

ВЛИЯНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ РЕКОМБИНАЦИИ НА НАПРЯЖЕНИЕ ХОЛОСТОГО ХОДА СОЛНЕЧНОГО ЭЛЕМЕНТА НА ОСНОВЕ ОДИНОЧНОЙ НАНОПРОВОЛОКИ С РАДИАЛЬНЫМ *P-N*-ПЕРЕХОДОМ

С.Г. ПЕТРОСЯН^{1,2*}, В.А. ХАЧАТРЯН¹, С.Р. НЕРСЕСЯН²

¹Российско–Армянский университет, Ереван, Армения

²Институт радиопизики и электроники НАН Армении, Аштарак, Армения

*e-mail: stepan.petrosyan@rau.am

(Поступила в редакцию 19 февраля 2020 г.)

Предложена аналитическая модель для изучения влияния поверхностной рекомбинации на характеристики солнечного элемента на основе нанопроволоки с радиальным *p-n*-переходом, образованным между ее «сердцевинной» и «оболочкой» разного типа проводимости. Рассмотрено влияние поверхностной рекомбинации на такие важные параметры солнечного элемента, как ток короткого замыкания, напряжение холостого хода и эффективность преобразования энергии солнечного излучения в электрическую, при вариации ширины оболочки в широких пределах. Показано, что относительно низкое напряжение холостого хода, часто наблюдаемое экспериментально в таких солнечных элементах, может быть вызвано значительной поверхностной рекомбинацией на боковой стенке нанопроволоки, роль которой увеличивается с уменьшением диаметра нанопроволоки и увеличением отношения поверхность/объем.

1. Введение

В настоящее время полупроводниковые нанопроволоки (НП) (также, т.н. нитевидные нанокристаллы или наностержни) с высоким отношением длины к диаметру, в диапазоне поперечных размеров от нескольких сот нм до мкм и длин, порядка десятков мкм, интенсивно исследуются с целью создания новых полупроводниковых приборов [1]. На пути к наноразмерной интеграции такие структуры с одиночной НП или массивом НП открывают новые возможности, так как благодаря классическим размерным эффектам и высокой роли поверхностных состояний они проявляют уникальные электрические, фотоэлектрические и оптические свойства, обладают высокой биологической и химической чувствительностью, и могут послужить основой для создания новых фотодетекторов [2], солнечных элементов (СЭ) третьего поколения [3–5], полевых транзисторов [6], биосенсоров [7] и т.д.

Технологические методы реализации НП, в частности, метод роста «пар-жидкость-твердое тело», в настоящее время достигли такого уровня, когда в процессе роста различные слои или участки, отличающиеся как составом, так и типом легирования, могут быть включены в структуру НП в осевом, или в радиальном направлениях, формируя при этом структуры с осевым или радиальным p - n -гомо- (гетеро-) переходами [8–10].

Одним из наиболее изученных явлений в полупроводниковых НП является их высокая чувствительность к свету, что делает НП перспективными для использования в фотоприемниках и в других фотоэлектрических приборах [2]. Особый интерес представляют коаксиальные структуры, в которых легированная сердцевина НП окружена оболочкой противоположного типа проводимости, приводящая к возникновению p - n (или p - i - n) - перехода в радиальном направлении.

Физика возникновения фототока (фотонапряжения) в таких структурах более или менее идентична физике стандартного фотоэлемента, но есть некоторые особенности, дающие структурам на основе НП дополнительные преимущества, обусловленные тем обстоятельством, что p - n -переход простирается вдоль всей длины НП, и имеется возможность ортогонализировать и независимо оптимизировать направления распространения (поглощения) света и сбора (разделения) неравновесных носителей заряда (ННЗ). Это может обеспечивать эффективный сбор носителей в оптически толстых НП, даже когда в качестве поглощающего материала используются материалы относительно низкого качества, а диффузионная длина неосновных носителей короче длины оптического поглощения, тем самым появляется возможность устранить ключевое ограничение для обычных планарных СЭ.

Экспериментально доказано, что в одиночной НП с радиальной p - n -структурой проявляется сильный фотоэлектрический эффект, позволяющий на ее основе создавать солнечные элементы со сверхнизкой мощностью (≈ 100 пВт), предназначенные для питания различных наноразмерных электронных и оптоэлектронных устройств [3].

Фотоэлектрическим свойствам СЭ на основе НП с радиальным p - n -переходом, моделированию его характеристик, а также экспериментальной реализации таких фотоэлементов были посвящены работы нескольких научных групп [4,5,8,11–15]. В теоретических исследованиях [16,17] была разработана физическая модель СЭ на основе одиночной НП или массива плотно упакованных НП с радиальными p - n -переходами, ориентированных параллельно направлению падающего света. Было показано, что радиальная геометрия p - n -перехода в НП приводит к значительному улучшению эффективности СЭ, изготовленных из материала (например, кремния металлургического качества [18]), у которого диффузионная длина ННЗ по крайней мере на два порядка меньше оптической

толщины, а в области объемного заряда рекомбинационные потери незначительны. Однако, при экспериментальной реализации СЭ на основе кремниевых НП, обычно наблюдаются напряжение холостого хода (V_{oc}) порядка 0.3 В (при стандартных условиях освещения АМ1.5), что значительно меньше напряжения холостого хода, характерного для обычных СЭ на основе моно- или поликристаллических планарных кремниевых структур (обычно $V_{oc} = 0.6\text{--}0.7$ В) [19].

