

УДК 535.015

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ
НАНОГЕТЕРОСТРУКТУР GAP/Si И $AL_xGA_{1-x}AS/Si$**

Солдатов В.В.студентка 2 курса магистратуры СКФУ
г. Ставрополь, РФ

UDC 535.015

**MODELING OF PHOTOELECTRIC CONVERTERS BASED ON NANOHETEROSTRUCTURES
 GAP/Si И $AL_xGA_{1-x}AS/Si$**

Soldatov V.V.student of the North Caucasian Federal University
Stavropol, Russia**АННОТАЦИЯ**

В данной работе были исследованы свойства фотоэлектрических преобразователей на основе наногетероструктур GaP/Si . Установлено, что на границе раздела $p-GaP/n-Si$ из-за существенного разрыва валентных зон формируется потенциальный барьер, высота которого фактически равна разрыву зон (0,859 эВ). Из-за ограничения транспорта дырок фотоэлектрические преобразователи на основе $p-GaP/n-Si$ имеют понижение значения тока короткого замыкания, и как следствие, имеет малую эффективность. Для фотоэлектрических преобразователей на основе $n-GaP/p-Si$ эффективность достигает значения 19%, что также является свидетельством отсутствия ограничения транспорта носителей заряда. На основе моделирования сделать вывод, что только наногетероструктуры $n-GaP/p-Si$ пригодны для формирования фотоэлектрических преобразователей.

ANNOTATION

In this paper, we studied the properties of photoelectric converters based on GaP / Si nanoheterostructures. It was found that, at the $p-GaP / n-Si$ interface, due to a substantial gap in the valence bands, a potential barrier is formed whose height is actually equal to the band gap (0.859 eV). Due to the limitation of hole transport, $p-GaP / n-Si$ based photoelectric converters have a lower short-circuit current and, as a result, have low efficiency. For $n-GaP / p-Si$ based photovoltaic converters, the efficiency reaches 19%, which is also evidence of the absence of carrier transport restrictions. Based on the simulation, we conclude that only $n-GaP / p-Si$ nanoheterostructures are suitable for the formation of photoelectric converters.

Ключевые слова: Наногетероструктуры, фотоэлектрические преобразователи, моделирование, AFORS-HET.**Key words:** Nanoheterostructures, photoelectric converters, modeling, AFORS-HET.**Актуальность работы**

В связи с угрозой изменения климата большое внимание по всему миру уделяется разработке и внедрению энергетических станций, применяющих технологии возобновляемых источников энергии и в частности, в солнечную энергию.

Одним из перспективных способом снижения себестоимости и минимизации затрат на производство ФЭП может являться применение новых технологических подходов и новых конструкций при изготовлении ФЭП. В последние годы увеличивается количество работ, посвященных получению и исследованию на наногетероструктур A^3B^5/Si для применения их в качестве основы для высокоэффективных ФЭП.

Наиболее подходящими гетеропарами для применения их в качестве ФЭП являются GaP/Si (так как GaP наиболее близок к параметру кристаллической решетки Si).

Таким образом, актуальной задачей является моделирование ФЭП на основе наногетероструктур GaP/Si и исследование электрических свойств.

Цель работы

Цель работы: провести моделирование фотоэлектрических преобразователей на основе наногетероструктур GaP/Si .

Для достижения поставленной цели в работе решались следующие задачи:

Моделирование фотоэлектрических преобразователей на основе наногетероструктур $p-GaP/n-Si$ и $n-GaP/p-Si$;

Метод моделирования произвольный набор различных полупроводниковых слоев. Программное обеспечение решает уравнение Пуассона и уравнения непрерывности, основанные на статистике Максвелла-Больцмана [4, с 2-4].

При построении модели ФЭП наногетероструктур *GaP/Si* в программе *AFORS-HEET v2.5* были использованы следующие условия: измерения ВАХ происходило при постоянном токе (DC); освещение фронтальное (*spectral*) $AM1,5$; температура ФЭП – 300 К; также учитывались потери на затенение сеткой фронтальных омических – 8 %; количество шагов для вычисления ВАХ находилось диапазоне от 0 до

1,2В составляло 12; спектральная зависимость внешнего квантового выхода изучалась в диапазоне длин волн от 100 до 1400 нм.

