

InGaN 太阳能电池转换效率的理论计算*

文 博 周建军 江若珺[†] 谢自力 陈敦军 姬小利 韩 平 张 荣 郑有料

(南京大学物理系, 江苏省光电信息功能材料重点实验室, 南京 210093)

摘要: 根据 pn 结太阳能电池的电流-电压方程, 计算了在理想情况下, InGaN 材料应用于单结、双结和三结太阳能电池时, 其转换效率可分别高达 27.3%、36.6% 和 41.3%, 均高于通常半导体材料太阳能电池。同时, 计算还得到了 3 种 InGaN 太阳能电池的最佳带隙宽度及相应的 In 组分, 为设计 InGaN 太阳能电池提供了理论依据。

关键词: InGaN; 太阳能电池; 转换效率; 理论计算

PACC: 8630J; 7340L; 7865K

中图分类号: TN366

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2007)09-1392-04

1 引言

随着全球范围的能源危机和生态环境问题的日益恶化, 人们对太阳能这种取之不尽用之不竭的绿色能源越来越重视, 长期以来, 人们在孜孜不倦地寻找高转换效率的材料。近年来, 第三代半导体材料 GaN 及 AlGaIn, InGaIn 为代表的 III 族氮化物是人们研究的热点, 它主要应用于光电器件和高温、高频、大功率器件。2002 年的研究表明, InN 的禁带宽度为 0.7eV^[1,2], 而不是之前报道的 1.89eV^[3]。这就意味着通过调节 In_xGa_{1-x}N 三元合金的 In 组分, 可使其禁带宽度从 3.4eV (GaN) 到 0.7eV (InN) 连续可调, 其对应的吸收光谱的波长从紫外部分 (365nm) 可以一直延伸到近红外部分 (1770nm), 几乎完整地覆盖了整个太阳光谱, 因此 InGaIn 在太阳能电池中的应用引起了人们密切的关注。

除了波长范围与太阳光谱匹配良好外, InGaIn 和常规的 Si, GaAs 基等太阳能电池材料相比, 还有许多优点。第一, 它是直接带隙材料, 其吸收系数比 Si, GaAs 高一、两个数量级。这就意味着 InGaIn 太阳能电池可以做的更薄、更轻, 从而节约成本。特别是应用于航天的太阳能电池, 减轻重量非常重要。第二, InN 和 GaN 的电子迁移率都较高^[4], 有利于减小复合, 而提高太阳能电池的短路电流。第三, InGaIn 的抗辐射能力比 Si, GaAs 等太阳能电池材料强, 更适合应用于强辐射环境。实验证明, GaAs/Ge 太阳能电池在 2×10^{12} MeV/g 的质子轰击后, 其最大功率降低了

90%, 而 InGaIn 在高速粒子轰击后, 光学、电学特性的退化不明显^[5]。第四, In_xGa_{1-x}N 特别适合制作多结串联太阳能电池。由于调节 In 组分可连续改变 In_xGa_{1-x}N 的带隙宽度, 因此在同一生长设备中, 通过改变 In 组分就可生长成多结 In_xGa_{1-x}N 太阳能电池结构, 比目前用几种不同的半导体材料制备多结太阳能电池方便了许多。并且由于 In 组分连续可调, 能够达到设计的理想禁带宽度组合, 而易获得更高的转换效率。但是, 由于高 In 组分的高质量 InGaIn 薄膜的生长技术还有许多难点, 目前尚未见到国内外成功制备 InGaIn 太阳能电池的文献报道。在研制 InGaIn 太阳能电池之前, 对 InGaIn 太阳能电池进行合理计算, 有利于器件的优化设计。太阳能电池的最重要性能参数是转换效率, 目前相关计算的文献报道还非常少, Hamzaoui 等人^[6]对 2 结到 6 结 In_xGa_{1-x}N 串联太阳能电池结构进行了模拟计算, 得出它们的转换效率和相应的 In_xGa_{1-x}N 材料带隙, 文献中对太阳能电池的模拟包含了较多的 In_xGa_{1-x}N 材料和结构因素对太阳能电池的影响, 实际上, 目前 In_xGa_{1-x}N 材料特别是高 In 组分 In_xGa_{1-x}N 材料生长还不成熟, 因此本文更偏重于从原理上进行模拟计算。

