поглощения слоев на данном этапе расчета взяты усредненными по спектральному диапазону.

Расчеты по формулам (1) – (4) дают следующие значения: $N_{c1} = 2,84 \cdot 10^{19}$ см⁻³, $N_{v2} = 1,0 \cdot 10^{20}$ см⁻³, $W_{F1} = -0,19$ эВ, $W_{F2} = 0,007$ эВ, $W_{e1} = 4,24$ эВ, $W_{e2} = 5,613$ эВ, $\Delta\phi = 1,373$ эВ, $\Delta W_v = 0,45$ эВ.

Оценка размера изгиба профиля энергетических зон со стороны слоя 1 вблизи гетероперехода ΔW_{D1} , учитывая соотношение N_{d1}/N_{a2} (степень легирования слоя 1 меньше на 3 порядка), дает значение, которое примерно равно 1,3 эВ. С учетом полученных значений W_{e1} , W_{e2} , $\Delta\phi$ и выполнения следующих условий: $\chi_1 > \chi_2$, $W_{e1} < W_{e2}$, $\chi_1 + W_{g1} < \chi_2 + W_{g2}$, $\Delta W_{D1} > \Delta W_v$, выбираем вариант IIIa типа профиля гетероперехода согласно [3, табл. 2.1].

Основные соотношения для расчета электрических характеристик аналогичного гетероперехода приведены в работе [5].

Равновесный профиль энергетических зон избранного гетероперехода приведен на рис.3.

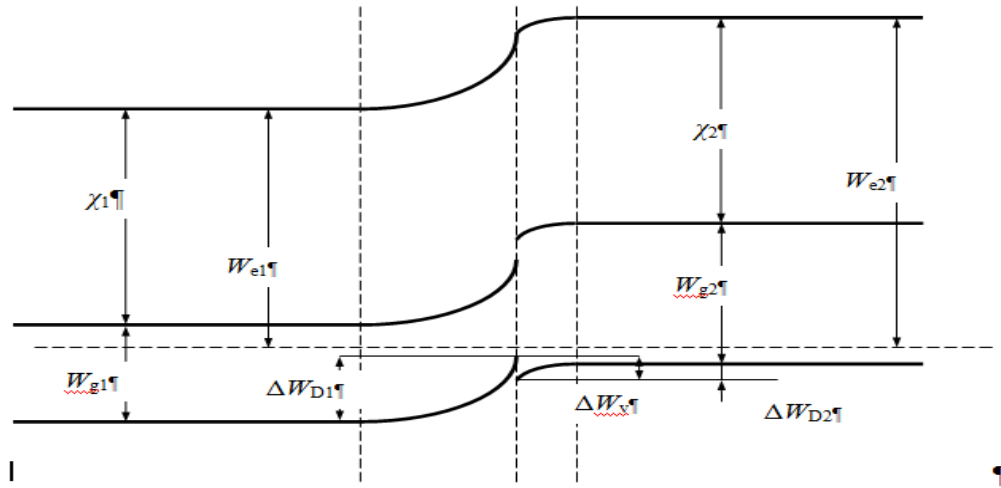


Рис. 2. Равновесный профиль энергетических зон гетероперехода

2. Расчетные соотношения для токовых характеристик

Плотность тока указанного гетероперехода J имеет две составляющие:

$$J = J_V + J_\Phi, \quad (5)$$

где J_V – ток гетероперехода за счет внешнего напряжения; J_Φ – фототок.

Первая составляющая соотношения (5) определяется уравнением

$$J_V = A_0 e^{-\frac{(\Delta W_D - \Delta W_V)}{kT}} \cdot \frac{qV}{e^{kT} - 1}, \quad (6)$$

где $A_0 = qXN_{a2}(D_{p1}/\tau_{p1})^{1/2}$; $\Delta W_D = \Delta W_{D1} + \Delta W_{D2}$; V – внешнее напряжение на гетероперехода.

Вторая составляющая соотношения (5) обусловлена падающим излучением и, учитывая направление облучения указанного гетероперехода, согласно выбранному варианту профиля гетероперехода определяется следующим образом:

$$J_\Phi = J_{\Phi 1} + J_{\Phi 2}, \quad (7)$$

$$J_{\Phi 1} = a_1 q \Phi_0 e^{-\alpha_2 d_2} \cdot (1 - e^{-\alpha_1 l_1} + \frac{\alpha_1 L_1}{1 - (\alpha_1 L_1)^2} \cdot A_1), \quad (8)$$

$$J_{\Phi 2} = a_2 q \Phi_0 e^{-\alpha_2 d_2} \cdot (e^{\alpha_2 l_2} - 1 + \frac{\alpha_2 L_2}{1 - (\alpha_2 L_2)^2} \cdot A_2), \quad (9)$$

$$A_1 = ((\frac{C_1}{C_2} - \alpha_1 L_1) \cdot e^{-\alpha_1 l_1} + \frac{(\alpha_1 L_1 - \frac{S_1 L_1}{D_1})}{C_2} \cdot e^{-\alpha_1 d_1}), \quad (10)$$

$$A_2 = ((\frac{C_3}{C_4} + \alpha_2 L_2) \cdot e^{\alpha_2 l_2} - \frac{(\alpha_2 L_2 + \frac{S_2 L_2}{D_2})}{C_4} \cdot e^{\alpha_2 d_2}). \quad (11)$$

Выражения для $C_1 - C_4$, l_1 , l_2 приведены в [5].

