DOI：10.19789/j.1004-9398.2025.05.006
文献引用：高一飞，石磊．应变核/壳量子点太阳能电池效率的理论研究［J］．首都师范大学学报（自然科学版），2025，46（5）：39-46. GAO Y F，SHI L. Theoretical study of the efficiency of strained core/shell quantum dot solar cells［J］. Journal of Capital Normal University（Natural Science Edition），2025，46（5）：39-46.

应变核/壳量子点太阳能电池效率的理论研究*

高一飞，石　磊**

（内蒙古农业大学理学院，内蒙古 呼和浩特　010018）

摘要：在有效质量近似及连续介电模型的框架下，基于细致平衡理论，本文探讨了闪锌矿和纤锌矿柱形量子点太阳能电池的光电转换效率、开路电压以及短路电流密度的特性。研究结果表明，量子点核尺寸的增大导致光电转换效率和开路电压显著降低，而短路电流密度则表现出上升趋势。由于应变增大了量子点带隙，从而导致了短路电流密度的降低，但提高了光电转换效率和开路电压。此外，多重激子效应可以明显提高太阳能电池的转换效率。通过对比2种结构，显示纤锌矿结构下太阳能电池的转换效率和开路电压高于闪锌矿结构，而纤锌矿结构下短路电流密度则低于闪锌矿结构。

关键词：应变；量子点太阳能电池；多重激子效应
中图分类号：O471.3　　**文献标志码**：A

Theoretical study of the efficiency of strained core/shell quantum dot solar cells*

GAO Yifei，SHI Lei**

（College of Science，Inner Mongolia Agricultural University，Hohhot Mongolia　010018）

Abstract：Under the effective mass approximation and dielectric continuum model，based on the detailed balance model，the photoelectric conversion efficiency，open circuit voltage and short circuit current density of zinc-blende and wurtzite strained quantum dot solar cell are studied. The results show that the efficiency of photoelectric conversion and the open-circuit voltage decrease as the core size of quantum dot increases，while the short-circuit current density increases. Because the strain increases the quantum dot band gap，the short-circuit current density decreases，however both the photovoltaic conversion efficiency and open-circuit voltage increase. Furthermore，the process of multiple exciton generation can considerably enhance the conversion efficiency of solar cells. By comparing the two structures，it is found that the photoelectric conversion efficiency and open circuit voltage in the wurtzite structure are higher than that in the zinc-blende structure，while the short circuit current density is lower than that in the zinc-blende structure.

Keywords：strain；quantum dot solar cell；multiple exciton generation
CLC：O471.3　　**DC**：A

收稿日期：2024-10-11
*国家自然科学基金项目（12164033）；内蒙古自然科学基金项目（2023LHM501003）
**通信作者：Shi_lei_family@163.com

0 引 言

人类社会的可持续发展受到人口、资源和环境的限制,而节约能源也成为社会关注的焦点,开发和利用新型环保清洁能源有助于解决全球能源短缺问题[1]。太阳能因其丰富和环保的特性,成为众多可再生能源中的佼佼者。近年来,量子点太阳能电池在国际范围内广受关注。量子点太阳能电池作为新型太阳能电池的一个重要分支,近年来成为研究的热点领域。从发展历程来看,传统的硅基太阳能电池虽已实现产业化,但由于其较高的生产成本,市场竞争力相对较弱,难以与传统能源形成有效竞争。相比之下,量子点太阳能电池因其独特的量子限域效应、表面效应和尺寸效应,展现出了许多优越特性,包括低廉的生产成本、环保属性以及广泛的光谱吸收范围[2]。此外,理论研究表明,这类电池的光电转换效率可达到63.2%,这一数值远远超过了传统太阳能电池的效率水平,为量子点太阳能电池的发展和应用带来了极大的鼓舞和期待[3]。Shockley和Queisser[4]证实当p-n结构太阳能电池的带隙为1.3 ~ 1.4 eV时,使太阳能电池的转换效率达到最高,约为33.0%,这一理论在太阳能电池研究领域被广泛运用。

III-V族化合物由于具有直接带隙结构,由其制成的太阳能电池具有优异性能,其光电转换效率可达30.0%以上[5]。以最具代表性的InP为例,其具有光电转换效率高、电子迁移率高和抗辐射能力强的特点。由于量子点同时具备出色的光学和电学特性,其在光电子器件中的应用潜力非常大。此外,InAs和InP之间的晶格匹配较好,形成的量子点结构也相对稳定。但这2种材料具有闪锌矿和纤锌矿2种结构,且不同结构下的应变也有所不同,包括由于晶格失配引起的压电场[6]。而应变对于材料带隙、太阳能电池效率、短路电流密度和开路电压等光电性质方面将产生一系列重要的影响。尽管国内外学者对InP材料进行了广泛研究,但针对其制成的量子点太阳能电池的探讨仍相对有限。