В общем случае, причиной уменьшения значения V_{oc} в радиальном СЭ на основе НП могут быть два физических эффекта. Во-первых, оптимальные структуры должны иметь радиус сердцевины и ширину оболочки, приблизительно равные диффузионным длинам неосновных носителей, а их уровень легирования должен быть достаточно высоким, чтобы НП данного радиуса была не полностью обеднена, а в ней мог формироваться полноценный радиальный потенциальный барьер [20]. Во-вторых, низкое значение V_{oc} может быть обусловлено большой объемной рекомбинацией фотоносителей в области пространственного заряда (ОПЗ) перехода или поверхностной рекомбинацией на боковой стенке НП, роль которой увеличивается с уменьшением диаметра, и, соответственно, с увеличением отношения поверхность/объем НП. Поскольку введение i -слоя между p -сердцевинной и n -оболочкой в экспериментальных структурах СЭ на основе кремниевой НП не приводили к значительному улучшению V_{oc} [8,12], здесь мы будем считать, что низкое значение наблюдаемых V_{oc} обусловлено уменьшением фототока из-за большой скорости поверхностной рекомбинации на боковой стенке НП.

Целью данной статьи является анализ влияния поверхностной рекомбинации на ток короткого замыкания, напряжение холостого хода и КПД СЭ с различными радиусами сердцевины и ширины оболочки, и выявление возможной роли поверхностной рекомбинации в формировании низкого напряжения холостого хода для СЭ на основе НП.

2. Модель солнечного элемента

Будем рассматривать НП в виде цилиндрического стержня радиуса R со структурой p -сердцевина/ n -оболочка (рис.1). В выбранной схеме СЭ контактирование к слоям НП реализовано таким образом, что фотогенерированные дырки, проходя вдоль p -сердцевины радиуса R_0 , собираются верхним прозрачным омическим контактом, а электроны отводятся из n -оболочки через сильно легированную n^+ -подложку (так называемая конфигурация верхнего контакта) [21].

Пусть свет падает на верхнюю грань вертикально ориентированной НП и поглощается по мере распространения вдоль оси НП. Предполагается, что поглощение света следует закону Бугера-Ламберта, причем для каждой длины волны солнечного спектра учитывается только однократный путь прохождения света

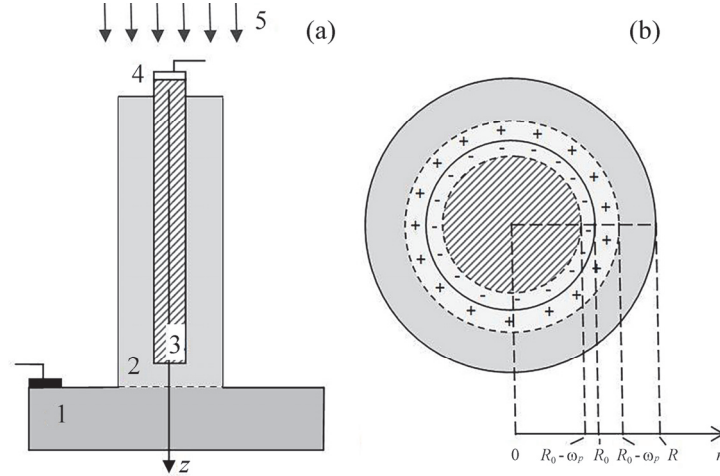


Рис.1. (а) Структура СЭ на основе НП с радиальным p - n -переходом (1 – n^+ – подложка с нижним контактом, 2 – оболочка n -типа, 3 – сердцевина p -типа, 4 – прозрачный верхний омический контакт, 5 – падающий свет); (б) поперечное сечение НП с ОПЗ.

через НП. Для простоты мы не будем также включать в нашу модель эффекты рассеяния света, а также волноводные эффекты при распространении света в такой оптически неоднородной среде, как проволока и окружающая среда (вакуум), которые могут быть особенно заметны для некоторых специальных длин волн [22].

В дальнейших оценках фототока в качестве освещения будем использовать солнечное излучение, падающее вне атмосферы (AM0) на единицу поверхности, расположенной перпендикулярно направлению распространения света. При этом Солнце принимается как абсолютно черное тело с температурой $T_c = 5800$ К. Тогда спектральная плотность потока падающих фотонов (т.е. количество фотонов, падающих в единицу времени на единицу площади верхней грани НП, в единичном интервале длин волн) будет задаваться выражением [23]:

$$\frac{\Delta N_{ph}^{(\lambda)}}{\Delta \lambda} = \frac{A}{\lambda^4 (e^{b/(\lambda T_c)} - 1)}, \quad (1)$$

где $b = hc/k = 1.4388 \cdot 10^{-2}$ м К, λ – длина волны, h – постоянная Планка, c – скорость света, k – постоянная Больцмана, а числовая постоянная $A = 2\pi hc^2 (R_c/r)^2 = 4.05 \cdot 10^4$ м s^{-1} определяется соотношением радиуса Солнца $R_c = 6.96 \cdot 10^8$ м и среднего расстояния Земли от Солнца $r = 1.5 \cdot 10^{11}$ м.

Поэтому скорость объемной генерации электронно-дырочных пар за счет поглощения падающих фотонов спектрального диапазона $(\lambda, \lambda + d\lambda)$ на расстоянии z от верхней грани НП будет:

$$G' = \alpha(\lambda) \cdot e^{-\alpha(\lambda)z} \cdot dN_{ph}(1 - R), \quad (2)$$

где $\alpha(\lambda)$ – коэффициент поглощения, R – коэффициент отражения от верхней грани НП. Общий фототок можно рассчитать как сумму вкладов при каждом значении z от поглощенных фотонов с различными длинами волн. Предполагается, что коэффициент отражения света от верхней поверхности НП незначителен.

В расчетах радиальный p - n -переход считается резким, и используется приближение полного обеднения. Из-за высокого отношения длина/диаметр НП транспорт носителей заряда можно считать чисто радиальным. Справедливость приближения одномерного переноса ННЗ обусловлено тем количественным обстоятельством, что изменение концентрации носителей в направлении z происходит на расстоянии α^{-1} , которое имеет гораздо больший масштаб длины, чем диффузионная длина носителей.