本文根据 pn 结型太阳能电池的电流-电压方程, 计算了理想单结、双结、三结 InGaIn 太阳能电池的最大转换效率, 以及获得此转换效率时的各结材料的最佳禁带宽度和对应的 In 组分, 并对理论转换效率高于通常 Si, GaAs 基等材料太阳能电池的原因做了简要分析。

* 国家重点基础研究发展规划 (批准号: 2006CB6049), 国家自然科学基金 (批准号: 60476030) 和江苏省自然科学基金 (批准号: BK2006126) 资助项目

[†] 通信作者, Email: rljiang@jionline.com

2007-02-04 收到, 2007-04-04 定稿

2 理论模型

InGaN p-n 结型太阳电池满足理想 pn 结的电流-电压(肖克莱)方程^[7]. 在计算过程中做了以下假设:(1)太阳电池结构是理想的 pn 结;(2)太阳电池表面有良好的减反射膜,因此光的反射忽略不计;(3)太阳电池的各结只吸收能量等于或大于该结禁带宽度的光子;(4)能量等于或大于材料禁带宽度的每个光子只激发一对电子-空穴对;(5)不考虑光生载流子的各种损耗,全部扫出外电路;(6)在对多结串联太阳电池进行模拟时,太阳电池的短路电流密度取各结电池短路电流密度的最小值,太阳电池的开路电压为各结电池开路电压的和;(7)计算所用的太阳光谱为标准的 AM1.5 谱,数据来源于美国国家可再生能源实验室的官方网站,用的是 American Society for Testing and Materials (ASTM)于 2004 年最新测量得到的 ASTM G173-03^[8].

太阳电池转换效率 η 的定义式为:

$$\eta \equiv \frac{P_m}{P_i} = \frac{J_m V_m}{P_i} = \frac{FF V_{oc} J_{sc}}{P_i} \quad (1)$$

式中 P_m 为太阳电池单位面积的最大输出功率; J_m 和 V_m 为此时的最大电流和最大电压; P_i 为投射到电池表面单位面积的太阳光功率;FF, V_{oc} 和 J_{sc} 分别为太阳电池的填充因子、开路电压和短路电流密度. 从此式可知,要求得 P_m , 就要从 pn 结电流-电压方程出发求得最大输出功率时的 J_m 和 V_m . 有光照时的电流-电压方程为:

$$J = J_{sc} - J_0 (e^{V/V_c} - 1) \quad (2)$$

其中 $V_c = kT/q$ 为室温下的热电压,其值为 0.026V; J_0 为反向饱和电流密度,为:

$$J_0 = qN_c N_v \left(\frac{D_n}{N_A L_n} + \frac{D_p}{N_D L_p} \right) \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right) \quad (3)$$

式中 N_c 和 N_v 分别为导带和价带的态密度; N_A 和 N_D 分别为 p 区和 n 区的掺杂浓度; D_n 和 D_p 分别为电子和空穴的扩散系数; L_n 和 L_p 分别是电子和空穴的扩散长度.

开路时,有 $J = 0$,由(2)式可得此时的电压即开路电压 V_{oc} 的表达式为:

$$V_{oc} = V_c \ln(J_{sc}/J_0 + 1) \quad (4)$$

当 $J = 0$ 时,由(2)式可得光照时短路电流密度 J_{sc} 为:

$$J_{sc} = J_0 \exp(V_{oc}/V_c) - J_0 \quad (5)$$

短路电流密度 J_{sc} 即为光生电流密度,当光照在太阳

电池上时,根据朗伯定律,距电池表面深度为 x 处的光子数满足:

$$Q(\lambda, x) = Q_s(\lambda) \exp(-\alpha(\lambda)x) \quad (6)$$

其中 Q_s 为在此辐射下单位时间、单位面积里能量等于和大于 E_g 的光子数目; α 为材料的吸收系数,它是波长 λ 的函数. 而光子数随深度变化率的负值就是电子-空穴对的产生率,即:

$$G(\lambda, x) = -dQ(\lambda, x)/dx = Q_s(\lambda)\alpha(\lambda)\exp(-\alpha(\lambda)x) \quad (7)$$