Приведенные расчетные соотношения разработаны для перехода (p)-a-Si:H/(n)-c-Si, однако могут быть использованы и для ряда других конфигураций и материалов гетероструктуры, удовлетворяющих требованиям данного варианта модели.

3. Результаты расчетов основных характеристик

Результаты расчетов с использованием разработанной модели приведены ниже. На рис. 3 представлены расчетная (JVR2) и экспериментальная (VY) ВАХ гетероперехода. Экспериментальные результаты взяты для аналогичной конфигурации гетероперехода из [6]. Сравнение показывает удовлетворительное совпадение кривых. Расхождение в значениях U_{xx} , по-видимому, обусловлено отличием некоторых параметров материала гетероперехода в [6] и в расчетной модели. На рис. 4 приведены зависимости фототока и напряжения холостого хода исследуемого гетероперехода при изменении толщины слоя c-Si. Кривые имеют максимум при толщине слоя c-Si 200 – 300 мкм. Изменение толщины a-Si в пределах 30 – 3000 нм при толщине слоя c-Si равной 300 мкм практически не влияет на общий фототок (рис. 4), при достижении значения примерно 5000 нм начинается резкий спад фототока, причем преобладающую роль в фотогенерации начинает играть слой a-Si (с толщины примерно 8000 нм).

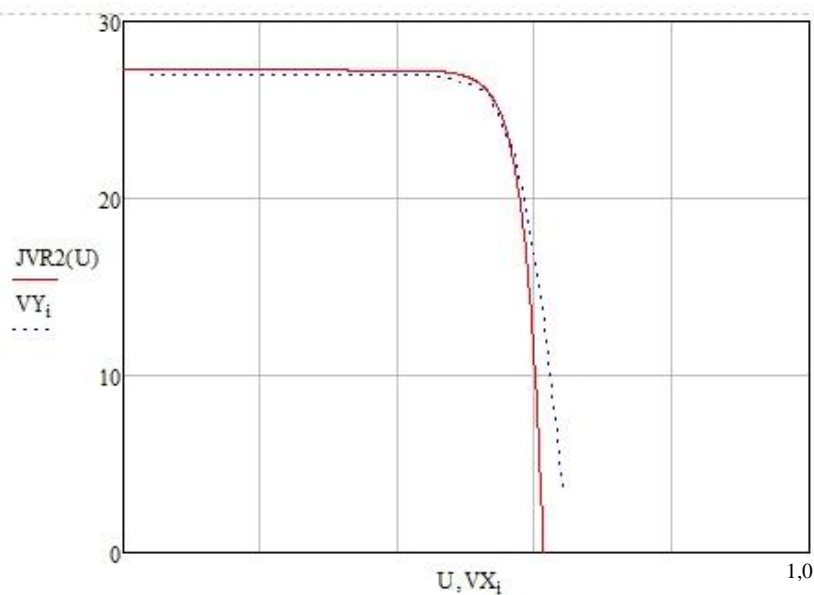


Рис.3. ВАХ гетероперехода (n) c-Si (p) a-Si: H

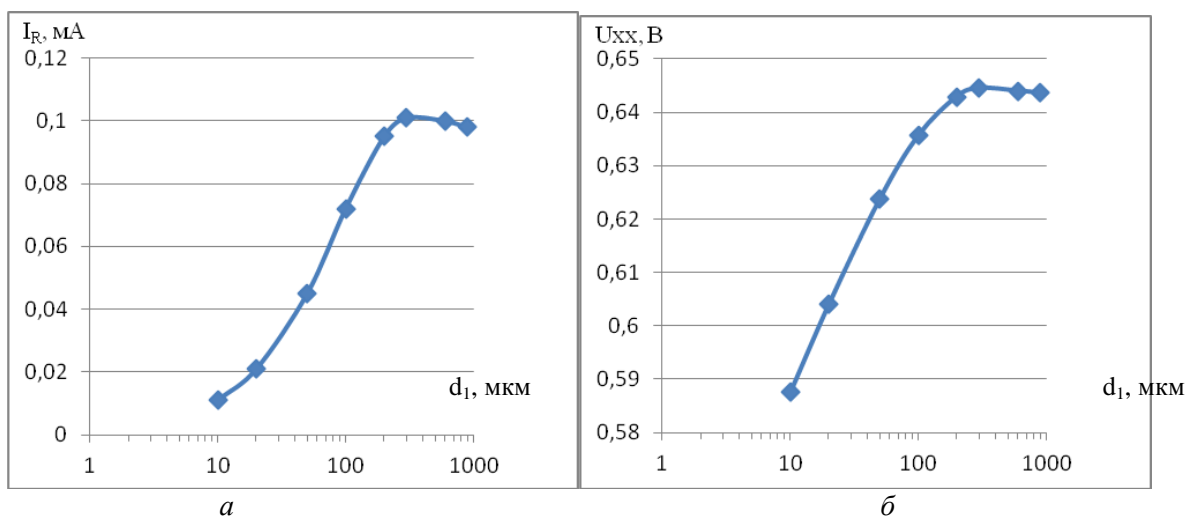


Рис. 4. Зависимость фототока (а) и значения U_{xx} (б) гетероперехода (n) c-Si (p) a-Si: H от толщины слоя c-Si

