

Анализ эффективности солнечных элементов с промежуточной зоной на основе суперкристаллов из квантовых точек*

С.Хешмати, С.Голмохаммади, К.Абеди, Х.Талейб

Исследуется влияние ширины квантовых точек (КТ) и смещения зоны проводимости (ЗП) КТ на эффективность солнечных элементов с промежуточной зоной (ПЗ) от КТ. Результаты моделирования показывают, что с увеличением смещения ЗП КТ и с уменьшением ширины КТ достигается максимальная эффективность.

Ключевые слова: ширина барьера, эффективность, солнечный элемент с промежуточной зоной от квантовых точек, смещение зоны проводимости квантовых точек, ширина квантовых точек.

1. Введение

Солнечные элементы с промежуточной зоной (ПЗ) от квантовых точек (КТ) являются новейшим типом солнечных элементов, позволяющим достичь максимальной эффективности. Возможность реализации недорогих фотоэлектрических источников энергии зависит от развития недорогих и эффективных солнечных батарей. Производительность солнечного элемента с ПЗ зависит от электрических и оптических свойств материала зоны. Они определяются величиной электронной зоны, которая локализована между зоной проводимости (ЗП) и валентной зоной (ВЗ) запрещенной зоны обычного полупроводника. В [1–3] был предложен солнечный элемент с ПЗ на основе технологии КТ.

Структура квантовых точек имеет большое значение для достижения максимальной эффективности. Эффективность преобразования энергии является фундаментальным параметром в технологии фотоэлектрических солнечных элементов [4]. Она определяется как

$$\eta = FV_{OC}J_{SC}/P_{in}, \quad (1)$$

где F – фактор заполнения; V_{OC} – напряжение холостого хода; J_{SC} – плотность тока короткого замыкания; P_{in} – мощность, падающая на единицу площади [4].

Идеальная производительность солнечного элемента реализуется, когда энергетические щели, отделяющие ПЗ от зоны проводимости и валентной зоны, составляют около 0.71 и 1.24 эВ соответственно [5–6] (рис. 1). Расположение

* Перевод с англ. В.В.Шувалова.

S.Heshmati. Department of Engineering, Islamic Azad University, Buin Branch, Iran

S.Golmohammadi. Nanophotonics Group, School of Engineering-Emerging Technologies, University of Tabriz, Tabriz 5166614761, Iran; e-mail: sgolmohammadi@tabrizu.ac.ir

K.Abedi, H.Taleb. Department of Electrical Engineering, Faculty of Electrical and Computer Engineering, Shahid Beheshti University, G. C. 1983963113, Tehran, Iran

Поступила в редакцию 4 июля 2012 г.

щелей может быть обратным, т. е. ПЗ может быть ближе к ВЗ, чем к ЗП. С другой стороны, ПЗ должна быть частично заполнена электронами так, чтобы существовали пустые состояния для получения электронов, накачиваемых из ВЗ, а также заполненные электронами состояния для обеспечения электронов, накачиваемых в ЗП [7].

Полупроводник с одной энергетической щелью поглощает только фотоны с энергиями выше порога – ширины запрещенной зоны E_g . Следовательно, лишь эти фотоны дают вклад в производимый фототок. Однако когда имеется наполовину заполненная ПЗ, два фотона с энергиями меньше E_g могут перекачивать электрон из ВЗ в СП. Первый фотон с энергией, большей E_1 (см. рис. 1), будет перекачивать электрон из ВЗ в ПЗ, имеющую пустые состояния для получения электрона, а следующий фотон с энергией, большей E_2 , будет перекачивать электрон из ПЗ с заполненными электронами состояниями в ЗП [8]. В этом методе фототок больше тока, который может быть получен в полупроводниках с одной энергетической щелью [5–7]. В радиационном пределе предельная эффективность солнечных элементов с ПЗ достигает 63.2% [5, 6], что существенно выше, чем у элемента с одной энергетической щелью (40.7%) или у элемента с двумя переходами (55.4%), также работающих на радиационном пределе. В настоящей статье исследуется соотношение между различными параметрами КТ, такими как смещение ЗП, ширины зоны и барьера КТ, для достижения максимальной эффективности.

