# ОПТИМІЗАЦІЯ СОНЯЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ ІЗ ГЕТЕРОПЕРЕХОДОМ $n-{ m GaAs}/p-{ m Al}_x{ m Ga}_{1-x}{ m As}$

П. П. Горлей<sup>1</sup>, О. А. Червінський<sup>1</sup>, Ю. В. Воробйов<sup>2</sup>, Х. Ґонзалез-Ернандез<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича,

вул. Коцюбинського, 2, 58012, Чернівці, Україна

<sup>2</sup>Керетарське відділення наукового центру "СІНВЕСТАВ", Норпоніснте 2000, 76230, Керетаро, Мексика

<sup>3</sup> Науковий центр "СІМАВ", проспект Міґеля Сервантеса 120,

Індустріальний район Чічуачуа, 31109, Чічуачуа, Мексика

(Отримано 13 березня 2008 р.; в остаточному вигляді — 23 червня 2008 р.)

У роботі представлено результати чисельного моделювання процесів електронного транспорту в сонячному елементі з гетеропереходом n-GaAs/p-Al $_x$ Ga $_{1-x}$ As. Оптимізовано величини ефективності фотоперетворення сонячного елемента  $\eta$  як функції молярного вмісту алюмінію x, товщини шару p-Al $_x$ Ga $_{1-x}$ As, типу та концентрації леґуючої домішки, що дало змогу встановити допустимі межі зміни цих параметрів, які забезпечують значення  $\eta = 20.2 \div 20.8\%$  при умовах AM1.5 без спеціальної модифікації поверхні фотоперетворювача.

Ключові слова: сонячний елемент, арсенід галію, гетероперехід, оптимізація, моделювання, домішки.

PACS number(s): 71.15.-m, 72.40.+w, 73.20.Hb

### вступ

Активний розвиток сонячної енерґетики привів останніми роками до значного підвищення коефіцієнта корисної дії сонячних елементів (СЕ) за рахунок значного ускладнення їхньої структури та спеціальних модифікацій і просвітлення поверхні фотоперетворювача [1]. При цьому, не зважаючи на те, що для найбільш використовуваних для СЕ базових напівпровідників іще не досягнуто максимальних значень коефіцієнтів ефективності СЕ [2], вартість таких "високоефективних" фотоперетворювачів значно перевищує вартість "звичайних". Подальше збільшення η можливе не тільки завдяки новим технологіям (наприклад, рідинно-фазової епітаксії), застосуванням концентрованого сонячного опромінення, але й за рахунок значного зменшення витрат енергії в СЕ шляхом "вилучення" "зайвих" механізмів рекомбінації за допомогою підбору типу та концентрації леґуючої домішки, товщини шару широкозонного "вікна" [3]. Комп'ютерне моделювання належить до найдешевших методів розв'язання цієї важливої науково-технічної проблеми, оскільки порівняно просто дає змогу визначити найефективніші комбінації величин і типів керуючих параметрів та геометрії СЕ [3,4]. Ця стаття присвячена частковому розв'язанню проблеми оптимізації величин керуючих параметрів сонячного елемента на гетеропереході (ГП)  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ , який, завдяки усій сукупності властивостей GaAs, належить до найбільш вивчених і використовуваних у різних галузях науки та техніки [2,3]. Справді, арсенід галію порівняно з кремнієм має більший коефіцієнт оптичного поглинання та ширину забороненої зони, а також більшу рухливість носіїв заряду, що дає змогу створювати на його основі CE з теоретичним значенням  $\eta \approx 30\%$ в умовах AM1 [2]. Використовувані на сьогодні CE на базі GaAs є різними модифікаціями ГП *n*-GaAs/*p*- $Al_x Ga_{1-x} As$  [1] і мають величину  $\eta \approx 17\%$  в умовах АМ1 [5]. При цьому здебільшого значення молярного складу x вибирають у межах x < 0.2 або x > 0.7[1,6]. Результати проведеного нами моделювання з використанням пакета програм "Solar Cell Simulator" [7] показали, що шляхом вибору величини x, товщини шару  $Al_xGa_{1-x}As$ , типу та концентрації легуючої домішки в арсеніді галію можна забезпечити значення  $\eta \approx 20.2 \div 20.8\%$  для ГП n-GaAs/p-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As при умовах AM1.5 без модифікації структури його поверхні.