Результаты моделирования фотоэлектрических преобразователей на основе наногетероструктур *p-GaP/n-Si* и *n-GaP/p-Si*.

Исходные параметры для моделирования СЭ приведены в таблице 1.

Таблица 1

Исходные параметры для моделирования ФЭП на основе *p-GaP/n-Si*

Параметр	<i>p-GaP</i> [38]	<i>n-Si</i> [17]
<i>Dielectric constant</i> , [eV] (диэлектрическая постоянная), E_c [эВ]	11,1	11.9
<i>Electron affinity chi</i> , [eV] (сродство электронов), [эВ]	3.72	4.05-3.91
E_g (<i>bandgap</i>), [eV] (ширина запрещенной зоны), [эВ]	2.26	1.124
E_g (<i>opt. bandgap</i>), [eV] (оптическая ширина запрещенной зоны), [эВ]	2.26	1.124
N_c (<i>effective conduction band density</i>), [cm^{-3}] плотность состояний зоны проводимости, [cm^{-3}]	1.749×10^{19}	2.843×10^{19}
N_v (<i>effective valence band density</i>), [cm^{-3}] плотность состояний валентной зоны, [cm^{-3}]	1.852×10^{19}	2.682×10^{19}
μ_n (<i>effective electron mobility</i>), [cm^2/Vs] (подвижность электронов), [cm^2/Vc]	250	1400
μ_p (<i>effective hole mobility</i>), [cm^2/Vs] (подвижность дырок), [cm^2/Vc]	150	450
N_a (<i>doping concentration acceptors</i>), [cm^{-3}] (акцепторная примесная концентрация), [cm^{-3}]	0	1.0×10^{15}
N_d (<i>doping concentration donators</i>), [cm^{-3}] (донорная примесная концентрация), [cm^{-3}]	1.0×10^{19}	0
v_e (<i>electron thermal velocity</i>), [cm/s] (тепловая скорость электронов), [cm/c]	2.0×10^5	2.3×10^5
v_h (<i>hole thermal velocity</i>), [cm/s] (тепловая скорость дырок), [cm/c]	1.3×10^5	1.65×10^5
ρ (<i>layer density</i>), [$g \cdot cm^{-3}$] (плотность слоя), [$г \cdot cm^3$]	4.14	2.329
rae (<i>auger electron recombination coefficient</i>) [cm^6/s] (коэффициент рекомбинации Оже-электронов), [cm^6/c]	10^{-30}	1.4×10^{-30}

Для исследования влияния величины ΔE_v на электрические свойства ФЭП на основе наногетероструктур *p-GaP/n-Si* были рассчитаны

значения ΔE_v при значениях сродства к электрону *Si* от 3,9 до 4,05 эВ с шагом 0,05 эВ, которые представлены в таблице 2.

Таблица 2

Зависимость значения ΔE_v от сродства к электрону для наногетероструктуры *p-GaP/n-Si*

χ_s , эВ	4.05	4.0	3.95	3.90
ΔE_v , эВ	0.8	0.8598	0.909	0.95

Полученные ВАХ приведены на рисунке 1.

