

# InGaN 单结太阳能电池中的浅能级杂质的理论计算和模拟

林硕<sup>①②③</sup>, 沈晓明<sup>④</sup>, 张保平<sup>①②</sup>, 李福宾<sup>③</sup>, 李建功<sup>④</sup>, 孟祥海<sup>④</sup>

① 厦门大学物理系, 厦门 361005;

② 厦门大学萨本栋微纳米技术研究中心, 厦门 361005;

③ 广西大学物理科学与技术工程学院, 南宁 530004;

④ 广西大学材料科学与工程学院, 南宁 530004

E-mail: 100.eye@163.com

2009-10-26 收稿, 2009-12-10 接受

国家高技术研究发展计划(2006AA03Z409)、厦门市政府科学和技术部研究项目(2006AA03Z110)、广西自然科学基金(0731012)及广西大学有色金属和高等材料加工新技术教育部重点实验室开放基金(GXKFZ-04)资助

**摘要** 通过氢有效质量理论(HEMT)对  $\text{In}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}$  (高 In 组分,  $E_g=1.31$  eV) 太阳能电池材料进行分析, 计算出其浅能级施主和受主的重要性质参数电离能:  $\Delta E_D \sim 10.8$  meV,  $\Delta E_A \sim 90$  meV. 在此基础上得到了室温条件下  $\text{In}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}$  的浅能级施主和受主强电离时的杂质浓度范围: 施主  $9.56 \times 10^8 \sim 4.57 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ , 受主  $9.56 \times 10^8 \sim 7.84 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ; 并估算了产生杂质能带的最低杂质浓度: 施主  $\sim 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , 受主  $\sim 5.79 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ . 然后借助 AMPS-1D 软件对含有部分电离的浅能级施主、受主  $\text{In}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}$  单结太阳能电池进行模拟, 详细讨论了施主能级和受主能级对载流子的俘获对太阳能电池效率的影响. 本文结果为 InGaN 单结和多结太阳能电池的掺杂(尤其是 p 型掺杂)和制备提供了理论参考和帮助.

## 关键词

InGaN  
单结太阳能电池  
浅能级杂质  
理论计算  
AMPS

据报道, InN 的禁带宽度由原来的 1.89 eV 修改为现在的 0.7 eV<sup>[1,2]</sup>; 这样  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  合金的禁带宽度在 0.7 eV(InN)~3.4 eV(GaN) 范围内可以连续变化, 几乎覆盖了整个太阳光谱, 这为制备超高效率的 InGaN 层叠太阳能电池提供了可能. 最近我们<sup>[3]</sup>和文博等人<sup>[4]</sup>通过理论计算和模拟发现, 对理想的 InGaN 材料, 双结电池高于 30%、三结电池高于 40% 的理论效率是可能的.

InGaN 材料之所以能够成为 III-V 族化合物半导体光伏材料中的新成员, 除了禁带宽度在 0.7~3.4 eV 连续可调这个最大的优点外, 还有许多其他的原因. 由于它具备高硬度、耐高温、耐辐射、耐酸碱的优点, InGaN 材料非常适于制备超高效率的太空太阳能电池. 由于它是直接禁带材料, 具有很高的吸收系数, 所以电池可以做得很薄, 有利于节省材料<sup>[4]</sup>. 由于调节 In 组分可连续改变  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  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  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  多结太阳能电池结构, 比目前用几种不同的半导体材料制备多结太阳能电池(如 InGaP/(In)GaAs/Ge 系列太阳能电池)方便了许多<sup>[4]</sup>. InGaN 材料由于极化和压电作用使其对高位错密度很不敏感, 这有利于克服材料中的缺陷对太阳能电池效率的不利影响<sup>[5]</sup>. 另外, 低 In 组分的 InGaN 材料已成功用于制备蓝光激光器(LD)、蓝光发光二极管(LED)、紫外探测器, 这为应用 InGaN 材料制备 InGaN 太阳能电池提供了技术准备. 但是, 目前高质量、高 In 组分的 InGaN 材料生长还存在一些困难, 如 p 型掺杂、相分离、InN 中很高的  $\text{N}_2$  平衡蒸汽压, 这些困难成为制备 InGaN 基层叠超高效率太阳能电池的主要障碍.