### ТЕОРІЯ

Розраховуючи ефективність СЕ структури ГП n-GaAs/p-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, як базову вибирали модель Андерсона для різкого ГП [8]. При цьому приймалося, що "вбудоване" електричне поле локалізовано тільки в області просторового заряду (ОПЗ) поблизу контакту напівпровідників, а зміни концентрацій електронів і дірок при освітленні мають один порядок величин і не приводять до появи об'ємного заряду в усьому елементі. Оскільки тривалість життя нерівноважних електронів (із концентрацією n) і дірок (із концентрацією *p*) здебільшого значно перевищує тривалість діелектричної релаксації [9], то процеси перенесення струму можна звести до дифузії неосновних носіїв у квазінейтральних ділянках за рахунок ґрадієнта їх концентрації. При зроблених наближеннях система вихідних рівнянь для одномірної польової моделі має вигляд [10]:

$$\frac{d^2 p(z)}{dz^2} = \frac{p - p_{n0}}{L_{pW}^2} - \frac{\Phi_0 \alpha_W}{D_{pW}} e^{-\alpha_W z}$$
$$\frac{d^2 n(z)}{dz^2} = \frac{n - n_{p0}}{L_{nA}^2} - \frac{\Phi_0 \alpha_A}{D_{nA}} e^{-\alpha_W W_W} e^{-\alpha_A (z - W_W)}.$$
 (1)

У системі рівнянь (1) уведено такі позначення:  $\Phi_0$  — інтенсивність потоку світлових квантів на поверхні

СЕ,  $\alpha_{W,A}$  — коефіцієнти поглинання відповідної частини елемента (індекс W — для "вікна"  $Al_x Ga_{1-x} As$ , індекс A — для "поглинача" GaAs) для фіксованої довжини хвилі. За початок відліку системи координат z вибрано зовнішню межу "вікна". У цьому випадку ОПЗ обмежена координатами  $W_W - w_n$  та  $W_A - w_p$ , де  $W_W$  та  $W_A$  є товщинами "вікна" та "поглинача" відповідно. Величини  $w_n$  та  $w_p$  є глибинами проникнення ОПЗ в електронну та діркову частини переходу, які залежать від діелектричних проникливостей базових матеріалів, а також концентрацій власних домішок  $N_D$  та  $N_A$  [9]. Інші позначення в (1) загальноприйняті (див., напр., [9,10]).

При врахуванні залежностей  $\alpha_{W,A}$  від довжини хвилі світловий потік розглядали як суперпозицію монохроматичних джерел з інтенсивністю, що відповідає розподілові спектра світла в умовах освітлення AM1.5. [11]. Останнє, своєю чергою, давало змогу проводити розраховувати рекомбінаційні струми в СЕ залежно від концентрації леґуючої домішки  $N_r$ , молярного складу x та відносної товщини "вікна"  $D_W = W_W/D_L$ , де  $D_L = W_W + W_A$  — загальна товщина ГП.

# РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Для забезпечення потрібної точності розрахунків рекомбінаційні струми обчислювали інтеґруванням системи рівнянь (1) за методом Ньютона–Котеса п'ятого порядку [12] по 128 рівновіддаленим точкам у квазінейтральних ділянках "вікна" та "поглинача" й окремо в ОПЗ через великі різниці у протяжностях цих ділянок. Достовірність результатів розрахунків контролювали виконанням вимог, щоб отримані вольт-амперні характеристики СЕ на основі ГП *n*-GaAs/*p*-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, а також розраховані значення струму короткого замикання  $I_{sc}$ , напруги холостого ходу  $U_{oc}$ , фактора заповнення *FF* та ефективності (коефіцієнта корисної дії — ККД)  $\eta$  узгоджувалися з відповідними за вибором величин параметрів системи рівнянь (1) літературними даними.