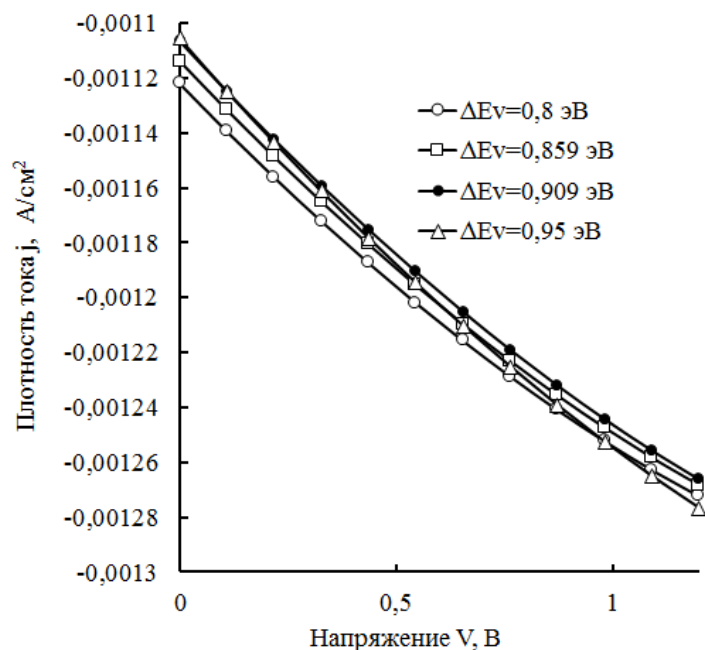


Рисунок 1 – Вольтамперная характеристика ФЭП на основе наногетероструктуры *p-GaP/n-Si* при $AM1.5$

Таблица 3

Результаты моделирования ФЭП на основе *p-GaP/n-Si*

ΔE_v , эВ	V_{oc} , мВ	J_{sc} , mA/cm^2
0,8	726, 5	-0,5078
0,859	775, 8	-0,5088
0,909	825,6	-0,5124
0,95	867	-0,5156

Как видно из зависимостей, изображенных на рисунке 1 и результатов моделирования, представленных в таблице 3, что ограничение переноса носителей заряда из *n*- области в *p*- наногетероструктуры приводит к катастрофическому снижению значению тока короткого замыкания, и соответственно эффективности ФЭП η .

Исходные параметры для моделирования ФЭП на основе наногетероструктуры *n-GaP/p-Si* приведены таблице 4.

На рисунке 2 изображены: зонная диаграмма (рисунок 2,а), зависимости плотности тока (рисунок 2,б), концентрации носителей заряда (рисунок 2,в), скорости генерации рекомбинации (рисунок 2,г) от толщины наногетероструктуры *n-GaP/p-Si*.

Таблица 4

Исходные параметры для моделирования ФЭП на основе *n-GaP/p-Si*

Параметр	<i>n-GaP</i> [38]	<i>p-Si</i> [39]
<i>Dielectric constant</i> (диэлектрическая постоянная), E_c [эВ]	11,1	11.9
<i>Electron affinity</i> χ , [eV] (сродство электронов), [эВ]	4.0 - 4.15	4
E_g (<i>bandgap</i>), [eV] (ширина запрещенной зоны), [эВ]	2.26	1.124
E_g (<i>opt. bandgap</i>), [eV] (оптическая ширина запрещенной зоны), [эВ]	2.26	1.124
N_c (<i>effective conduction band density</i>), [cm^{-3}] плотность состояний зоны проводимости, [cm^{-3}]	1.749×10^{19}	3.2×10^{19}
N_v (<i>effective valence band density</i>), [cm^{-3}] плотность состояний валентной зоны, [cm^{-3}]	1.852×10^{19}	1.8×10^{19}
μ_n (<i>effective electron mobility</i>), [cm^2/Vs] (подвижность электронов), [cm^2/Vc]	250	1400

μ_p (effective hole mobility), [cm^2/Vs] (подвижность дырок), [cm^2/Vc]	150	450
N_a (doping concentration acceptors), [cm^{-3}] (акцепторная примесная концентрация), [cm^{-3}]	1.0×10^{19}	0
N_d (doping concentration donators), [cm^{-3}] (донорная примесная концентрация), [cm^{-3}]	0	1.0×10^{15}
v_e (electron thermal velocity), [cm/s] (тепловая скорость электронов), [cm/c]	2.0×10^5	2.3×10^5
v_h (hole thermal velocity), [cm/s] (тепловая скорость дырок), [cm/c]	1.3×10^5	1.65×10^5
ρ (layer density), [$g \cdot cm^{-3}$] (плотность слоя), [$\Gamma \cdot cm^3$]	4.14	2.329
r_{ae} (auger electron recombination coefficient) [cm^6/s] (коэффициент рекомбинации Оже-электронов), [cm^6/c]	10^{-30}	1.4×10^{-30}