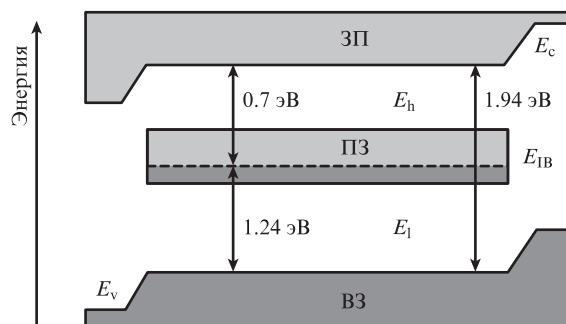


Рис. 1. ПЗ КТ с оптимальной запрещенной зоной.

2. Анализ одиночной и связанных КТ и их соотношение с ПЗ

С целью изучения эффективности солнечных элементов с ПЗ КТ исследуются два случая:

– КТ используются как отдельные объекты и не связаны с другими точками;

– КТ связаны с другими точками так, что перекрытие между их волновыми функциями формирует минизону, которая выступает в качестве соответствующей промежуточной зоны [3].

Волновые функции единичной КТ и ансамбля связанных КТ показаны на рис.2.

В нашем моделировании используется структура GaAs_{0.98}Sb_{0.02}/InAs_{0.49}P_{0.51} (барьер/КТ) с подложкой из AlAs. Ширина запрещенной зоны материала барьера 1.48 эВ, а запрещенной зоны КТ 0.91 эВ. Эффективная масса электрона в материале барьера 0.066m₀, а в КТ 0.039m₀ (m₀ – масса покоя электрона). В этой системе материалов разность энергий между ширинами зон проводимости GaAs_{0.98}Sb_{0.02} и InAs_{0.49}P_{0.51} составляет ~0.57 эВ [9].

Расчет энергии зоны проводимости КТ с использованием подхода эффективной массы. Энергию ЗП для идеализированной версии трехмерной сверхрешетки кремниевых КТ (рис.3) можно рассчитать с использованием подхода эффективной массы [10]. Движение носителя в материале системы при этом подходе определяется уравнением эффективной массы [10]

$$\frac{\hbar^2}{2} \nabla \left[\frac{1}{m^*(r)} \nabla \varphi(r) \right] + [E - V(r)] \varphi(r) = 0, \quad (2)$$

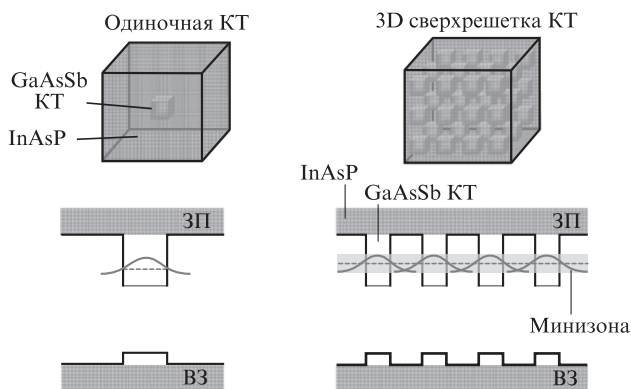


Рис.2. Одиночная и связанные КТ.

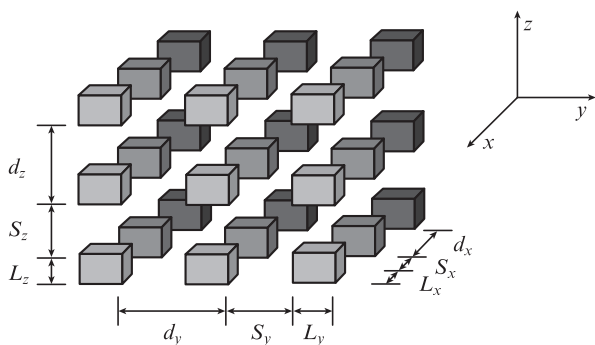


Рис.3. Сверхрешетка КТ [10] с регулярно расположенным массивом одинаковых по размеру кубических КТ в диэлектрической матрице.