一些小组报道了他们对 InGaN 太阳能电池的研究. Jani 等人<sup>[5,6]</sup>制备并分析了低 In 组分的 InGaN pin 和量子阱太阳能电池. Yang 等人<sup>[7]</sup>制备并分析了低 In 组

**英文引用格式:** Lin S, Shen X M, Zhang B P, et al. Theoretical calculation and simulation of shallow dopants in InGaN single junction solar cell (in Chinese). Chinese Sci Bull (Chinese Ver), 2010, 55: 1446—1452, doi: 10.1360/972009-2226

分的 InGaN pn 结单结太阳电池(p 层  $E_g=2.7$  eV, n 层  $E_g=2.8$  eV), 但并没有研究电池在全太阳光谱下的工作特性. Zhang 等人<sup>[8]</sup>优化了  $\text{In}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}$  单结太阳电池, 不过在其研究中并没有对太阳电池中的杂质和缺陷进行详细的讨论. Shen 等人<sup>[3]</sup>、Hamzaoui 等人<sup>[9]</sup>、Islam 等人<sup>[10]</sup>和文博等人<sup>[4]</sup>均从理论上分析了理想 InGaN 材料制备的层叠太阳电池的  $I$ - $V$  特性. 从上述理论方面的报道我们可以看到, 目前理论方面的研究主要集中于由理想 InGaN 材料制备的层叠太阳电池的  $I$ - $V$  特性及其结构设计. 但是据我们所知, 目前关于 InGaN 太阳电池中杂质和缺陷方面的研究还非常地缺少; 而 InGaN 中的浅能级杂质对 InGaN 材料的掺杂和 InGaN 太阳电池的制备起到至关重要的作用.

本文关于  $\text{In}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}$  单结太阳电池中浅能级杂质的理论计算和模拟的原理也适用于其他  $x \neq 0.65$  的  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  ( $E_g \neq 1.31\text{eV}$ ) 单结太阳电池. 本文为 InGaN 单结和多结太阳电池的掺杂(尤其是 p 型掺杂)和制备提供了理论参考和帮助.

## 1 理论背景和材料参数

### 1.1 理论背景

(i) AMPS-1D 软件. 在 Hamzaoui 等人<sup>[9]</sup>、Islam 等人<sup>[10]</sup>和文博等人<sup>[4]</sup>的研究中, 由于他们对 InGaN 层叠电池的讨论是基于光照条件下的理想 pn 结方程, 所以他们不可能对 InGaN 太阳电池中的杂质和缺陷进行详细的分析. 本文采用的 AMPS-1D 软件基于第一性原理、半导体和太阳电池基本方程: 电子连续性方程、空穴连续性方程和泊松方程. 首先从这 3 个方程出发得到 3 个状态变量: 电子准费米能级、空穴准费米能级和电势(它们都是位置的函数), 而后再由这 3 个状态变量出发得到太阳电池的一系列特性. 在复合过程分析中不但考虑了直接复合(band to band 复合), 还考虑了间接复合(SRH 复合). 这样借助 AMPS 这一有力工具, 我们就可以对 InGaN 太阳电池中的浅能级杂质进行详细的分析和讨论.

(ii) 氢有效质量理论(HEMT). 氢有效质量理论(HEMT)是计算半导体中浅能级杂质电离能的一种比较简单的方法, 浅能级杂质产生的微扰势是长程、缓变的屏蔽库仑势.

晶体中的电子遵循薛定谔方程:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) + \delta V(r) \right] \psi = E\psi, \quad (1)$$

其中  $V(\vec{r})$  是晶体的周期性等效势场,  $\delta V(r)$  是杂质原子引入的屏蔽库仑势.

由有效质量近似<sup>[11]</sup>,

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_n^*} \nabla^2 + \delta V(r) \right] \psi = E\psi, \quad (2)$$

即把等效势场的影响归入到电子有效质量  $m_n^*$  中, 如果  $\delta V(r) = -\frac{e^2}{4\pi^2 \epsilon_r \epsilon_0 r}$ , 则(2)式具有和氢原子定态薛定谔方程相同的形式, 这样就可以利用氢原子定态薛定谔方程的一些结果.

HEMT 已成功应用于计算 Si, Ge 和 III-V 族化合物半导体(如 GaAs)中浅能级的电离能<sup>[12]</sup>. GaN 也是 III-V 族化合物半导体的一员, 由 HEMT 求出 GaN 的受主电离能为

$$\Delta E_A = \frac{1.05m_0}{m_0} \frac{13.6}{(9.5)^2} = 158 \text{ meV} \quad (1.05m_0$$

为 GaN 的空穴电导有效质量, 13.6 eV 为氢原子的基态电离能, 9.5 为 GaN 的相对介电常数<sup>[13]</sup>). 实验测量的结果为: 对本征缺陷 Ga 空位  $V_{\text{Ga}}$ ,  $\Delta E_A=140 \text{ meV}$ <sup>[14]</sup>; 对 GaN 最常用的 Mg 受主,  $\Delta E_A=150\sim 210 \text{ meV}$ <sup>[14]</sup> (随着掺杂浓度的提高, 由于屏蔽库仑势交叠, 电离能有减小的趋势); 看来理论值与实验值符合得不错. 由

$$\text{HEMT 求出 GaN 的施主电离能: } \Delta E_D = \frac{0.2m_0}{m_0} \frac{13.6}{(9.5)^2}$$