Кроме того, вследствие сильного легирования областей сердцевины и оболочки, падение напряжения на их небольших последовательных сопротивлениях в цепи фототока незначительно, и поэтому квазинейтральные области сердцевины и оболочки в дальнейшем можно считать эквипотенциальными.

Когда в НП вдоль границы раздела сердцевина/оболочка формируется p - n -переход, а по обе стороны создаются слои пространственного заряда (соответственно возникает радиальное электрическое поле), то энергетические зоны изгибаются до установления равновесного состояния, выравнивания уровней Ферми и установления радиального потенциального барьера.

В общем случае свет поглощается как в квазинейтральных областях оболочки и сердцевины, так и в ОПЗ. Электронно-дырочные пары, будучи генерированными в НП, могут разделяться в поперечном направлении радиальным электрическим полем p - n -перехода и, следовательно, могут генерировать фототок в СЭ.

В случае, когда толщина оболочки и радиус сердцевины меньше диффузионной длины, объемная рекомбинация ННЗ незначительна, поэтому основные потери фотоносителей будут обусловлены рекомбинацией носителей заряда на боковой стенке и в ОПЗ НП.

Для обеспечения полного поглощения света будем рассматривать НП с длиной L , превышающей обратный коэффициент поглощения света (α^{-1}). В таких случаях одновременно возможно максимизировать как поглощение света, так и разделение генерированных ННЗ. Хотя наше дальнейшее моделирование будет выполнено для кремниевых НП, качественные результаты могут быть применены для СЭ аналогичной структуры, изготовленных на основе других полупроводниковых материалов.

Для расчета фототока в радиальном p - n -переходе необходимо, во-первых, найти связь между шириной ОПЗ в НП и высотой потенциального барьера с учетом возникшего фотонапряжения. Мы рассматриваем случай, когда области

пространственного заряда занимают лишь некоторые части областей сердцевины и оболочки НП, так что в них остаются некоторые квазинейтральные области. Чтобы найти радиальное распределение потенциала, необходимо решить уравнение Пуассона в цилиндрических координатах со стандартными граничными условиями, отражающими отсутствие радиального электрического поля вне ОПЗ, а также тот факт, что перепад потенциала вдоль перехода должен равняться разности между встроенным потенциалом V_{bi} и фотонапряжением V , генерированным в переходе при освещении. Результатом такого решения в приближении Шоттки является неявное уравнение для ширины обедненного слоя в оболочке НП w_p , которая зависит от радиуса НП, уровня легирования областей сердцевины (N_D) и оболочки (N_A), встроенного потенциала перехода V_{bi} и фотонапряжения V [24]:

$$\gamma \frac{V_{bi} - V}{V_T} = x \ln x + (2 - x) \ln(2 - x), \quad (3)$$

где введены следующие обозначения: $\gamma = \frac{4\pi\epsilon\epsilon_0 V_T}{e^2 N_A R_0^2}$, $x = \left(1 - \frac{\omega_p}{R_0}\right)^2$, и $V_T = kT/e$ – тепловой потенциал, e – элементарный заряд, ϵ – диэлектрическая проницаемость, ϵ_0 – электрическая постоянная. Заметим, что при комнатной температуре для кремниевой НП ($n_i = 1.6 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$) с уровнями легирования $N_A = N_D = 10^{18} \text{ см}^{-3}$,

$$V_{bi} = \frac{kT}{e} \ln \frac{N_A N_D}{n_i^2} \approx 0.9 \text{ В}. \quad (4)$$

После нахождения корня x_0 уравнения (3), при заданном фотонапряжении можно легко найти ширину областей обеднения в сердцевине w_p и оболочке w_n :

$$\begin{aligned} \omega_p &= R_0 \cdot (1 - \sqrt{x_0}), \\ \omega_n &= R_0 \cdot (\sqrt{2 - x_0} - 1). \end{aligned} \quad (5)$$

3. Генерация фототока в нанопроволоке при освещении

Рассмотрим НП, которая, как было указано выше, освещается со стороны верхней грани световым потоком, определяемым формулой (1). Для расчета компонентов фототока, всю НП можно разделить на три области: квазинейтральная часть сердцевины ($0 < r < R_0 - w_p$), область обеднения ($R_0 - w_p < r < R_0 + w_n$) и квазинейтральная часть оболочки ($R_0 + w_n < r < R$) (рис.1б).

Решая уравнение непрерывности в квазинейтральных областях сердцевины и оболочки с граничными условиями, учитывающими поверхностную рекомбинацию на боковой поверхности НП (со скоростью S_p) и используя

выражение для скорости генерации в виде (2), легко можно найти диффузионные токи ННЗ в соответствующих областях [16, 17]. Эти уравнения и соответствующие граничные условия имеют вид:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{e} \frac{dj_n}{dr} + G' - \frac{\Delta n}{\tau_n} &= 0, \quad 0 \leq r \leq R_0 - \omega_p, \\ -\frac{1}{e} \frac{dj_p}{dr} + G' - \frac{\Delta p}{\tau_p} &= 0, \quad R_0 + \omega_n \leq r \leq R, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{cases} \Delta n(0) = \text{const}, \\ \Delta n(R_0 - \omega_p) = n_p(e^{eV/(kT)} - 1), \end{cases} \quad \begin{cases} \Delta p(R_0 + \omega_n) = p_n(e^{eV/(kT)} - 1), \\ D_p \frac{d\Delta p}{dr} \Big|_{r=R} = S_p(p - p_n). \end{cases} \quad (7)$$