где $m^*(r)$ – тензор эффективной массы; E – полная энергия; $\varphi(r)$ – огибающая волновой функции электрона; $V(r)$ – микроскопический потенциал, который «видит» электрон и который считается суммой трех независимых периодических функций:

$$V(r) = V_x(r) + V_y(r) + V_z(r). \quad (3)$$

Следовательно, трехмерное уравнение эффективной массы в случае изотропной эффективной массы разделяется и сводится к трем одномерным уравнениям сверхрешеток квантовых ям [11]. В результате решение уравнения (2) может быть выражено в терминах решений простой одномерной модели Кронига–Пенни [11]. В случае изотропной эффективной массы соответствующие уравнения определены как

$$\cos(q_i d_i) = \cos(k_i^D L_i) \cos(k_i^B S_i) - \frac{1}{2} \times \left(\frac{k_i^B m_{Di}^*}{k_i^D m_{Bi}^*} + \frac{k_i^D m_{Bi}^*}{k_i^B m_{Di}^*} \right) \sin(k_i^D L_i) \sin(k_i^B S_i), \text{ если } E_i \geq V_0, \quad (4)$$

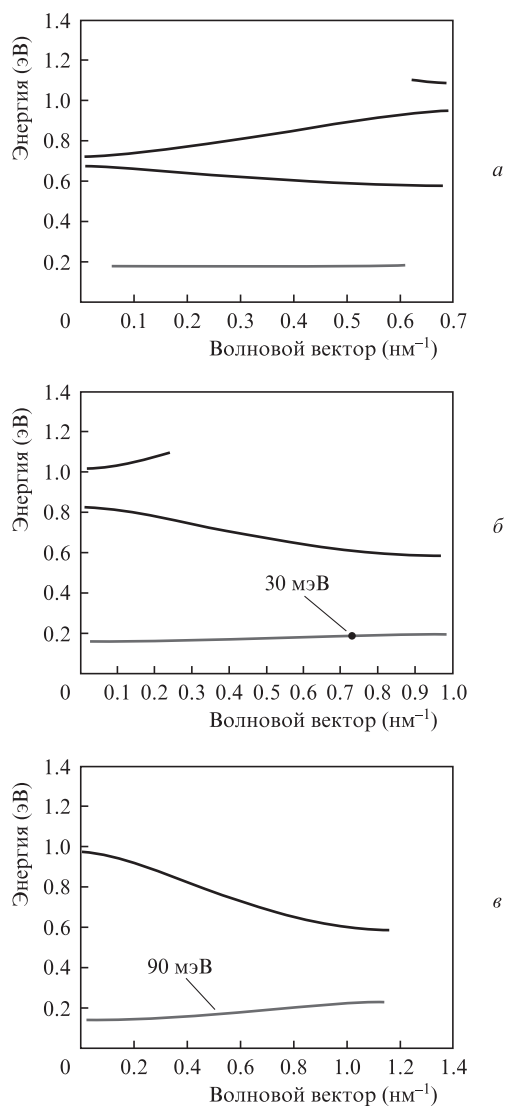


Рис.4. Диаграммы дисперсии энергии от волновых векторов электронов при ширине барьера и ширине ПЗ 6 нм и 0 (а), 3 нм и 30 мЭВ (б), 2 нм и 90 мЭВ (е); во всех случаях ширина КТ 4 нм.

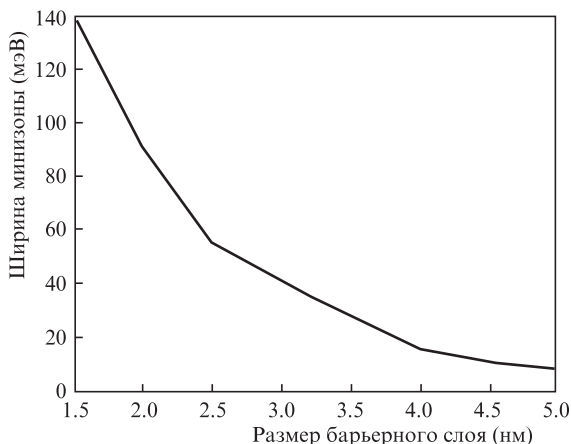


Рис.5. Зависимость ширины ПЗ (минизоны) барьера от размера барьерного слоя.