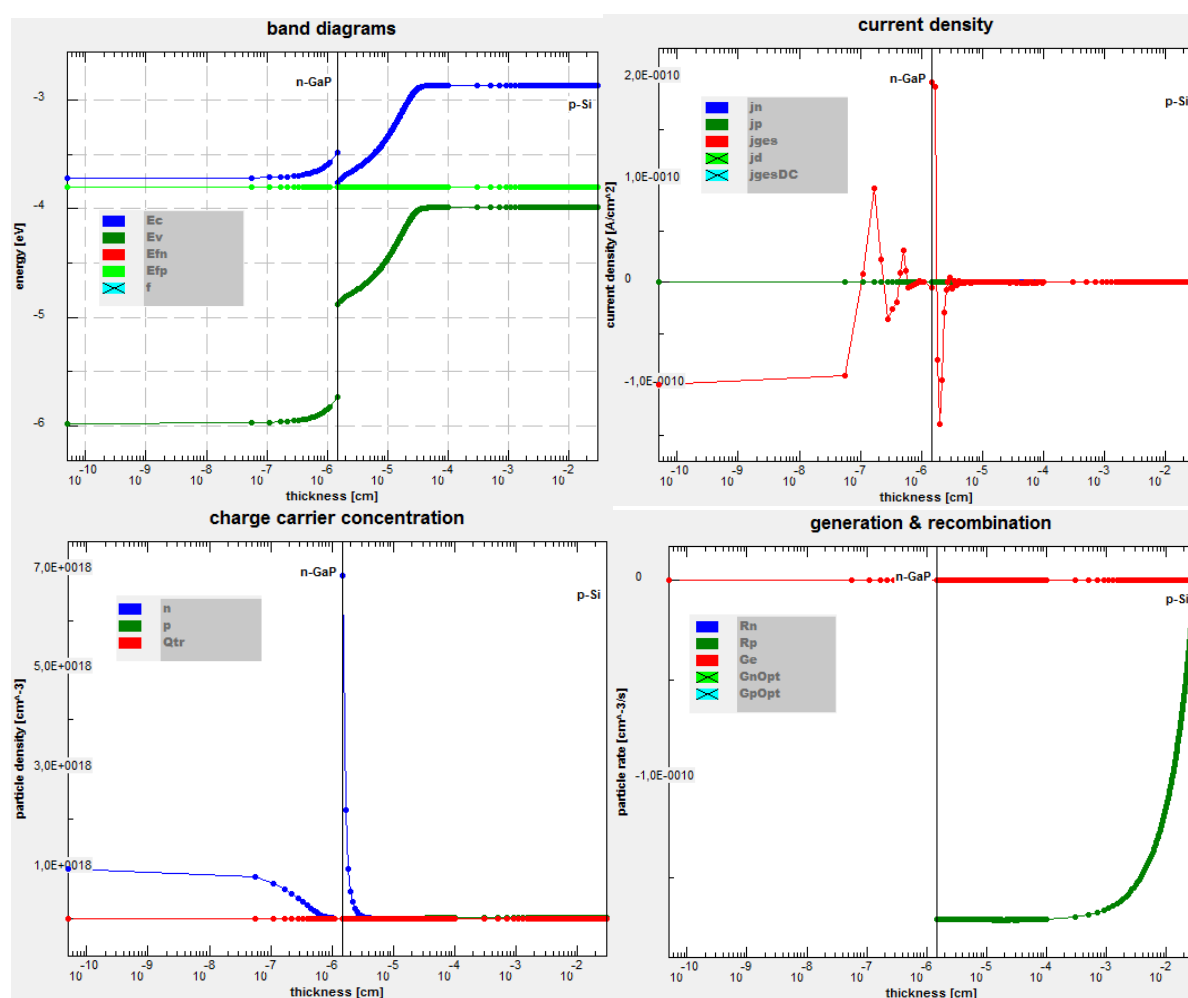


Рисунок 2 – Зонная диаграмма (а), зависимость плотности тока (б), зависимость концентрации носителей заряда (в), зависимость скорости генерации - рекомбинации (г) от толщины наногетероструктуры n-GaP/p-Si.