Здесь Δn и Δp – концентрация избыточных неосновных носителей относительно равновесных значений n_p , p_n , $j_n = eD_n dn/dr$ и $j_p = -eD_p dp/dr$ – плотности диффузионных токов электронов и дырок, $D_{n,p}$, $\tau_{n,p}$ – коэффициенты диффузии и времена жизни электронов и дырок, а температура принимается равной 300 К. Используя решение (6) и суммируя вклады при каждом значении z , легко можно найти суммарную спектральную плотность токов $\Delta I_n^{(\lambda)}$ и $\Delta I_p^{(\lambda)}$, соответственно, собранных из квазинейтральных участков p - и n -областей:

$$\begin{aligned} \Delta I_n^{(\lambda)} &= 2\pi e D_n \beta_1 \frac{I_1(\beta_1)}{I_0(\beta_1)} \left[n_p L (e^{\frac{eV}{kT}} - 1) - \tau_n (1 - e^{-\alpha(\lambda)L}) \Delta N_{ph}^{(\lambda)} \right], \\ \Delta I_p^{(\lambda)} &= 2\pi e D_p \beta_2 \\ &\times \left[p_n L \frac{f_4 S' - f_3}{f_2 S' - f_1} (e^{\frac{eV}{kT}} - 1) - \tau_p \frac{(f_4 - f_5) S' - f_3}{f_2 S' - f_1} (1 - e^{-\alpha(\lambda)L}) \Delta N_{ph}^{(\lambda)} \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

В этих выражениях введены обозначения:

$$\begin{aligned} \beta_1 &= \frac{R_0 - \omega_p}{L_n}, \beta_2 = \frac{R_0 + \omega_n}{L_p}, \beta_3 = \frac{R}{L_p}, S' = S_p \sqrt{\tau_p / D_p}, \\ f_1 &= K_1(\beta_3) I_0(\beta_2) + K_0(\beta_2) I_1(\beta_3), \\ f_2 &= K_0(\beta_3) I_0(\beta_2) - K_0(\beta_2) I_0(\beta_3), \\ f_3 &= K_1(\beta_3) I_1(\beta_2) - K_1(\beta_2) I_1(\beta_3), \\ f_4 &= K_0(\beta_3) I_1(\beta_2) + K_1(\beta_2) I_0(\beta_3), \\ f_5 &= K_1(\beta_2) I_0(\beta_2) + K_0(\beta_2) I_1(\beta_2). \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь I_0 , I_1 , K_0 и K_1 – модифицированные функции Бесселя нулевого и первого порядка, L_n , L_p – диффузионные длины неосновных носителей заряда. Из (8) следует, что токи через переход можно представить как сумму темновых токов

электронов и дырок,

$$\begin{aligned}\Delta I_0^n &= 2\pi e D_n n_p L \beta_1 \frac{I_1(\beta_1)}{I_0(\beta_1)}, \\ \Delta I_0^p &= 2\pi e D_p p_n L \beta_2 \frac{f_4 S' - f_3}{f_2 S' - f_1}.\end{aligned}\quad (10)$$

и их фототоков:

$$\begin{aligned}\Delta I_l^n &= 2\pi e D_n \tau_n \beta_1 \frac{I_1(\beta_1)}{I_0(\beta_1)} (1 - e^{-\alpha(\lambda)L}) \Delta N_{ph}^{(\lambda)}, \\ \Delta I_l^p &= 2\pi e D_p \tau_p \beta_2 (1 - e^{-\alpha(\lambda)L}) \frac{(f_4 - f_3) S' - f_3}{f_2 S' - f_1} \Delta N_{ph}^{(\lambda)}.\end{aligned}\quad (11)$$

В общем случае, помимо компонентов фототока, сформированных в квазинейтральных областях сердцевины и оболочки, необходимо учесть процессы фотогенерации и рекомбинации носителей заряда в ОПЗ, дающие также вклады в общий ток перехода. Генерируемый светом фототок в p - и n -участках ОПЗ – $\Delta I_g^{\text{dep},p}$, $\Delta I_g^{\text{dep},n}$ можно рассчитать исходя из предположения, что все поглощенные фотоны образуют электронно-дырочные пары, которые затем полностью разделяются. Рекомбинационный же ток во всей ОПЗ ($I_r^{\text{dep}}(V)$), по аналогии со стандартным планарным случаем, можно рассчитать путем умножения максимальной скорости рекомбинации на небольшой объем, сосредоточенный вокруг границы раздела сердцевина/оболочка [23]. В результате для этих компонентов тока имеем:

$$\begin{aligned}\Delta I_g^{\text{dep},p} &= \pi e (R_0^2 - (R_0 - \omega_p)^2) \cdot (1 - e^{-\alpha(\lambda)L}) \Delta N_{ph}^{(\lambda)}, \\ \Delta I_g^{\text{dep},n} &= \pi e ((R_0 + \omega_n)^2 - R_0^2) \cdot (1 - e^{-\alpha(\lambda)L}) \Delta N_{ph}^{(\lambda)}.\end{aligned}\quad (12)$$

$$I_r^{\text{dep}}(V) = \frac{2\pi R_0 n_i k T L}{\sqrt{\tau_n \tau_p} E(R_0)} e^{\frac{eV}{2kT}}. \quad (13)$$

Здесь $E(R_0) = e N_A R_0 (1 - x_0) / 4\epsilon\epsilon_0$ – максимальное электрическое поле в переходе при $r = R_0$ [24].