$$\cos(q_i d_i) = \cos(k_i^D L_i) \cosh(k_i^B S_i) - \frac{1}{2}$$

$$\times \left(\frac{k_i^B m_{Di}^*}{k_i^D m_{Bi}^*} + \frac{k_i^D m_{Bi}^*}{k_i^B m_{Di}^*} \right) \sin(k_i^D L_i) \sinh(k_i^B S_i), \text{ если } 0 < E_i < V_0. \quad (5)$$

В уравнениях (4), (5) $k_i^B = \sqrt{2m_{Bi}^*|E_i - V_0|/\hbar}$; m_{Bi}^* – эффективная масса в диэлектрической матрице; $k_i^D = \sqrt{2m_{Di}^*|E_i|/\hbar}$; m_{Di}^* – эффективная масса КТ; V_0 – напряжение смещения; q_i – компонента волнового вектора; i – координата x, y, z [11]; дисперсионное соотношение для энергии получается из

$$E(q) = E_x(q) + E_y(q) + E_z(q). \quad (6)$$

С использованием модели Кронига–Пенни [11, 12], при фиксированной ширине КТ (4 нм) для трех значений ширины барьерного слоя получены диаграммы дисперсии – зависимости энергии от волнового вектора электрона (рис.4). При этом ПЗ характеризуется первой зоной (электронная волновая функция). Нет перекрытия между волновыми функциями КТ и, следовательно, нет никакого уширения ПЗ (рис.4,а). Наименьшее расстояние между КТ приводит к тому, что энергетические зоны или электронные волновые функции становятся связанными друг с другом и формируется минизона (рис.4,б, в).

Ширина ПЗ или минизоны уменьшается с ростом ширины барьера (рис.5).

3. Соотношение между смещением ЗП КТ и шириной КТ

Для достижения максимальной эффективности исследуем соотношение между смещением ЗП КТ и шириной квантовых точек.

Правила дизайна для ПЗ КТ. Правила дизайна для выбора триады материалов с ПЗ КТ (КТ/барьер/подложка) таковы [5, 9, 13]:

- материал барьера должен иметь ширину запрещенной зоны в интервале 1.43–2.56 эВ;
- смещение валентной зоны должно быть пренебрежимо мало;
- должен использоваться прямозонный материал, поскольку такие материалы имеют больший коэффициент поглощения;
- смещение между краями ЗП (E_{CB}) должно быть больше $0.48E_{CB} - 0.22$;

– среднее расстояние между самоорганизующимися КТ должно быть таким, чтобы перекрытие между промежуточной зоной, ЗП и ВЗ было запрещено.

Анализ материалов с различными ширинами запрещенной зоны. Мы изучим три различных материала в дизайне ПЗ КТ: InAsP/GaAsSb/AlAs, GaInAs/GaAsSb/AlAs и AlInAs/AlGaAs/AlAs.

Для InAsP/GaAsSb/AlAs в качестве материала барьера используется $GaAs_xSb_{1-x}$ с мольной долей $x = 0.98$. Ширина запрещенной зоны при такой мольной доле x для этого материала равна 1.48 эВ [11]. Материалом КТ является $InAs_{1-x}P_x$ с различными мольными долями. Ширина запрещенной зоны материала КТ [14]

$$E_g = 0.36 + 0.891x + 0.101x^2. \quad (7)$$

Зависимость ширины запрещенной зоны и смещения энергии ЗП от мольной доли x показаны на рис.6.

В табл.1 приведены расчетные значения эффективности при различных мольных долях, смещениях ЗП КТ, ширинах КТ и ширинах барьера.

Видно, что с увеличением мольной доли эффективность и смещение ЗП уменьшаются. Максимальная эффективность достигается при ширине КТ 3.8 нм и ширине материала барьера 2.5 нм.

Для GaInAs/GaAsSb/AlAs материал барьера $GaAs_xSb_{1-x}$ тоже имеет мольную долю $x = 0.98$. В качестве материала КТ рассматривается $GaIn_{1-x}As_x$ с различными мольными долями. Ширина запрещенной зоны материала КТ [14]

$$E_g = 0.36 + 1.064x. \quad (8)$$

Табл.1. Эффективность при различных параметрах КТ для структуры InAsP/GaAsSb/AlAs.