$= 30 \text{ meV}$  ( $0.2m_0$  为 GaN 的电子的电导有效质量<sup>[14]</sup>); 实验测量的结果为: 对本征缺陷 N 空位  $V_N$ :  $\Delta E_D=30 \text{ meV}$ <sup>[14]</sup>, 理论值与实验值精确符合; 对 GaN 最常用的 Si 施主:  $\Delta E_D=12\sim 20 \text{ meV}$ <sup>[14]</sup>, 在数量级上理论值与实验值也是符合得不错的. 看来 HEMT 确实抓住了 III-V 族化合物半导体电离能的主要矛盾.

由于高 In 组分 InGaN 材料生长困难, 目前关于高 In 组分 InGaN 材料的实验特性参数还非常少, 许多还不能获得.  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  是由 III-V 族化合物半导体 InN 和 GaN 组成的三元合金(混合晶体), 我们尝试应用 HEMT 对  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  的施主、受主电离能做一个数量级的估算, 在理论上应该是合理的.

### 1.2 理论计算和模拟中用到的材料参数

(i)  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  材料参数方程. 禁带宽度(eV):

$$E_g(x) = 0.7x + 3.4(1-x) - 1.43x(1-x)^{[15]} (T=300 \text{ K}). \quad (3)$$

电子亲和势(eV):  $\chi = 4.1 + 0.7 \times (3.4 - E_g)$ <sup>[14,16]</sup>

(4.1 eV 为 GaN 的电子亲和势). (4)  
吸收系数( $\text{cm}^{-1}$ ):

$$\alpha(\lambda) = 2.2 \times 10^5 \sqrt{1.24/\lambda - E_g} \quad [16]. \quad (5)$$

迁移率( $\text{cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ ):

$$\mu_i(N) = \mu_{\min,i} + \frac{\mu_{\max,i} - \mu_{\min,i}}{1 + (N/N_{g,i})^{\gamma_i}} \quad [17]. \quad (6)$$

这里 InGaN 的迁移率假设与 GaN 具有类似的形式.  $i$  表示载流子类型;  $N$  是掺杂浓度;  $\mu_{\max,i}$ ,  $\mu_{\min,i}$ ,  $N_{g,i}$ ,  $\gamma_i$  取决于具体半导体材料的性质, 值列于表 1.

\*导带有效态密度( $\times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ ):

$$N_c = x0.9 + (1-x)2.3 \quad [14] (T=300 \text{ K}). \quad (7)$$

\*价带有效态密度( $\times 10^{19} \text{cm}^{-3}$ ):

$$N_v = x5.3 + (1-x)4.6 \quad [14] (T=300 \text{ K}). \quad (8)$$

\*相对介电常数:

$$\epsilon_r = x15.3 + (1-x)9.5 \quad [13,14]. \quad (9)$$

\*电子的电导有效质量( $m_0$ ):

$$x0.11 + (1-x)0.2 \quad [14]. \quad (10)$$

\*空穴的电导有效质量( $m_0$ ):

$$x1.24 + (1-x)1.05. \quad (11)$$

InN 的空穴的电导有效质量( $m_0$ ):

$$m_{cp}^* = \frac{(m_p^*)_{l1}^3 + (m_p^*)_{h1}^3}{(m_p^*)_{l1}^2 + (m_p^*)_{h1}^2} = \frac{(0.27)^3 + (1.63)^3}{(0.27)^2 + (1.63)^2} = 1.24,$$

GaN 的空穴的电导有效质量( $m_0$ ):

$$m_{cp}^* = \frac{(m_p^*)_{l1}^3 + (m_p^*)_{h1}^3}{(m_p^*)_{l1}^2 + (m_p^*)_{h1}^2} = \frac{(0.3)^3 + (1.3)^3}{(0.3)^2 + (1.3)^2} = 1.05,$$

其中  $0.27m_0$  和  $1.63m_0$  分别为 InN 的重轻空穴质量<sup>[14]</sup>;  $0.3m_0$  和  $1.3m_0$  分别为 GaN 的重轻空穴质量<sup>[14]</sup>. 以上带\*的公式由 InN 和 GaN 的对应参数线性拟合得到.