Числові значення та молярні залежності параметрів *n*-GaAs/*p*-Al<sub>*x*</sub>Ga<sub>1-*x*</sub>As для інтеґрування системи (1) брали з робіт [13–16]. Інтервал зміни значень *x* вибирали в межах 0 < x < 0.4, для якого справедливі використовувані при розрахунках емпіричні співвідношення [16].

Перш ніж навести результати розрахунків, зауважимо, що новизна цієї роботи полягає й у тому, що (на відміну від звичайного випадку низькоомного арсеніду галію [17]) робочим елементом вибрано майже високоомний *n*-GaAs, у якого концентрації власних дефектів  $N_D = 5 \cdot 10^{15}$  см<sup>-3</sup> і  $N_A = 2.3 \cdot 10^{16}$  см<sup>-3</sup>, а леґуюча домішка донорного типу з концентрацією  $N_r$  створює глибокий рекомбінаційний рівень поблизу середини забороненої зони матеріалу. При цьому загальну товщина СЕ визначали рядом умов, а саме: максимально можливим степенем поглинання падаючого світлового потоку та мінімальним темпом рекомбінації в об'ємі напівпровідника, вона повинна бути сумірною з дифузійною довжиною неосновних носіїв (в *n*-GaAs величина  $L_p \approx 30 \div 50 \,\mu\text{m}$  [13]). Згідно з проведеним аналізом, як леґуючу домішку можна вибрати кисень, рівню залягання якого відповідає енергія  $E_c - 0.79 \,\text{eB}$  [14] або  $E_c - 0.69 \,\text{eB}$  [15]. Така велика розбіжність між цими величинами, на думку авторів [18], зумовлена впливом можливих побічних ефектів, які не враховуються при аналізі експериментальних результатів (ґальвано-магнітних, резонансних тощо). Для визначеності при розрахунках приймали, що рівню кисню в *n*-GaAs відповідає енергія  $E_c - 0.69 \,\text{eB}$ .

На рис. 1 показано залежність ККД СЕ *n*-GaAs/*p*-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As від концентрації леґуючої домішки  $N_r$  та молярного складу твердого розчину x, розраховану при T = 300 К. Видно, що характер залежності  $\eta(x)$  зберігається при фіксованих  $N_r < 9 \cdot 10^{13}$  см<sup>-3</sup>, а для  $N_r \ge 1 \cdot 10^{14}$  см<sup>-3</sup> — величина ККД нелінійно зменшується зі зростанням  $N_r$ . При цьому існує критичне значення  $N_r = N_D$ , з перевищенням якого система (1) перестає інтеґруватися. Важливо, що величина  $\eta$  при 0.28 < x < 0.30 та  $N_r < 9 \cdot 10^{13}$  см<sup>-3</sup> сягає 20.8%. Поза цим інтервалом ефективність СЕ нелінійно і досить різко зменшується зі зміною складу x.

Результати розрахунків засвідчують, що при фіксованій величині  $N_r < 9 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$  струм короткого замикання  $I_{sc}$  та фактор заповнення FF плавніше повторюють залежність  $\eta(x)$ , у той час як напруга холостого ходу  $U_{oc}$  СЕ *n*-GaAs/*p*-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As повільно зростає на проміжку  $x = 0.0 \div 0.1$ , а потім виходить на насичення  $U_{oc} = 0.87$  В. При цьому для 0.28 < x < 0.30 розрахункова величина  $FF \approx 0.85$ .