Мольная доля	Смещение ЗП (эВ)	Ширина КТ (нм)	Ширина барьера (нм)	Эффективность (%)
0.45	0.7	3.8	2	51.50
0.45	0.7	3.8	2.5	52.34
0.5	0.65	3.9	2	50.99
0.5	0.65	3.9	2.5	51.73
0.55	0.6	3.9	2	49.97
0.55	0.6	3.9	2.5	50.58
0.6	0.55	4	2.5	49.47
0.7	0.45	4.2	2.5	46.51

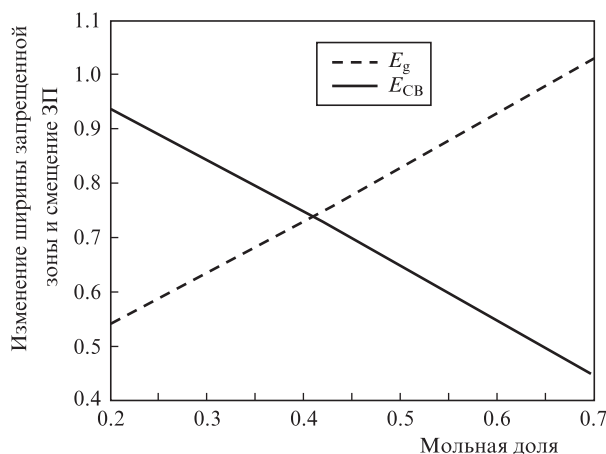


Рис.6. Зависимость ширины запрещенной зоны и смещения ЗП от мольной доли x для InAsP/GaAsSb/AlAs.

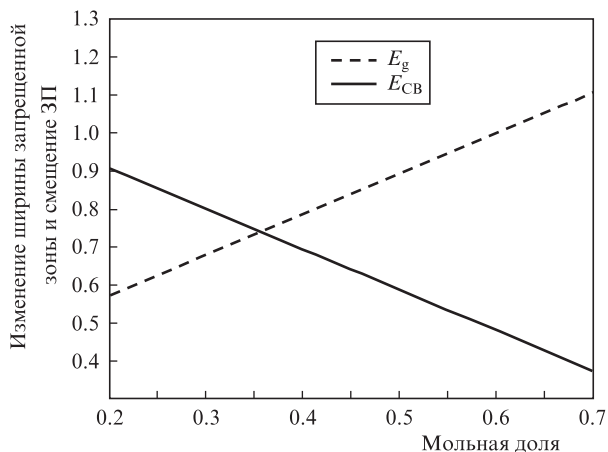


Рис.7. Зависимость ширины запрещенной зоны и смещения ЗП квантовой точки от мольной доли для GaInAs/GaAsSb/AlAs.

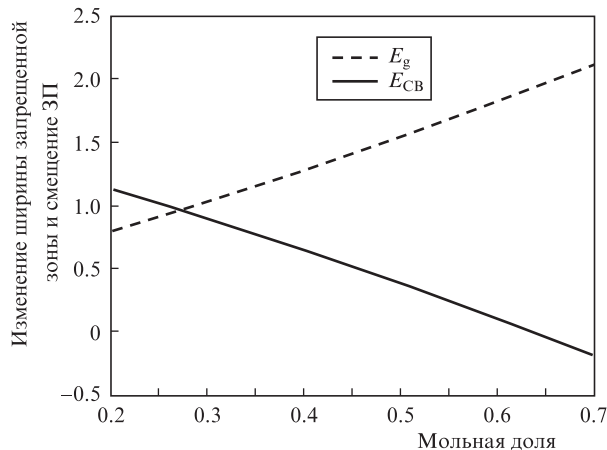


Рис.8. Зависимость ширины запрещенной зоны и смещения ЗП от мольной доли для AlInAs/AlGaAs/AlAs.

Зависимости ширины запрещенной зоны и смещения ЗП КТ от мольной доли представлены на рис.7.

В табл.2 показано, что смещение ЗП уменьшается с ростом x ; кроме того, с уменьшением смещения ЗП и увеличением ширины КТ снижается эффективность. Таким образом, максимальная эффективность достигается при больших значениях смещения ЗП и малой ширине КТ.