表 1 InGaN 迁移率相关参数

载流子类型	$\mu_{\max,i}/\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	$\mu_{\min,i}/\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$	$N_{g,i}/\text{cm}^{-3}$	$\gamma_i$
电子	1000	55	$2 \times 10^{17}$	1
空穴	170	3	$3 \times 10^{17}$	2

(ii)  $\text{In}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}$  单结太阳能电池参数. 论文采用 AM1.5G( $100 \text{mW}/\text{cm}^2$ ,  $0.32 \sim 1.32 \mu\text{m}$ )太阳光谱, 我们设计了如图 1 所示的单结太阳能电池. 电池的表面复合速率为  $S_{p0}=S_{p1}=S_{n0}=S_{n1}=1000 \text{cm/s}$ <sup>[18]</sup>, 前表面和后表面反射系数为  $R_{B0}=R_{B1}=0.1$ <sup>[19,20]</sup>. 前后表面金属电极和半导体的接触设为欧姆接触. 因为是单晶材料, 所以认为材料的光学禁带等于迁移率禁带. 考虑部分电离后最佳施主、受主浓度大约为  $1 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$ ; 施主电离能设为  $10.8 \text{meV}$ , 受主电离能设为  $90 \text{meV}$ (电离能的取值计算见 2.1(i)). p 区设为  $130 \text{nm}$ , n 区设为  $270 \text{nm}$ . 我们假设受主能级(p 区)或施主能级(n 区)对电子和空穴具有相同的俘获截面:  $\sigma_{pe} = \sigma_{ph} = \sigma_p$ ,  $\sigma_{ne} = \sigma_{nh} = \sigma_n$  ( $\sigma_{pe}$ ,  $\sigma_{ph}$  分别代表 p 区的受主能级对电子和空穴的俘获截面,  $\sigma_{ne}$  和  $\sigma_{nh}$  分别代表 n 区的施主能级对电子和空穴的俘获截面). 将  $x=0.65$  代入 1.2(i)中各方程, 可以得到  $\text{In}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}$  中电子的电导有效质量  $m_n^*$  为  $0.14m_0$ , 空穴的电导有效质量  $m_{cp}^*$  为  $1.17m_0$ ; 还有其他一些基本材料参数(见表 2).

## 2 结果与讨论

### 2.1 $\text{In}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}$ 中浅能级杂质的理论计算

(i) 电离能, 基态轨道半径

$$\Delta E_D = \frac{m_n^* E_0}{m_0 \epsilon_r^2} = 0.14 \times \frac{13.6}{(13.27)^2} = 10.8 \text{ meV},$$

$$a_D = \frac{m_0}{m_n^*} \epsilon_r a_0 = \frac{13.27}{0.14} \times 0.53 = 50.2 \text{ \AA}, \quad (12)$$

$$\Delta E_A = \frac{m_{cp}^* E_0}{m_0 \epsilon_r^2} = 1.17 \times \frac{13.6}{(13.27)^2} = 90 \text{ meV},$$

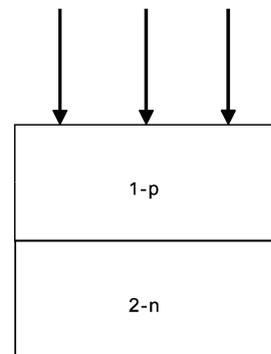


图 1 InGaN 单结太阳能电池

表 2 In<sub>0.65</sub>Ga<sub>0.35</sub>N 单结电池参数

	<i>x</i>	<i>E<sub>g</sub></i> /eV	<i>χ</i> /eV	<i>N<sub>c</sub></i> /×10 <sup>18</sup> cm <sup>-3</sup>	<i>N<sub>v</sub></i> /×10 <sup>19</sup> cm <sup>-3</sup>	<i>ε<sub>r</sub></i>	<i>μ<sub>n</sub></i> /cm <sup>2</sup> ·V <sup>-1</sup> ·s <sup>-1</sup>	<i>μ<sub>p</sub></i> /cm <sup>2</sup> ·V <sup>-1</sup> ·s <sup>-1</sup>
p, n	0.65	1.31	5.56	1.39	5.06	13.27	685	153.3

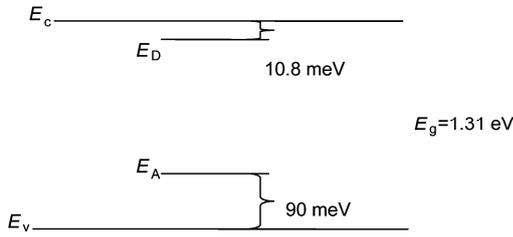


图 2 In<sub>0.65</sub>Ga<sub>0.35</sub>N 浅能级施主和受主能级

$$a_A = \frac{m_0}{m_{cp}^*} \epsilon_r a_0 = \frac{13.27}{1.17} \times 0.53 = 6 \text{ \AA}$$

其中  $E_0=13.6 \text{ eV}$  是氢原子的基态电离能,  $a_0=0.53 \text{ \AA}$  是第一玻尔轨道半径; 考虑介电常数后电子受正电中心的电场强度将减弱  $\epsilon_r$  倍, 束缚能减弱  $\epsilon_r^2$  倍.