Рис. 1. Залежності коефіцієнта  $\eta$  сонячного елемента n-GaAs/p-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As від x та концентрації центрів рекомбінації  $N_r$ .

Залежності  $\eta$  ГП *n*-GaAs/*p*-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As від відносної товщини "вікна"  $D_W$  та молярного складу x зображено на рис. 2. Видно, що при x < 0.20 і x > 0.31 величина  $\eta$  швидко змінюється зі збільшенням  $D_W$ . При цьому для  $0.1 > D_W > 0.006$  і, зокрема, для товщин "вікна"  $0.37 \,\mu\text{m} > W_W > 0.30 \,\mu\text{m}$  та x = 0.29 величина  $\eta$  приймає максимальне значення в 20.2%. Зауважимо, що саме такі товщини  $W_W$  використовують у сучасних багатошарових СЕ на основі GaAs/AlGaAs [3]. Важливо, що загальна товщина  $D_L$  досліджуваного одинарного ГП при розрахованих оптимальних значеннях  $W_W$  зіставна з дифузійною довжиною дірок у n-GaAs, а тому високоомність базового матеріалу не має критичного впливу на величину ККД цього СЕ.



Рис. 2. Залежності коефіцієнта  $\eta$  сонячного елемента n-GaAs/p-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As від x та  $D_W$ .

Оскільки останніми роками досить інтенсивно досліджують підвищення ефективності роботи СЕ в умовах концентрованого сонячного випромінювання, ми також розрахували залежності параметрів досліджуваного ГП *n*-GaAs/*p*-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As від ступеня концентрації випромінювання. Виявилося, що при T =300 К і концентрації освітленості  $K_c = 1000$  сонячних світил величина  $\eta$  зростає від 20.2% до 27.7%. Зауважимо, що авторам праць [3,19], завдяки оптимізації структури СЕ та спеціальним прозорим полімерним покриттям, удалося отримати рекордне значення  $\eta = 25\%$  для 5-ти шарової структури СЕ *n*-GaAs/*p*-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As при T = 300 K і  $K_c = 1000$ . Подібні результати наведено також у працях [1,20].

#### ВИСНОВОК

У статті показано, що коефіцієнт корисної дії СЕ n-GaAs/p-Al $_x$ Ga $_{1-x}$ As в умовах AM1.5 можна без модифікації поверхні фотоперетворювача довести до граничного значення  $\eta = 20.2 - 20.8\%$ , якщо як робочий елемент на відміну від традиційного підходу, використовувати високоомний n-GaAs із концентрацією власних дефектів  $N_D \approx 5 \cdot 10^{15} \,\mathrm{cm}^{-3}$  і  $N_A \approx$  $2.3 \cdot 10^{16} \,\mathrm{cm}^{-3}$  при цілеспрямованому леґуванні домішкою донорного типу, що створює глибокий рекомбінаційний рівень поблизу середини забороненої зони матеріалу, наприклад, киснем. Установлено допустимі межі зміни молярного вмісту алюмінію x, товщини шару  $Al_x Ga_{1-x} As$  та концентрації леґуючої домішки кисню, які для CE n-GaAs/p-Al $_x$ Ga $_{1-x}$ As на основі високоомного GaAs забезпечують поліпшену ефективність його фотоперетворення. Цей результат важливий для розробників сонячних елементів новітнього покоління з підвищеними значеннями експлуатаційних параметрів. Продемонстровано також, що створений відповідно до сьогоднішніх потреб сонячної енерґетики програмний продукт [7] дає змогу моделювати властивості СЕ при наявності концентрованого сонячного випромінювання, отримуючи результати, адекватні експериментальним даним.

## подяки

Автори висловлюють вдячність проф. П. М. Горлею за цінні консультації та плідне обговорення результатів роботи.