Для AlInAs/AlGaAs/AlAs в качестве материала барьера служит $Al_xGa_{1-x}As$ с мольной долей $x = 0.4$. Ширина запрещенной зоны для этого материала [14]

$$E_g = 1.424 + 1.247x, \tag{9}$$

т.е. $E_g = 1.92$ эВ при $x = 0.4$. Материалом КТ в этой системе считается $Al_xIn_{1-x}As$, ширина запрещенной зоны для него

$$E_g = 0.36 + 2.012x + 0.698x^2. \tag{10}$$

Табл.2. Эффективность при различных параметрах КТ для структуры GaInAs/GaAsSb/AlAs.

Мольная доля	Смещение ЗП (эВ)	Ширина КТ (нм)	Ширина барьера (нм)	Эффективность (%)
0.35	0.75	3.4	2.5	51.92
0.4	0.7	3.9	2.5	52.30
0.5	0.59	4.2	2.5	50.60
0.6	0.49	4.3	2.5	47.87
0.7	0.38	4.5	2.5	44.54

Табл.3. Эффективность при различных параметрах КТ для структуры AlInAs/AlGaAs/AlAs.

Мольная доля	Смещение ЗП (эВ)	Ширина КТ (нм)	Ширина барьера (нм)	Эффективность (%)
0.3	0.9	3.6	2.5	55.98
0.35	0.78	3.7	2.5	52.14
0.4	0.65	3.9	2.5	47.58
0.45	0.52	4.2	2.5	43.21
0.5	0.38	4.8	2.5	38.81

Зависимости ширины запрещенной зоны и смещения ЗП КТ от x показаны на рис.8.

Из табл.3 следует, что смещение ЗП уменьшается с ростом мольной доли. Максимальная эффективность достигается при смещении ЗП 0.9 эВ и ширине КТ 3.6 нм.

4. Выводы

Соотношение между смещением ЗП КТ и шириной КТ имеет большое значение для создания солнечных элементов с промежуточной зоной от квантовых точек. Мы продемонстрировали, что для достижения максимальной эффективности смещение ЗП КТ должно быть увеличено, а ширина КТ должна быть уменьшена. Хотя увеличение смещения ЗП повышает эффективность, для достижения максимальной эффективности оно должно быть таким, чтобы по отношению к оптимальной ширине квантовых точек энергетические переходы находились в оптимальном положении. И наконец, соотношения между смещением ЗП КТ и шириной КТ играют важную роль в выборе материала барьера и материала квантовых точек.

- Marti A., Cuadra L., Luque A. *Proc. Conf. Sobre Dispositivos Electrónicos 1999* (Madrid, 1999, pp363–366).
- Green M.A. *Mater. Sci. Eng.*, **74**, 118 (2000).
- Marti A., Cuadra L., Luque A. *Proc. 28 IEEE Photovoltaics Specialists Conf.* (New York: IEEE, 2000, pp940–943).
- Shao Q., Balandin A. *Appl. Phys. Lett.*, **91**, 163503 (2007).
- Luque A., Marti A. *Phys. Rev. Lett.*, **78** (26), 5014 (1997).
- Luque A., Marti A. *Prog. Photovoltaics Res. Appl.*, **9** (2), 73 (2001).
- Marti A. et al. *IEEE Trans. Electron. Devices*, **48**, 2394 (2001).
- Lopez N., Marti A., Luque A. *J. Sol. Energy Eng.*, **129** (2), 319 (2007).
- Levy M.Y., Honsberg C., Marti A., Luque A. *Proc. 31 IEEE Photovoltaic Specialists Conf.* (New Jersey: IEEE, 2005, pp90–93).
- Jiang Chu Wei, Green M.A. *J. Appl. Phys.*, **99**, 114902 (2006).
- Lazarenkova O., Balandin A. *J. Appl. Phys.*, **89**, 5509 (2001).
- Aguinaldo R. *Master Sci. Thes.* (Rochester: Rochester Institute of Technology, 2008).
- Jenks S., Gilmore R. *J. Renewable Sustainable Energy*, **2**, 013111 (2010).
- Vurgaftman I. *J. Appl. Phys.*, **89**, 5815 (2001).