(ii) 室温下杂质强电离时的杂质浓度范围. 室温下 In<sub>0.65</sub>Ga<sub>0.35</sub>N 的本征载流子浓度为

$$n_i = (N_c N_v)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{E_g}{2kT}} = (1.39 \times 10^{18} \times 5.06 \times 10^{19})^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{E_g}{2kT}} = 8.39 \times 10^{18} e^{-\frac{1.31}{0.052}} = 9.56 \times 10^7 \text{ cm}^{-3} \quad (13)$$

杂质若要处于杂质电离区, 杂质浓度至少比  $n_i$  高一个数量级, 所以杂质浓度下限是  $9.56 \times 10^8 \text{ cm}^{-3}$ .

设  $n_D$  为未电离的施主浓度,  $D_-$  为未电离的施主占总施主的百分数, 即  $D_- = n_D / N_D$ . 因为强电离区的费米能级位置为

$$E_F = E_c + kT \ln \frac{N_D}{N_c} \quad (14)$$

在计算中我们假设电子占据杂质能级概率的简并因子是 1/2, 所以

$$n_D = \frac{N_D}{1 + \frac{1}{2} e^{\frac{E_D - E_F}{kT}}} \approx 2N_D e^{-\frac{E_D - E_F}{kT}} = 2N_D e^{-\frac{E_D - E_c - kT \ln \frac{N_D}{N_c}}{kT}} = \frac{2N_D^2}{N_c} e^{\frac{\Delta E_D}{kT}} \quad (15)$$

$$\text{所以 } D_- = \frac{n_D}{N_D} = \frac{2N_D}{N_c} e^{\frac{\Delta E_D}{kT}} \quad (16)$$

若认为施主全部电离的标准是 90% 电离 ( $D_- = 0.1$ ),

$$N_D = \frac{D_- N_c}{2} e^{\frac{\Delta E_D}{kT}} \leq \frac{0.1 \times 1.39 \times 10^{18}}{2} e^{-\frac{10.8}{26}} \approx 4.57 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3} \quad (17)$$

$4.57 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  就是施主强电离时的杂质浓度上限.

同理, 对受主有

$$N_A = \frac{D_+ N_v}{2} e^{-\frac{\Delta E_A}{kT}} \leq \frac{0.1 \times 5.06 \times 10^{19}}{2} e^{-\frac{90}{26}} \approx 7.84 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3} \quad (18)$$

所以, 室温下杂质属于强电离区的杂质浓度范围为

$$\text{施主: } 9.56 \times 10^8 \sim 4.57 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3} \quad (19)$$

$$\text{受主: } 9.56 \times 10^8 \sim 7.84 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}.$$

(iii) 产生杂质能带的最低掺杂浓度. 设施主杂质成立方体形状, 彼此相切, 这些杂质轨道(波函数)发生交叠. 一个杂质原子占体积  $1/N_{oD}(\text{cm}^{-3})$  的立方体, 其边长等于  $(1/N_{oD})^{1/3}(\text{cm})$ .

所以  $(1/N_{oD})^{1/3} = 2a_D$  ( $a_D$  为施主杂质的基态轨道半径), 即

$$N_{oD} = \left(\frac{1}{2a_D}\right)^3 = \left(\frac{1}{2 \times 50.2 \text{ \AA}}\right)^3 = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3} \quad (20)$$

$N_{oD}$  就是施主杂质产生杂质能带的最低掺杂浓度.

同理, 受主杂质产生杂质能带的最低掺杂浓度为

$$N_{oA} = \left(\frac{1}{2a_A}\right)^3 = \left(\frac{1}{2 \times 6 \text{ \AA}}\right)^3 = 5.79 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3} \quad (21)$$

因为  $N_{oD}$  较小, 所以在制备太阳能电池时要特别注意施主杂质可能产生的高掺杂效应.

## 2.2 含浅能级杂质的 In<sub>0.65</sub>Ga<sub>0.35</sub>N 单结太阳能电池的模拟

(i) 理想的太阳能电池. 我们首先假设 p 区受主和 n 区施主俘获截面均为 0, 即  $\sigma_p = \sigma_n = 0$ , 得到理想的单结太阳能电池(不考虑间接复合)的工作特性为:  $\eta = 25.44\%$ ,  $V_{oc} = 0.986 \text{ V}$ ,  $J_{sc} = 29.284 \text{ mA/cm}^2$ ,  $FF = 0.881$  (在 Zhang 等人<sup>[8]</sup>的研究中很有可能采用 AMPS 中的寿命模式, 以少子寿命  $\tau_p = 6.5 \text{ ns}$  的方式考虑 In<sub>0.65</sub>Ga<sub>0.35</sub>N 单结太阳能电池中的缺陷; 所以我们得到的理想的单结太阳能电池的效率比其要高一些).