在传统太阳能电池中,受限于材料特性,1个光子只产生1个电子-空穴对,光电转换效率存在理论上限。近年来,为了显著提升太阳能电池的效率,研究人员给出了一系列独具创新性的研究方案,其中就包含多重激子效应太阳能电池。多激子生成可以使1个高能量光子产生多个电子-空穴对[7-9],这意味着能够更充分地利用太阳光能,突破传统太阳能电池的效率极限,为实现更高效率的太阳能转换提供了可能。虽然这种多重激子产生材料尚未广泛商业化,但其具有极大的潜力。2002年,Nozik[10]首次提出了半导体量子点具有多重激子效应,当量子点吸收的光子能量远超其禁带宽度时,会产生2个或更多电子-空穴对,此时光生电子迅速注入相邻的工作电极,从而产生光生电流;2004年,Schaller和Klimov[11]率先证实了Nozik的说法,报告了在PbSe纳米粒子中产生多重激子的显著效果。随后几年,人们对纳米导体中的多重激子效应进行了广泛而深入的研究。在PbTe、CdSe、PbS、Si、PbSe和InAs等量子点中均观察到了由于多重激子生成而引起效率提高的现象。在多重激子产生的情形下,高于半导体禁带的光子能量可以激发多个电子,这使得光子能量能够得到更充分的利用。由此可见,多重激子效应不仅在基础研究方面极具魅力,在新型太阳能电池及高性能光电器件领域也有着潜在的应用价值。

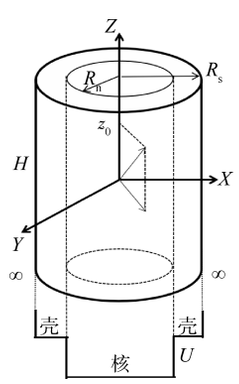
本文以InAs/InP柱形核/壳量子点为研究对象,考虑体系在纤锌矿和闪锌矿2种结构下的应变效应,尤其是应变引起的压电场,以及多激子生成效应,利用细致平衡理论研究了体系的光电转换效率、短路电流密度和开路电压随体系尺寸的变化。

1 理论模型

考虑1个高度为H的圆柱形InAs/InP量子点,如图1所示,该柱形量子点核材料为InAs,壳材料为InP,R_n为核半径,R_s为壳半径。取晶体c轴为Z方向,记为||,垂直方向记为⊥。

太阳能电池的光电转换效率(η)为[12]

$$\eta = JV/P_{in}, \tag{1}$$



注:R_n为核半径,R_S为壳半径,z_0是Z方向的杂质位置,U表示限制势。

图1 柱形InAs/InP核/壳量子点结构示意

式中:V表示电压,在AM1.5 G标准太阳光谱条件下,入射光功率P_{in}=100 mW/cm^2;J表示净电流密度,由光生电流(J_G)与复合电流(J_R)之间的差值得出,即$J=J_G-J_R$。J_G和J_R的计算公式为[13]:

$$J_G = q\int_{E_g}^{\infty} Q_Y(E,E_g)\Gamma(E)\mathrm{d}E, \tag{2}$$

$$J_R = \frac{2\pi q}{h^3c^2}\int_{E_g}^{\infty}\frac{Q_Y(E,E_g)E^2}{e^{(E-\mu)/kT_b}-1}\mathrm{d}E, \tag{3}$$

式中:E表示入射光子的能量;μ为光子的化学势;c表示真空中的光速;h表示普朗克常数;k表示玻尔兹曼常数;T_b则代表电池的温度,这里取T_b=300 K;$\Gamma(E)$表示光子通量密度;$Q_Y(E,E_g)$则表示量子产率,其表达形式为

$$Q_Y(E,E_g)=\sum_{m=1}^{M}\theta(E,E_g), \tag{4}$$

式中$\theta(E,E_g)$表示阶跃函数,当M=1时,表示吸收1个光子并生成1个电子-空穴对。短路电流密度(J_{sc})与开路电压(V_{oc})的计算公式为[14]:

$$J_{sc} = q\int_{E_g}^{\infty}\frac{f_w\times(2\pi/c^2h^3)\times E^2}{\exp(E/kT_s)-1}\mathrm{d}E, \tag{5}$$

$$V_{oc} = kT_b\ln\left(J_{sc}/J_0+1\right)/q, \tag{6}$$

式中:$f_w=\sin^2\varphi_s$,其中φ_s是太阳照射角度,计算时取值为0.266°;T_s代表太阳温度,取T_s=5 672 K。同时,$J_0=qQ_p$,其中Q_p表示光子通量,其计算公式为

$$Q_p = \sin^2\theta\int_{E_g}^{\infty}E^2\Big/\left\{\exp(E/kT_b)-1\right\}\mathrm{d}E, \tag{7}$$

式中:θ为电池的发射复合辐射角,计算中取90°;E_g表示量子点的带隙,其表达式为

$$E_g = E_e + E_h + E_{gn}, \tag{8}$$

式中:E_e与E_h分别代表电子和空穴的基态能量;E_{gn}为核材料的禁带宽度。

采用有效质量近似,电子(空穴)的哈密顿量可表示为

$$H_j = -\frac{\hbar^2}{2m_j^{\perp}}\left[\frac{1}{r_j}\frac{\partial}{\partial r_j}\left(r_j\frac{\partial}{\partial r_j}\right)+\frac{1}{r_j^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi_j^2}\right]-\frac{\hbar^2}{2m_j^{\parallel}}\frac{\partial^2}{\partial z_j^2}+U(r_j,z_j)\mp eFz_j, \tag{9}$$