До сих пор фототоки в (11) и (12) были рассчитаны в узкой спектральной области (λ , $\lambda + d\lambda$). Для расчета фототока во всем диапазоне оптического поглощения кремния ($\lambda < 1.1$ мкм) эти выражения следует интегрировать с учетом выражения (1) для потока солнечных фотонов и зависимости коэффициента поглощения света от длины волны. Окончательно, для полного фототока НП получаем выражение:

$$I_l^{\text{tot}} = \left[2\pi e D_n \tau_n \beta_1 \frac{I_1(\beta_1)}{I_0(\beta_1)} + 2\pi e D_p \tau_p \beta_2 \frac{(f_4 - f_5)S' - f_3}{f_2 S' - f_1} + \pi e (R_0^2 - (R_0 - \omega_p)^2) + \pi e ((R_0 + \omega_n)^2 - R_0^2) \right] \cdot N'_{ph}. \quad (14)$$

где общий поток фотонов, поглощенных в НП равен:

$$N'_{ph} = \int_0^{hc/E_g} (1 - e^{-\alpha(\lambda)L}) \cdot \frac{A}{\lambda^4 (e^{b/(\lambda T_c)} - 1)} d\lambda. \quad (15)$$

В дальнейшем моделировании мы будем предполагать, что в кремниевой НП коэффициент поглощения для каждой длины волны солнечного спектра соответствует эмпирическому коэффициенту поглощения объемного кремния [25,26]:

$$\alpha(\lambda) = \begin{cases} 10^{(-6.7\lambda+8.4)} \text{ см}^{-1}; & 0.8\mu\text{м} \leq \lambda \leq 1.1\mu\text{м} \\ 10^{(-3.3\lambda+5.6)} \text{ см}^{-1}; & 0.5\mu\text{м} \leq \lambda \leq 0.8\mu\text{м} \\ 10^{(-6.7\lambda+7.4)} \text{ см}^{-1}; & \lambda \leq 0.5\mu\text{м} \end{cases}. \quad (16)$$

Отметим, что для НП с длиной $L = 150$ мкм общий поток поглощенных фотонов (15) согласно (16) равен $3.04 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-2} \text{ с}^{-1}$.

После некоторых преобразований для общего фототока перехода имеем окончательное выражение:

$$I_l^{\text{tot}} = 2\pi e R_0^2 N'_{ph} \left[\frac{D_n \tau_n \beta_1}{R_0^2} \frac{I_1(\beta_1)}{I_0(\beta_1)} + \frac{D_p \tau_p \beta_2}{R_0^2} \frac{(f_4 - f_5)S' - f_3}{f_2 S' - f_1} + \frac{1}{2} \left(\left(1 + \frac{\omega_n}{R_0} \right)^2 - \left(1 - \frac{\omega_p}{R_0} \right)^2 \right) \right]. \quad (17)$$

4. Результаты расчетов и их обсуждение

Теперь мы можем перейти к более конкретному расчету фототока СЭ на основе кремниевой НП, используя следующие типичные значения параметров: $R_0 = 5$ мкм, $N_A = N_D = 10^{18} \text{ см}^{-3}$, $L_p = 11.2$ мкм, $L = 150$ мкм, $S_p = 10 - 10^6 \text{ см/с}$. Заметим, что в соответствии с (3)–(5) в равновесии ширина ОПЗ в оболочке НП $\omega_n = 24.8$ нм.

В ходе численных расчетов большинство геометрических и материальных параметров были сохранены постоянными, варьировались только такие параметры, как ширина оболочки НП и скорость поверхностной рекомбинации.

Зависимость полного фототока от отношения толщины квазинейтральной

области оболочки и диффузионной длины дырок $(R - R_0 - w_n)/L_p$ для различных значений скорости поверхностной рекомбинации показана на рис.2.

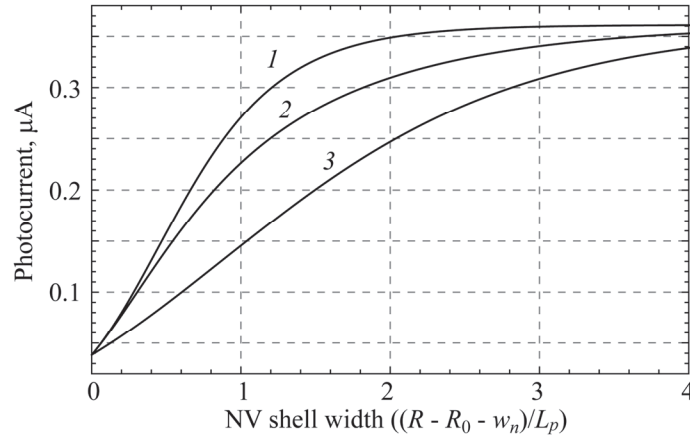


Рис.2. Зависимость фототока от относительной толщины квазинейтральной области оболочки при различных скоростях поверхностной рекомбинации ($S_p = 10$ (1); 10^3 (2); 10^6 (3) см/с).

Заметим, что при заданном освещении, есть две основные причины уменьшения тока короткого замыкания в СЭ на основе НП: малый радиус НП и большая скорость поверхностной рекомбинации.

Для заданной величины S_p , с увеличением радиуса НП фототок увеличивается из-за увеличения количества собранных из оболочки фотодырок, которым удалось избежать объемной и поверхностной рекомбинации. Когда толщина оболочки увеличивается и становится больше диффузионной длины дырок, количество собранных фотодырок больше не возрастает и остается более или менее постоянным.

Видно, что когда толщина оболочки становится сравнимой с диффузионной длиной дырок, поверхностная рекомбинация начинает играть существенную роль в спаде фототока. При большей толщине оболочки фототок практически не зависит от скорости поверхностной рекомбинации, так как вклад в фототок НП вносят только носители, генерируемые не так далеко от края квазинейтральной области. Таким образом, оптимальная толщина оболочки должна быть порядка диффузионной длины неосновных носителей.