(ii) 考虑间接复合后的太阳能电池. 在 Zhang 等人<sup>[8]</sup>的研究中假设浅能级杂质完全电离, 所以没有考虑浅能级杂质的间接复合作用, 这里将对浅能级杂质的间接复合作用进行详细讨论. 由于俘获截面问题无论从理论或实验上都是一个难题<sup>[21]</sup>, 而且高质量的高 In 组分 InGaN 材料生长存在一些困难, 所以高 In 组分 InGaN 材料的施主和受主的精确俘获截面数值非常难获得. 我们根据文献关于 GaN 俘获截面的报道, 对  $\sigma_p$  和  $\sigma_n$  在  $10^{-20}$ ~ $10^{-15}$   $\text{cm}^{-2}$  范围内的受主 ( $\sigma_p$ ) 和施主 ( $\sigma_n$ ) 进行模拟, 得到太阳能电池效率随俘获截面变化的关系, 见图 3 所示.

从图 3 可以看出, 由于浅能级不是有效的复合中心, 所以在小俘获截面  $10^{-20}$ ~ $10^{-18}$   $\text{cm}^{-2}$  情况效率几乎保持在理想值 25.44%. p 区受主能级复合对效率的最大影响为~1.797% (对应最大俘获截面  $10^{-15}$   $\text{cm}^{-2}$ ), n 区施主能级复合对效率的最大影响为~2.657%, 同时考虑 p 区受主能级复合和 n 区施主能级复合对效率的最大影响~2.843%.

(iii) p 区复合和 n 区复合. 从图 3 我们还可以看出, 对相同的俘获截面值, n 区施主能级复合对效率的影响大于 p 区受主能级复合对效率的影响, 即 n 区复合大于 p 区复合; 这一点在总复合图(图 4)中可以更明显看出. 为了对比我们还得到了光产生率图(图 5).

在单位时间内 p 区(顶区)单位体积的光生少子多于 n 区(基区)单位体积的光生少子. 而且由 Shockley-

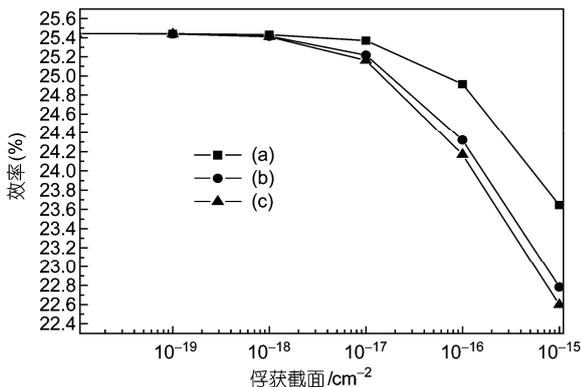


图 3 效率随俘获截面变化

(a)  $\sigma_n=0$ ,  $\sigma_p$  在  $10^{-20}$ ~ $10^{-15}$   $\text{cm}^{-2}$  变化, 即只考虑 p 区受主能级复合的影响; (b)  $\sigma_p=0$ ,  $\sigma_n$  在  $10^{-20}$ ~ $10^{-15}$   $\text{cm}^{-2}$  变化, 即只考虑 n 区施主能级复合的影响; (c)  $\sigma_p=\sigma_n$  在  $10^{-20}$ ~ $10^{-15}$   $\text{cm}^{-2}$  变化, 即同时考虑 p 区受主能级复合和 n 区施主能级复合的影响

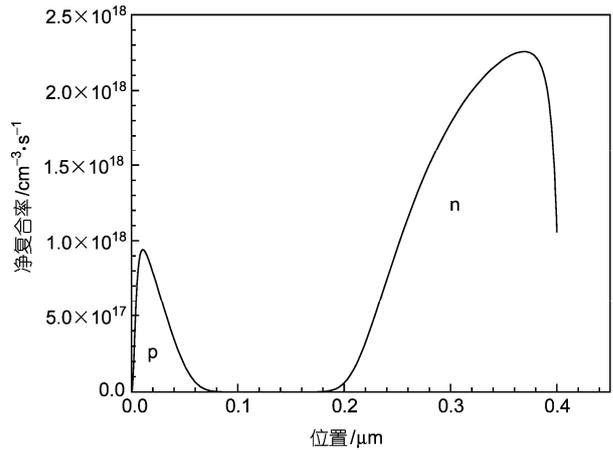


图 4 总复合 ( $\sigma_p=\sigma_n=10^{-15}$   $\text{cm}^{-2}$ )