В отличие от зонной диаграммы p-GaP/n-Si разрыв зоны проводимости не так высок и не препятствует транспорту носителей заряда (электронов). Диапазон значений разрыва зоны проводимости ΔE_C для перехода n-GaP/p-Si установим в пределах от 0,2 до 0,35 эВ [40]. Для

исследования влияния величины ΔE_C на электрические свойства ФЭП на основе наногетероструктур n-GaP/p-Si были рассчитаны значения ΔE_C при значениях сродства к электрону Si от 4,0 до 4,15 эВ с шагом 0,05 эВ, которые представлены в таблице 5.

Таблица 5

Зависимость разрыва от сродства к электрону для n-GaP/p-Si

χ_e , эВ	4.0	4.05	4.1	4,15
ΔE_v , эВ	0.2	0.25	0.3	0.35

График спектральной зависимости внешней квантовой эффективности наногетероструктуры n - GaP/p - Si при различных значениях ΔE_C изображен на рисунке 3.

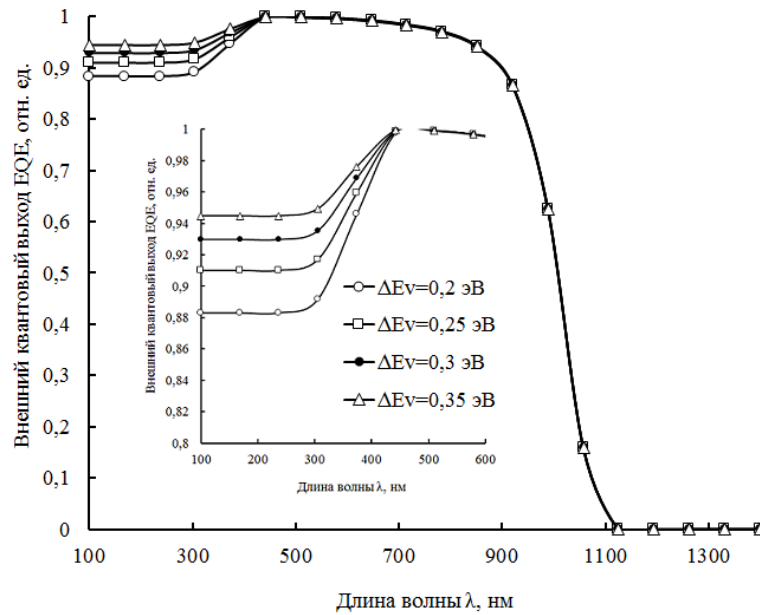


Рисунок 3 – Зависимости внешней квантовой эффективности ФЭП на основе наногетероструктуры n - GaP/p - Si от длины волны при разных значениях разрыва зоны проводимости

Анализируя, что потенциальный барьер достаточно мал, чтобы не препятствовать транспорту электронов из p - Si в n область. Квантовая эффективность близка к предельным значениям в широком интервале длин волн, находящимся в области поглощения кремния.

Для различного значения ΔE_C были рассчитаны ВАХ при освещении спектром солнца AM1.5, которые представлены на рисунке 4, а параметры ВАХ в таблице 6. Видно, что значение

тока короткого замыкания достигает близких к предельным для кремниевых ФЭП значений, что также является свидетельством отсутствия ограничения транспорта носителей заряда. Значение напряжения холостого хода практически не зависит от разрыва зон, что возможно связано с используемой упрощенной моделью расчета, которая не принимает во внимание влияние поверхностных состояний на границе раздела GaP/Si .