Как обычно, на основе световой вольт-амперной характеристики СЭ можно найти его эффективность, определяя ее как отношение выходной электрической мощности к мощности излучения W_i , падающего на площадь, равную площади поперечного сечения НП. Для получения максимальной выходной мощности, как обычно, необходимо подобрать соответствующее внешнее сопротивление. На основании (11) и (14) для общего тока СЭ можно записать:

$$I = I_s(e^{eV/(kT)} - 1) + I_{0r}^{\text{dep}} e^{eV/(2kT)} - I_l^{\text{tot}}, \quad (18)$$

где I_l^{tot} задан выражением (17), а

$$I_s = 2\pi eL \left[D_n n_p \beta_1 \frac{I_1(\beta_1)}{I_0(\beta_1)} + D_p p_n \beta_2 \frac{f_4 S' - f_3}{f_2 S' - f_1} \right], \quad (19)$$

$$I_{0r}^{\text{dep}} = \frac{8\pi\epsilon\epsilon_0 n_i kTL}{eN_A \sqrt{\tau_n \tau_p} (1 - x_0)}. \quad (20)$$

Соответственно, мощность, выделяемая на внешней нагрузке, будет задана выражением:

$$W = VI = V \left[(I_0^n + I_0^p) \exp \left[\frac{eV}{kT} - 1 \right] + I_r^{\text{dep}} \exp \left[\frac{eV}{2kT} \right] - I_l^E \right], \quad (21)$$

Уравнение для нахождения напряжения холостого хода, как следует из (18) имеет вид:

$$\frac{eV_{oc}}{2kT} + \ln \left(\frac{I_s}{I_r^{\text{dep}}} \cdot e^{\frac{eV_{oc}}{2kT}} + 1 \right) = \ln \left(\frac{I_l^{\text{tot}} + I_s}{I_r^{\text{dep}}} \right). \quad (22)$$

Следовательно, оптимальное рабочее напряжение V_m , которое соответствует максимальной выделяемой на нагрузке мощности, удовлетворяет уравнению:

$$I_s \left(e^{\frac{eV_{oc}}{kT}} - e^{\frac{eV_m}{kT}} - \frac{eV_m}{kT} \cdot e^{\frac{eV_m}{kT}} \right) + I_r^{\text{dep}} \left(e^{\frac{eV_{oc}}{2kT}} - e^{\frac{eV_m}{2kT}} - \frac{eV_m}{2kT} \cdot e^{\frac{eV_m}{2kT}} \right) = 0. \quad (23)$$

Выражение для тока в режиме максимально выделяемой мощности, соответственно, можно представить в виде:

$$I_m = I_s \left(e^{\frac{eV_{oc}}{kT}} - e^{\frac{eV_m}{kT}} \right) + I_r^{\text{dep}} \left(e^{\frac{eV_{oc}}{2kT}} - e^{\frac{eV_m}{2kT}} \right). \quad (24)$$

На основании полученных уравнений можно рассчитать напряжение холостого хода (V_{oc}), максимальную выходную мощность (W_m) и эффективность преобразования: $\eta = W_m / W_i$. Из расчетов, во-первых, следует, что ток короткого замыкания (I_{sc}) и напряжение холостого хода СЭ существенным образом зависят от ширины оболочки и скорости поверхностной рекомбинации. Как видно из рис.3, по мере роста ширины внешней оболочки, V_{oc} растет и стремится к определенному значению.

При низких скоростях поверхностной рекомбинации рост V_{oc} с увеличением ширины оболочки очень незначителен. Так же видно, что в случае малой ширины оболочки сильная поверхностная рекомбинация может привести к заметному уменьшению абсолютного значения напряжения V_{oc} . Оба параметра СЭ – I_{sc} и V_{oc} , проявляют сильную зависимость от скорости поверхностной

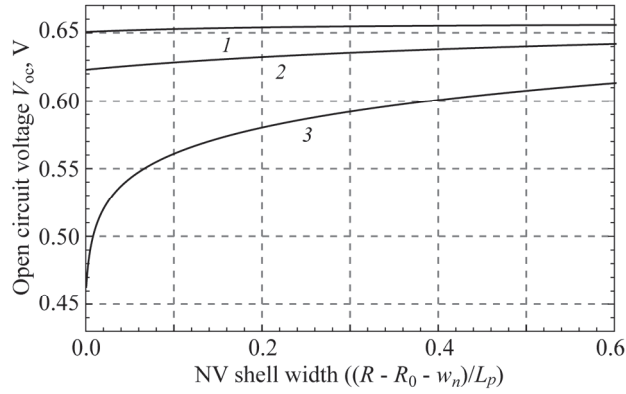


Рис.3. Зависимость напряжения холостого хода от относительной толщины квазинейтральной области оболочки при различных скоростях поверхностной рекомбинации ($S_p = 10$ (1); 10^3 (2); 10^6 (3) см/с).

рекомбинации при фиксированном значении ширины оболочки. Эти зависимости приведены на рис.4 и 5.

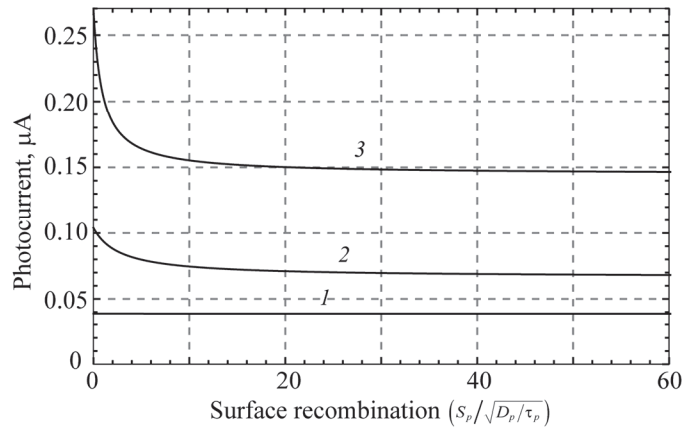


Рис.4. Зависимость фототока от скорости поверхностной рекомбинации при различных значениях относительной толщины квазинейтральной области оболочки ($(R - R_0 - w_n)/L_p = 0.005$ (1); 0.3 (2); 1 (3)).