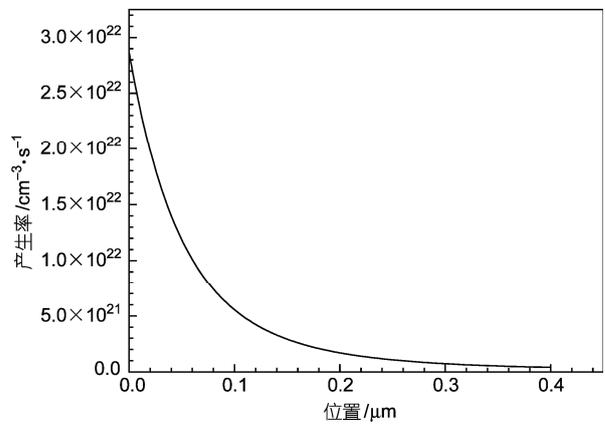


图 5 光产生率

Read-Hall 的间接复合理论, 越靠近禁带中线的复合中心, 其复合作用是越显著的; 在这里受主电离能为 90 meV, 施主电离能为 10.8 meV, 即受主能级(对应 p 区)比施主能级(对应 n 区)更靠近禁带中线. 那为什么得到的结果是 n 区复合大于 p 区复合呢?

我们注意到, 在这里 n 区长度(270 nm)大于 p 区长度(130 nm), 这就解释了 n 区复合大于 p 区复合的原因: n 区的光生少子空穴到达空间电荷区要运动 270 nm 的距离(只有到达空间电荷区的光生少子才能被收集), 而 p 区的光生少子电子到达空间电荷区只要运动 130 nm. 而且 p 区的少数载流子是电子, n 区的少数载流子是空穴; 电子的迁移率大于空穴迁移率(进而电子的扩散长度比空穴的长). 所以平均来说, n 区的光生少子比 p 区的光生少子更难到达空间电荷区, 未到达空间电荷区的光生少子就被复合掉了.

### 3 结论

本文通过氢有效质量理论(HEMT)对  $\text{In}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}$  (高 In 组分,  $E_g=1.31$  eV) 太阳能电池材料进行分析, 计算出其浅能级施主和受主的重要性质参数电离能:  $\Delta E_D \sim 10.8$  meV,  $\Delta E_A \sim 90$  meV. 室温下施主强电离时杂质浓度范围为  $9.56 \times 10^8 \sim 4.57 \times 10^{16}$   $\text{cm}^{-3}$ , 受主强电离时杂质浓度范围为  $9.56 \times 10^8 \sim 7.84 \times 10^{16}$   $\text{cm}^{-3}$ . 产生杂质能带的施主最低浓度为  $\sim 1 \times 10^{18}$   $\text{cm}^{-3}$ , 产生杂质能带的受主最低浓度为  $\sim 5.79 \times 10^{20}$   $\text{cm}^{-3}$ .

另外, 借助 AMPS 软件对施主、受主浓度为  $1 \times 10^{17}$   $\text{cm}^{-3}$  的  $\text{In}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}$  单结太阳能电池进行模拟, 结果发现在小俘获截面情况 ( $\sigma_p = \sigma_n = 10^{-20} \sim 10^{-18}$   $\text{cm}^{-2}$ ), 电池效率几乎保持在理想值 25.44%; 在最大俘获截面情况 ( $\sigma_p = \sigma_n = 10^{-15}$   $\text{cm}^{-2}$ ), 施主能级和受主能级对载流子俘获对效率的最大影响为  $\sim 2.843\%$ . 其中 n 区(基区)复合大于 p 区(顶区)复合, 这主要是由于 n 区长度 (270 nm) 大于 p 区长度 (130 nm). 本文为 InGaN 单结和多结太阳能电池的掺杂(尤其是 p 型掺杂)和制备提供了理论参考和帮助.