假设吸收层的厚度为 d ,那么这个 pn 结中产生的电子-空穴对总数为:

$$N = \int_0^d Q_s(\lambda)\alpha(\lambda) \int_0^d \exp(-\alpha(\lambda)x) dx d\lambda = \int_0^d Q_s(\lambda)[1 - \exp(-\alpha(\lambda)d)] d\lambda \quad (8)$$

则 pn 结产生的光生电流密度为:

$$J_{sc} = q \int_0^d Q_s(\lambda)[1 - \exp(-\alpha(\lambda)d)] d\lambda \quad (9)$$

为了求解最大功率时所对应的 V_m ,对(2)式求导,令 $dP/dV = d(JV)/dV = 0$,可得方程:

$$\exp(V_{oc}/V_c) = [(V + V_c)/V_c] \exp(V/V_c) \quad (10)$$

(10)式为超越方程,其数值解就是最大值 V_m ,将 V_m 再代入(2)式,便可求得此时的 J_m ,从而由(1)式求得转换效率 η .

3 计算结果与讨论

根据上述理论模型进行计算,计算中作了如下假设:InGaN pn 结太阳电池 p 区和 n 区的掺杂浓度都为 10^{18} cm^{-3} ;电池吸收区的厚度 d 为 $4 \mu\text{m}$;吸收系数由关系式 $\alpha(\lambda, E_g) = (hc/\lambda) \times A + B$ 确定,系数 A, B 由以下关系获得:在带边吸收系数为 $9.5 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$,在 4eV 处吸收系数为 $1.3 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ ^[6].

$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 相关的其他参数见表 1,其中 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的各个参数由 GaN 和 InN 的参数线性拟合得到.

计算得到的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 单、双和三结太阳电池的结果,见表 2 和表 3. 表 2 是计算的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 单、双和三结太阳能电池的性能参数,表 3 是计算的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 单、双和三结太阳能电池对应的禁带宽度和组分.

表 1 计算中所用到的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 材料参数^[9~11]

Table 1 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ material parameters used in the calculation

E_g	$N_c/10^{18} \text{ cm}^{-3}$	$N_v/10^{19} \text{ cm}^{-3}$	$D_n/(\text{cm}^2/\text{s})$	$D_p/(\text{cm}^2/\text{s})$	$L_n/10^{-4} \text{ cm}$	$L_p/10^{-4} \text{ cm}$
$3.4-2.7x$	$2.3-1.4x$	$1.8+3.5x$	$39+41x$	$0.75+0.25x$	$0.866+0.134x$	$6.24+2.7x$

表 2 计算的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 单、双和三结太阳能电池的性能参数
Table 2 Calculation results for one-junction, two-junction and three-junction solar cell

	V_{oc}/V	$J_{sc}/(\text{mA}/\text{cm}^2)$	FF	$\eta/\%$
单结	0.95	32.8	0.877	27.3
双结	1.94	21.4	0.881	36.6
三结	2.78	16.9	0.878	41.3

表 3 计算的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 单、双和三结太阳能电池对应的禁带宽度和组分

Table 3 Band-gaps and In alloy contents for the calculated one-junction, two-junction and three-junction solar cell

	E_g/eV	x
单结	1.39	0.74
双结	1.73, 1.12	0.62, 0.84
三结	1.89, 1.35, 0.92	0.56, 0.76, 0.92

图 1 是计算所得的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 单结太阳能电池转换效率和禁带宽度的关系曲线. 从图中可以看到, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 单结太阳能电池的最高转换效率为 27.3%, 取得此转换效率时, 其禁带宽度为 1.39eV, 对应的 In 组分为 0.74.

图 2 是计算所得的 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 双结太阳能电池的转换效率和两结电池材料禁带宽度的关系曲线. 可以看到, 其最大的转换效率为 36.6%, 取得此转换效率时, 两结电池材料 $\text{In}_{x1}\text{Ga}_{1-x1}\text{N}$ 和 $\text{In}_{x2}\text{Ga}_{1-x2}\text{N}$ 的禁带宽度分别是 1.73 和 1.12eV, 对应的 In 组分 x_1 和 x_2 分别为 0.62 和 0.84.

图 3 是我们设想的一种背照射 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 双结太阳能电池的结构示意图.