Уменьшение величин I_{sc} и V_{oc} вызвано существенным спадом внутренней квантовой эффективности из-за рекомбинации носителей заряда на поверхности НП. Например, в СЭ с относительно малой шириной оболочки, когда скорость поверхностной рекомбинации возрастет от 10 до 10^6 см/с, V_{oc} и I_{sc} уменьшаются, соответственно, на 60 и 40%. В результате, для эффективности СЭ получается зависимость, представленная на рис.6.

С ростом ширины оболочки эффективность СЭ падает, так как I_{sc} и V_{oc} достигают насыщения, выходная мощность достигает максимального значения W_m , но одновременно растет мощность падающего излучения (из-за увеличения площади поперечного сечения). Расчеты показывают, что для СЭ на основе

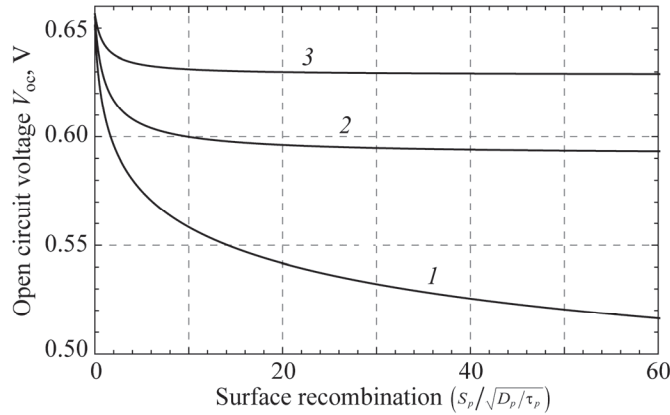


Рис.5. Зависимость напряжения холостого хода от скорости поверхностной рекомбинации при различных значениях ширины квазинейтральной области оболочки: $((R - R_0 - w_n)/L_p = 0.005$ (1); 0.3 (2); 1 (3)).

кремниевой НП с выбранными выше характерными параметрами, эффект поверхностной рекомбинации незначителен для случая, когда скорость поверхностной рекомбинации меньше 10^3 см/с, в то время как при более сильной поверхностной рекомбинации снижение эффективности становится существенным. Например, из-за поверхностной рекомбинации со скоростью 10^6 см/с уменьшение эффективности составляет более чем 30%.

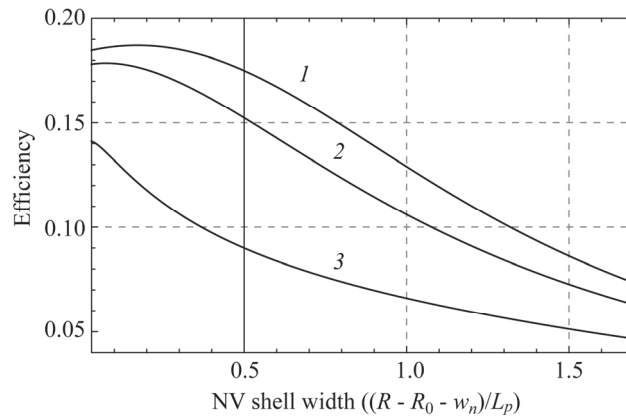


Рис.6. Зависимость эффективности СЭ от ширины квазинейтральной области оболочки при различных значениях скорости поверхностной рекомбинации ($S_p = 10$ (1); 10^3 (2); 10^6 (3) см/с).

5. Заключение

В данной работе теоретически исследован СЭ на основе единичной НП с целью изучения влияния поверхностной рекомбинации на эффективность элемента. Теоретический анализ был проведен на основе решений уравнений

непрерывности и уравнения Пуассона для одиночной НП с различными значениями радиуса оболочки и скорости поверхностной рекомбинации. Были рассмотрены зависимости от ширины оболочки и скорости поверхностной рекомбинации таких величин, как ток короткого замыкания, напряжение холостого хода и эффективность преобразования. Показано, что интенсивная рекомбинация на боковой поверхности НП приводит к значительному ухудшению эффективности солнечного элемента, преимущественно, за счет уменьшения таких параметров, как ток короткого замыкания и напряжение холостого хода. Таким образом, пассивация поверхности, например нанесением более широкозонного гетерослоя [27], является обязательным для СЭ на основе одиночной НП.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РАУ.