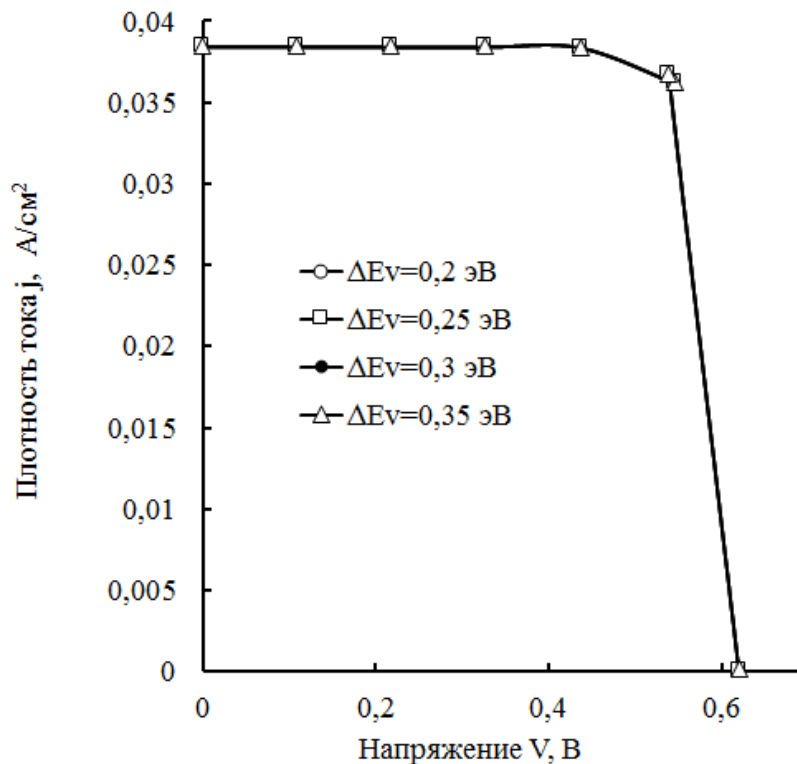


Рисунок 4 – Вольтамперная характеристика ФЭП на основе n - GaP/p - Si при освещении AM1.5

Таблица 6

Результаты моделирования ФЭП на основе *n-GaP/p-Si*

ΔE_v , эВ	V_{oc} , мВ	J_{sc} , мА/см ²	FF , %	КПД, %
0,2	619,6	38,42	83,08	19,77
0,25	619,6	38,43	83,06	19,78
0,3	619,6	38,43	83,08	19,78
0,35	619,6	38,42	83,07	19,78

Заключение

В данной статье было проведено моделирование фотоэлектрических преобразователей на основе наногетероструктур *GaP/Si*.

Установлено, что на границе раздела в гетероструктурах *p-GaP/n-Si* из-за существенного разрыва валентных зон формируется потенциальный барьер, высота которого фактически равна разрыву зон. Из-за ограничения переноса дырок фотоэлектрических преобразователей на основе *p-GaP/n-Si* имеют отрицательные значения тока короткого замыкания, и как следствие, отсутствие эффективности преобразование солнечной энергии.

Для фотоэлектрических преобразователей на основе *n-GaP/p-Si* при моделировании значение максимальной эффективности преобразования солнечной энергии составляет 19,78 % и 20,02 % соответственно, что также является свидетельством отсутствия ограничения переноса носителей заряда.

Список используемой литературы

1. Кудряшов, Д.А. Разработка конструкции многопереходных солнечных элементов на основе гетероструктур GaPNAs/Si методом

компьютерного моделирования / Д.А. Кудряшов, А.С. Гудовских, Е.В. Никитина, А.Ю. Егоров // Физика и техника полупроводников. - 2014. - Т. 48. Вып. 3. - С. 396 -401.

2. Alferov, Zh.I. III-V heterostructures in photovoltaics in Concentrator Photovoltaics / Zh.I. Alferov, V.M. Andreev, V.D. Rumyantsev // Springer Series in Optical Sciences. – 2007. – № 130, P. 25–50.

3. Середин, П. В. Основные проблемы формирования нано- и гетероструктур на основе кремния и полупроводников A³B⁵ для современной оптоэлектроники / П.В. Середин, А.С. Леньшин // Молодой ученый. - 2013. - №11. - С. 28-31.

4. Крупнейшая солнечная электростанция в РФ вышла на полную мощность на Ставрополье – Экономика и бизнес – ТАСС – URL: <https://tass.ru/ekonomika/8134809> (дата обращения: 15.06.2020).

5. Алфёров, Ж.И. Тенденции и перспективы развития солнечной фотоэнергетики / Ж.И. Алфёров, В.М. Андреев, В.Д. Румянцев // Физика и техника полупроводников. 2004. Т. 38, вып. 8. С. 937–948.

7. R. Einhaus, D. Sarti, S. Pleier, M. Blum, P.J. Ribeyron, F. Durand. Proc. 16th Europ. Photovolt. Solar Energy Conf. (Glasgow, UK, 2000) O.D 5.5.

© В.В Солдатов, 2020