InGaN 单结、双结和三结太阳能电池的最高理论转换效率高于目前已有材料太阳能电池 (例如 Si 或 GaAs 单结电池, $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{P}/\text{GaAs}$ 双结电池, $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{P}/\text{GaAs}/\text{Ge}$ 三结电池) 的理论值. 其主要原因

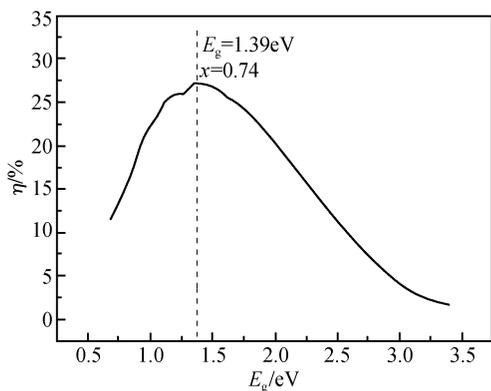


图 1 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 单结太阳能电池转换效率随禁带宽度的变化曲线

Fig. 1 Variation of the conversion efficiency versus the band-gap of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ one-junction solar cell

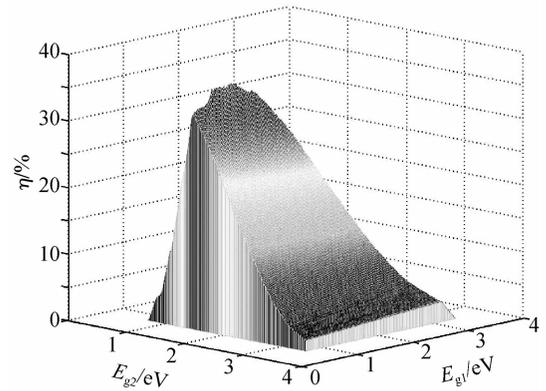


图 2 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 双结太阳能电池转换效率随禁带宽度的变化关系曲线

Fig. 2 Variation of the conversion efficiency versus the band-gaps of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ two-junction solar cell

是: 由上述理论计算可知, 太阳能电池的转换效率 η , 强烈地依赖于材料的禁带宽度 E_g . 由于 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 合金的禁带宽度在太阳光谱的最主要范围内是连续可调的, 很容易得到与最大 η 相对应 E_g 的材料, 而目前所用的太阳能电池材料, 禁带宽度或者是固定的, 或者是可调的, 但是可调范围不大, 不容易与最大 η 相对应. 特别是在多结串联电池中, 转换效率的大小由总的开路电压和短路电流的乘积决定, 而短路电流要求各结的短路电流互相匹配, 对各结材料的禁带宽度要求更加苛刻, 不易找到在禁带宽度、晶格失配和热失配等诸方面都合适的材料. 而 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 的禁带宽度是连续可调的, 它容易达到最佳的禁带宽度组合, 而且当电池结数增加到更多时, 这个优势会更明显. 例如 Marti 和 Arafijo^[12,7] 用细致平衡理论计算得到的双结电池最佳禁带宽度组合为 1.64

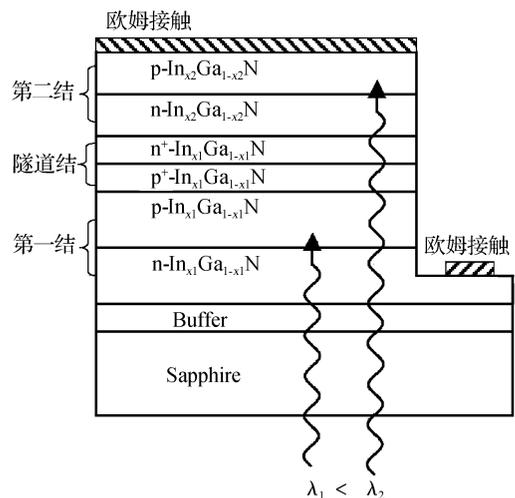


图 3 $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ 双结太阳能电池的结构示意图

Fig. 3 Schematic structure of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ two-junction solar cell

和 0.94eV, 我们计算的 $\text{In}_{0.62}\text{Ga}_{0.38}\text{N}/\text{In}_{0.84}\text{Ga}_{0.16}\text{N}$ 双结电池的禁带宽度 1.73eV/1.12eV 与它接近, 而现有的 $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{P}/\text{GaAs}$ 双结电池的禁带宽度组合 1.9eV/1.42eV 与它相距较远, 并不是一个最佳组合.