**致谢** 感谢美国宾西法尼亚大学电子材料工艺研究实验室提供的 AMPS-1D 软件.

### 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: 3967—3969
- 2 Matsuoka T, Okamoto H, Nakao M, et al. Optical bandgap energy of wurtzite InN. *Appl Phys Lett*, 2002, 81: 1246—1248
- 3 Shen X M, Lin S, Li F B, et al. Simulation of the InGaN-based tandem solar cells. In: *Proceedings of SPIE: Photovoltaic Cell and Module Technologies II*, San Diego, CA, USA, 2008
- 4 文博, 周建军, 江若琏, 等. InGaN 太阳能电池转换效率的理论计算. *半导体学报*, 2007, 28: 1392—1395
- 5 Jani O, Honsberg C, Asghar A, et al. Characterization and analysis of InGaN photovoltaic devices. In: *Proceedings of the 31st IEEE Photovoltaic Specialists Conference*, Orlando, FL, USA, 2005
- 6 Jani O, Honsberg C, Kurtz S. Design and characterization of GaN/InGaN solar cells. *Appl Phys Lett*, 2007, 91: 132117
- 7 Yang C B, Wang X L, Xiao H L, et al. Photovoltaic effects in InGaN structures with p-n junctions. *Phys Status Solidi A*, 2007, 204: 4288—4291
- 8 Zhang X B, Wang X L, Xiao H L, et al. Simulation of  $\text{In}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}$  single-junction solar cells. *J Phys D: Appl Phys*, 2007, 40: 7335—7338
- 9 Hamzaoui H, Bouazzi A S, Rezig B. Theoretical possibilities of  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  tandem PV structures. *Sol Energ Mat Sol C*, 2005, 87: 595—603
- 10 Islam M R, Enamul K A N M, Bhuiyan A G. Projected performance of  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  multi-junction solar cells. *J Electr Electron Eng*, 2006, 6: 251—255
- 11 夏建白. 现代半导体物理. 北京: 北京大学出版社, 2000. 45
- 12 刘恩科, 朱秉升, 罗晋升, 等. 半导体物理学. 西安: 西安交通大学出版社, 2003
- 13 Barker A S, Hegems M. Infrared lattice vibrations and free-electron dispersion in GaN. *Phys Rev B*, 1973, 7: 743—750
- 14 Levinshtein M E, Rumyantsev S L, Shur M S. *Properties of Advanced Semiconductor Materials*. Chichester, UK: Wiley, 2001
- 15 Wu J, Walukiewicz W, Yu K M, et al. Small band gap bowing in  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  alloys. *Appl Phys Lett*, 2002, 80: 4741—4743
- 16 李娜. 氮化镓基光电器件的模拟分析. 硕士学位论文. 北京: 中国科学院研究生院, 2003. 38
- 17 Mnatsakanov T T, Levinshtein M E, Pomortseva L I, et al. Carrier mobility model for GaN. *Solid State Electron*, 2003, 47: 111—115
- 18 Aleksiejūnas R, Sūdžius M, Gudelis V, et al. Carrier transport and recombination in InGaN/GaN heterostructures, studied by optical four-wave mixing technique. *Phys Status Solidi C*, 2003, 0: 2686—2690
- 19 Dingle R, Sell D D, Stokowski S E, et al. Absorption, reflectance, and luminescence of GaN single crystals. *Phys Rev B*, 1971, 3: 497—500
- 20 Wu J, Walukiewicz W, Shan W, et al. Effects of the narrow band gap on the properties of InN. *Phys Rev B*, 2002, 66: 201403
- 21 李铭复. 半导体物理学. 北京: 科学出版社, 2000. 145

## Theoretical calculation and simulation of shallow dopants in InGaN single junction solar cell

LIN Shuo<sup>1,2,3</sup>, SHEN XiaoMing<sup>4</sup>, ZHANG BaoPing<sup>1,2</sup>, LI FuBin<sup>3</sup>, LI JianGong<sup>4</sup> & MENG XiangHai<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Xiamen University, Xiamen 361005, China;

<sup>2</sup> Pen-Tung Sah Micro/Nano Technology Research Center, Xiamen University, Xiamen 361005, China;

<sup>3</sup> College of Physical Science and Technology, Guangxi University, Nanning 530004, China;

<sup>4</sup> College of Materials Science and Engineering, Guangxi University, Nanning 530004, China

Hydrogenic effective-mass theory (HEMT) was adopted to study the photovoltaic property of  $\text{In}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}$  ( $E_g=1.31$  eV). The ionization energy of shallow donors and acceptors in  $\text{In}_{0.65}\text{Ga}_{0.35}\text{N}$  was calculated to be  $\Delta E_D \sim 10.8$  meV and  $\Delta E_A \sim 90$  meV, respectively. Based on these values, the doping concentration necessary to obtain strong ionization of shallow dopants was estimated to be  $9.56 \times 10^8 - 4.57 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  for donors and  $9.56 \times 10^8 - 7.84 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  for acceptors. The lowest doping concentration required to form impurity bands was found to be  $\sim 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  for donors and  $\sim 5.79 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$  for acceptors. Using AMPS-1D software, the property of single junction solar cell containing partially ionized shallow dopants, was simulated. The effects of recombination of shallow dopants on the efficiency of the solar cell were analyzed and discussed in detail. The results are useful for doping (especially for p-type doping) and fabrication of InGaN-based single junction and multijunction solar cells.

**InGaN, single junction solar cell, shallow dopants, theoretical calculation, AMPS**

doi: 10.1360/972009-2226