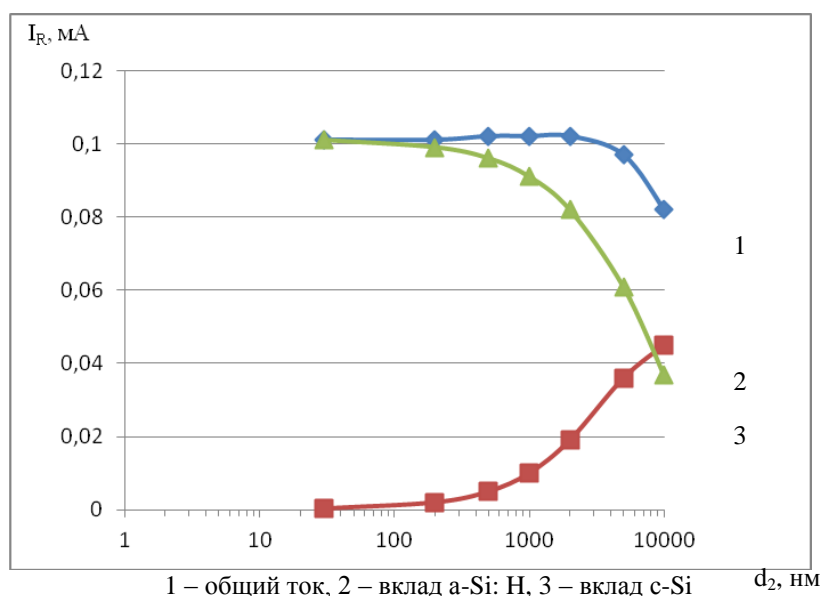


Рис. 5. Зависимость составляющих фототока гетероперехода (n) c-Si (p) a-Si: H от толщины слоя a-Si

4. Выводы

На основании приведенных расчетов можно заключить:

- используемая модель адекватно описывает ВАХ и основные свойства гетероперехода (n) c-Si (p) a-Si: H;
- модель может быть использована для предварительных расчетов фотопреобразователей на основе гетеропереходов из различных материалов;
- для заданных исходных параметров материала слоев оптимальным является толщина слоя 1 (c-Si) примерно 300 мкм (рис. 4). При меньшей толщине не обеспечивается полное поглощение излучения, при большей – возрастают потери носителей за счет рекомбинации. Рассчитанное оптимальное значение данного размера подтверждает и выбранная в [1] конфигурация гетероперехода;
- изменение толщины слоя 2 (a-Si: H) в пределах 30 – 3000 нм практически не влияет на фототок (при толщине слоя 1 порядка 300 мкм), однако при достижении значения 5000 нм фототок начинает быстро уменьшаться, при этом вклад слоя c-Si уменьшается быстрее, чем нарастание фототока за счет слоя a-Si: H.

Список литературы: 1. Datta A., Chatterjee P. Computer Modeling of Heterojunction with Intrinsic Thin Layer “HIT” Solar Cells: Sensitivity Issues and Insights Gained . Solar Cells .Thin-Film Technologies. Edited by Prof. Leonid A. Kosyachenko InTech, 2011. – P.275 – 302. 2. Anderson R.L. Solid State Electron. – 1962. – №5. – С.341. 3. Шарма Б.Л., Пурохит Р.К. Полупроводниковые гетеропереходы ; пер. с англ. ; под ред. Ю.В.Гуляева. – М. : Сов. радио, 1979. – 232 с. 4. Справочник по электротехническим материалам ; под ред. Ю.В.Корицкого, В.В.Пасынкова, Б.М.Тареева Т.3. – Л. : Энергоатомиздат. Ленингр. отд-ние, 1988. – 728 с. 5. Галат А.Б. Аналитическая модель гетероперехода a-Si:h/c-Si солнечного элемента // 6-я Междунар. науч. конф. «Функциональная база нанoeлектроники». Сб. науч. тр. Харьков : ХНУРЭ, 2013. – С.241 – 244. 6. Николаев Ю.А. и др. Фотоэлектрические явления в солнечных элементах ZNO(ITO)/a-Si:H(n)/c-Si(p)/Al // Физика и техника полупроводников. – 2002. – Т. 36. Вып. 9. – С.1128 – 1132.

Харьковский национальный
университет радиоэлектроники

Поступила в редколлегию 21.01.2015