- M. A. Green *et al.*, Prog. Photovolt. Res.Appl. **15**, 425 (2007).
- [2] Е. А. Андрюшин, А. П. Силин, Усп. физ. наук 161, 129 (1991).
- [3] Ж. И. Алферов, В. М. Андреев, В. Д. Румянцев, Физ. техн. полупр. 38, 937 (2004).
- [4] А. В. Савченко, А. П. Горбань, В. П. Костылев, А. А. Серба, И. О. Соколовский, Физ. техн. полупр. 41, 1231 (2007).
- [5] Е. Б. Заверюхина, Н. Н. Заверюхина, Л. Н. Лезилова, Б. Н. Заверюхин, В. В. Володарский, Р. А. Муминов, Письма журн. тех. физ. **31**, 54 (2005).
- [6] Ж. И. Алферов, В. М. Андреев, Д. З. Гарбузов, В. Р. Ларионов, В. Д. Румянцев, В. Б. Халфин, Физ. техн. полупр. 11, 1765 (1977).
- [7] П. П. Горлей, О. А. Червінський, Сенсорна електроніка та мікросистемні технології 4, 16 (2007).
- [8] A. Farenbruch, R. Bube, Fundamentals of Solar Cells

(Academic Press, New York, 1983).

- [9] S. M. Sze, Modern Semiconductor Device Physics (J.Willey & Sons, New York, 1998).
- [10] В. В. Сердюк, Физика солнечных элементов (Логос, Одесса, 1994).
- [11] R. Hulstorm, R. Bird, C. Riodan, Solar Cells. 15, 365 (1985).
- [12] T. E. Shoup, Applied numerical methods for the microcomputer (Prentice Hall, 1984).
- [13] http://www.ioffe.rssi.ru/SVA/NSM/Semicond/ AlGaAs/index.html
- [14] А. Милнс, Примеси с глубокими уровнями в полупроводниках (Мир, Москва, 1977).
- [15] В. И. Фистуль, Атомы легирующих примесей в полупроводниках (состояние и поведение) (Физ.-мат. литра, Москва, 2004).
- [16] D. E. Aspnes, Surface Sci. 132, 406 (1983).
- [17] Б. Л. Шарма, Р. К. Пурохит, Полупроводниковые ге-

теропереходы (Сов. радио, Москва,1979).

[18] М. В. Симакин, В. В. Остробородова, В. С. Вавилов, Физ. техн. полупр. 11, 1738 (1977).

[19] В. М. Андреев, В. П. Хвостиков, В. Р. Ларионов,

В. Д. Румянцев, Е. В. Палеева, М. З. Шварц, Физ.

техн. полупр. **33**, 1070 (1999).

[20] H. F. MacMillan, H. C. Hamaker, N. R. Kaminar, M. S. Kuryla, M. Ladle Ristow, D. D. Liu, G. F. Virshup, in 20th IEEE Photovoltaic Specialist Conference (1988), p. 462.

# OPTIMIZATION OF HETEROJUNCTION SOLAR CELL n-GaAs/p-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As

P. P. Horley<sup>1</sup>, O. A. Chervinsky<sup>1</sup>, Yu. V. Vorobiev<sup>2</sup>, J. Gonzalez-Hernandez<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Yuri Fedkovych Chernivtsi National University, 2 Kotsyubynsky Str., 58012 Chernivtsi, Ukraine

<sup>2</sup> CINVESTAV Unidad Queretaro, Libramiento Norponiente 2000,76230 Queretaro, Mexico

<sup>3</sup>CIMAV, Miguel de Cervantes 120, 31109 Chihuahua, Mexico

The paper presents some results of numerical studies concerning carrier transport processes in the heterojunction solar cell n-GaAs/p-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. The authors optimized photovoltaic efficiency of the modeled device as a function of aluminum molar content x, window layer thickness, type and concentration of the doping impurity, which allowed to determine the ranges of control parameters required to ensure photovoltaic efficiency of  $20.2 \div 20.8\%$  under normal conditions for the cell without special surface modifications.