ЛИТЕРАТУРА

1. В.Г. Дубровский, Г.Е. Цырлин, В.М. Устинов. ФТП, **43**, 1585 (2009).
2. C. Soci, A. Zhang, X.-Y. Bao, H. Kim, Y. Lo, D. Wang. J. Nanosci. Nanotechnol., **10**, 1 (2010).
3. B. Tian, J. Kempa, Ch. Lieber. Chem. Soc. Rev., **38**, 16 (2009).
4. R.R. LaPierre, A.A.E. Chia, S.J. Gibson, et.al. Phys. Stat. Solidi RRL, **7**, 815 (2013).
5. Н.В. Сибирев, К.П. Котляр, А.А. Корякин, и др. ФТП, **52**, 1464 (2018).
6. V. Schmidt, H. Rien, S. Senz, et.al. Small, **2**, 85 (2006).
7. E. Patolsky, G. Zheng, O. Hayden, et.al. Proc.Natl. Acad.Sci. USA (PNAS), **101**, 14017 (2004).
8. B.T. Tian, X. Zheng, T.J. Kempa, et.al. Nature, **449**, 885 (2007).
9. T.J. Kempa, J.F. Cahoon, S.-K. Kim, et.al. Proc.Natl. Acad.Sci. USA (PNAS), **109**, 1407 (2012).
10. H.J. Fan, P. Werner, M. Zacharias. Small, **2**, 700 (2006).
11. L. Tsakalakos, J. Balch, J. Fronheiser, et.al. Appl. Phys. Lett., **91**, 233117 (2007).
12. E. Garnett, P. Yang. J.Am. Chem.Soc. **130**, 9224 (2008).
13. M. D. Kelzenberg, D. B. Turner-Evans, B. M. Kayes, et.al. Nano Lett., **8**, 710 (2008).
14. C. Colombo, M. Heib, M. Gratzel, A.Fontcubereta I Morral. Appl.Phys.Lett., **94**, 173108 (2009).
15. P. Krogstrup, H. I. Jorgensen, M. Heiss, et.al. Nature Photonics, **7**, 306 (2013).
16. B. M. Kayes, H. Atwater. J.Appl. Phys., **97**, 114302 (2005).
17. R. R. LaPierre. J.Appl. Phys., **109**, 034311 (2011).
18. A.Boukai, P. Haney, A. Katzenmeyer, et. al. Chem. Phys. Lett., **501**, 153 (2011).
19. J.D. Christesen, X. Zhang, Ch.W. Pinion, et.al. Nano Lett., **12**, 6024 (2012).
20. S.G. Petrosyan, A.E. Yesayan, S.R. Nersesyan, V.A. Khachatryan. Semiconductors, **52**, 2022 (2018).
21. F. Voigt, T. Stelzner, S. Christianser. Mater. Sci. Eng., **B177**, 1558 (2012).
22. J.Kupec, B. Witzigmann. Opt. Express, **17**, 10399 (2009).

23. Г. Пикус. Основы теории полупроводниковых приборов, М., Наука, 1965.
24. S. Petrosyan, A. Yesayan, S. Nersesyan. World Academy of Science, Engineering and Technology, **71**, 1065 (2012).
25. H. Wang, X. Liu, Zh.M. Zhang. Int. J. Thermophys, **34**, 213 (2013).
26. M.A. Green. Sol. Energy Mater. Sol. Cells, **92**, 1305 (2008).
27. J.V. Holm, H.I. Jorgensen, P. Krogstrap, et.al. Nat. Commun., **4**, 1498 (2013).

ՄԱԿԵՐԵՎՈՒՅԹԱՅԻՆ ՌԵԿՈՄԲԻՆԱՅԻԱՅԻ ԱԶԴԵՑՈՒԹՅՈՒՆԸ
ՇԱՌԱՎՂԱՅԻՆ *P-N*-ԱՆՑՈՒՄՈՎ ՄԻԱՅՆԱԿ ՆԱՆՈԼԱՐԻ ՎՐԱ ՀԻՄՆՎԱԾ
ԱՐԵԳԱԿՆԱՅԻՆ ՏԱՐՐԻ ՊԱՐԱՊ ԸՆԹԱՑՔԻ ԼԱՐՄԱՆ ՎՐԱ

Ս.Գ. ՊԵՏՐՈՍՅԱՆ, Վ.Ա. ԽԱՉԱՏՐՅԱՆ, Ս.Ռ. ՆԵՐՏԵՍՅԱՆ

Աշխատանքում առաջարկված է անալիտիկական մոդել տարբեր տիպի հաղորդականությամբ՝ միջուկ-պատյան կառուցվածքով և շառավղային *p-n*- անցումով օժտված միայնակ նանոլարի վրա հիմնված արեգակնային տարրի բնութագրերի վրա մակերևութային ռեկոմբինացիայի ազդեցության գնահատման համար: Մասնավորապես, լարի պատյանի հաստության փոփոխության մեծ միջակայքերի համար դիտարկվել է այդպիսի ռեկոմբինացիայի ազդեցությունը արեգակնային տարրի կարևորագույն բնութագրիչների, այդ թվում կարճ միացման հոսանքի, պարապ ընթացքի լարման և լուսային էներգիան՝ էլեկտրականի փոխակերպման արդյունավետության վրա: Ցույց է տրված, որ նման արեգակնային տարրերի համար հաճախ փորձնականորեն դիտարկվող ցածր պարապ ընթացքի լարումները կարող են պայմանավորված լինել նանոլարի կողմնային մակերևութի վրա անհավասարակշիռ լիցքակիրների ուժեղ ռեկոմբինացիայով, ինչի ներդրումը մեծանում է լարի տրամագծի փոքրացման, և հետևաբար նրա մակերևութ/ծավալ հարաբերության մեծացմանը զուգընթաց:

THE EFFECT OF SURFACE RECOMBINATION ON THE OPEN CIRCUIT
VOLTAGE OF A SOLAR CELL BASED ON A SINGLE NANOWIRE WITH A
RADIAL *p-n*-JUNCTION

S.G. PETROSYAN, V.A. KHACHATRYAN, S.R. NERSESYAN

An analytical model is proposed for studying the effect of surface recombination on the characteristics of a solar cell based on a nanowire with a radial *p-n* junction formed between its ‘core’ and ‘shell’ of different types of conductivity.

When varying over a wide range of shell widths, the effect of surface recombination on such important parameters of a solar cell as short circuit current, open circuit voltage, and the efficiency of solar energy conversion into electrical energy is considered.

It is shown that the relatively low open circuit voltage, often observed experimentally in such solar cells, can be caused by significant surface recombination on the sidewall of the nanowire, the role of which increases with decreasing nanowire diameter and increasing surface to volume ratio.