4 结论

本文从 pn 结型太阳能电池的电流-电压方程出发, 结合 InGaN 的材料参数, 计算了 InGaN 单结、双结和三结太阳能电池的最高理论转换效率, 它们高于目前通常半导体材料太阳能电池的理论值, 分别达到 27.3%, 36.6% 和 41.3%, 这三种 InGaN 太阳能电池的最佳带隙宽度及相应的 In 组分分别为 1.39eV ($x = 0.74$), 1.73eV/1.12eV ($x = 0.62/0.84$) 和 1.89eV/1.35eV/0.92eV ($x = 0.56/0.76/0.92$), 为 InGaN 太阳能电池的设计提供了理论依据.

参考文献

- [1] Wu J, Walukiewicz W, Yu K M, et al. Unusual properties of the fundamental band gap of InN. *Appl Phys Lett*, 2002, 80(21):3967
- [2] Matsuoka T, Okamoto H, Nakao M, et al. Optical bandgap energy of wurtzite InN. *Appl Phys Lett*, 2002, 81(7):1246
- [3] Tansley T L, Foley C P. Optical band gap of indium nitride. *J Appl Phys*, 1986, 59(9):3241
- [4] Chin V W L, Tansley T L, Osotchan T. Electron mobilities in gallium, indium, and aluminum nitrides. *J Appl Phys*, 1994, 75(11):7365
- [5] Wu J, Walukiewicz W, Yu K M, et al. Superior radiation resistance of $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ alloys; Full-solar-spectrum photovoltaic material system. *J Appl Phys*, 2003, 94(10):6477
- [6] Hamzaoui H, Bouazzi A S, Rezig B. Theoretical possibilities of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ tandem PV structures. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2005, 87:595
- [7] Shockley W, Queisser H J. Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cells. *J Appl Phys*, 1961, 32(3):510
- [8] <http://rredc.nrel.gov/solar/spectra/am1.5/ASTMG173/ASTMG173.html>
- [9] Sze S M. *Semiconductor devices physics and technology*. 2nd ed. Suzhou: Suzhou University Press, 2002:522 (in Chinese) [施敏. 半导体器件物理与工艺. 第2版. 苏州: 苏州大学出版社, 2002:522]
- [10] Levinshtein M E, Rumyantsev S L, Shur M S. *Properties of advanced semiconductor materials: GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe*. New Jersey: John Wiley & Sons, 2001:23
- [11] Bornstein L. *Numerical data and functional relationships in science and technology*. Berlin: Springer-Verlag, 1982
- [12] Marti A, Arafijo G L. Efficiencies for photovoltaic energy conversion in multigap systems. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 1996, 43:203

Theoretical Calculation of Conversion Efficiency of InGaN Solar Cells*

Wen Bo, Zhou Jianjun, Jiang Ruolian[†], Xie Zili, Chen Dunjun, Ji Xiaoli,
Han Ping, Zhang Rong, and Zheng Youdou

(Key Laboratory of Advanced Photonic and Electronic Materials of Jiangsu, Department of Physics,
Nanjing University, Nanjing 210093, China)

Abstract: Based on the current-voltage equation for pn junction solar cells, the conversion efficiency under ideal conditions for an InGaN solar cell was calculated. The conversion efficiencies of one-junction, two-junction, and three-junction $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ solar cells were calculated to 27.3%, 36.6%, and 41.3%, respectively, all of which are higher than those of common materials. The optimal band gaps and the indium contents of these $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ solar cells were also obtained, giving a theoretical basis for the design of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ solar cells.

Key words: InGaN; solar cell; conversion efficiency; theoretical calculation

PACC: 8630J; 7340L; 7865K

Article ID: 0253-4177(2007)09-1392-04

* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (No. 2006CB6049), the National Natural Science Foundation of China (No. 60476030), and the Natural Science Foundation of Jiangsu Province (No. BK2006126)

[†] Corresponding author. Email: rlijiang@jlonline.com

Received 4 February 2007, revised manuscript received 4 April 2007

©2007 Chinese Institute of Electronics