式中:下角标j=(e)h表示电子(空穴);最后1项中的-(+)则分别对应与电子(空穴),e为电子电荷的绝对值;$m_j^{\perp}$($m_j^{\parallel}$)表示电子(空穴)垂直(沿着)c轴的有效质量,其具体形式为

$$m_j^{\perp},m_j^{\parallel}=\begin{cases}m_j^{n\perp},m_j^{n\parallel}, & 0<r_j<R_n,\\ m_j^{s\perp},m_j^{s\parallel}, & R_n\leqslant r_j<R_s,\end{cases} \tag{10}$$

$U(r_j,z_j)$为电子(空穴)的限制势,满足

$$U(r_j,z_j)=\begin{cases}0, & r_j\leqslant R_n,\\ U_j, & R_n<r_j\leqslant R_s,\\ \infty, & \text{其他},\end{cases} \tag{11}$$

式中U_j为

$$\begin{aligned}U_e &= 0.6\left[E_{gs}-E_{gn}\right],\\ U_h &= 0.4\left[E_{gs}-E_{gn}\right],\end{aligned} \tag{12}$$

式中E_{gs}为InP的禁带宽度。

在柱坐标系下,纤锌矿和闪锌矿核壳结构中晶格失配引起的应变可表示为[15]:

$$\varepsilon_{ZZ}^{n} = \frac{(1-\eta)x}{\eta+(1-\eta)x}f_{\parallel}, \tag{13a}$$

$$\varepsilon_{ZZ}^{s} = \frac{-\eta}{\eta+(1-\eta)x}f_{\parallel}, \tag{13b}$$

$$\varepsilon_{\rho\rho}^{n}+\varepsilon_{\varphi\varphi}^{n} = 2\frac{(1-\eta)x}{\eta+(1-\eta)x}\beta, \tag{13c}$$

$$\varepsilon_{\rho\rho}^{s}+\varepsilon_{\varphi\varphi}^{s} = 2\frac{(1-\eta)x}{\eta+(1-\eta)x}\beta, \tag{13d}$$

式中

$$\beta=\begin{cases}\dfrac{(c_{11}-c_{12})\left[\eta+(1-\eta)\chi\right]f_{\perp}-c_{13}f_{\parallel}}{(c_{11}-c_{12})\left[\eta+(1-\eta)\chi\right]+(c_{11}-c_{12})}, & \text{纤锌矿},\\ \dfrac{(c_{11}-c_{12}+4c_{44})\left[\eta+(1-\eta)\chi\right]-(c_{11}+2c_{12}-2c_{44})}{(c_{11}-c_{12}+4c_{44})\left[\eta+(1-\eta)\chi\right]+2(c_{11}+2c_{12}+c_{44})}f, & \text{闪锌矿}。\end{cases} \tag{14}$$

对于纤锌矿结构,$f_{\parallel}=(c_s-c_n)/c_n$,$f_{\perp}=(a_s-a_n)/a_n$;对于闪锌矿结构$f_{\parallel}=f_{\perp}=f=(a_s-a_n)/a_n$,其中,$c_n$($a_n$)和$c_s$($a_s$)分别为核和壳材料的晶格常数,$\chi$为刚度比,$c_{11}$、$c_{12}$、$c_{13}$、$c_{44}$为弹性常数,$\eta=S_n/S_s=\pi R_n^2/\pi R_s^2$为量子点核区域截面与总截面的面积之比。

晶格失配导致的应变,会对量子点能带结构产生重要影响。对于纤锌矿结构,应变影响下带隙变为[16]

$$E_{gw}^{i}=E_{g0}^{i}+D_1^{i}\varepsilon_{ZZ}^{i}+D_2^{i}(\varepsilon_{\rho\rho}^{i}+\varepsilon_{\varphi\varphi}^{i})-(D_3^{i}\varepsilon_{ZZ}^{i}+D_4^{i}\varepsilon_{\rho\rho}^{i}+D_4^{i}\varepsilon_{\varphi\varphi}^{i})。 \tag{15}$$

对于闪锌矿结构,应变影响下带隙变为[17]

$$E_{gz} = E_{g0}^{i}+(a_c^{i}+a_v^{i})(\varepsilon_{\rho\rho}^{i}+\varepsilon_{\varphi\varphi}^{i}+\varepsilon_{ZZ}^{i}), \tag{16}$$

式中:i=n、s分别为核和壳(下同);E_{g0}^{i}为非应变带隙;D_1^{i}、D_2^{i}、D_3^{i}、D_4^{i}和a_c^{i}、a_v^{i}为形变势。

由于应变引起的压电极化在纤锌矿和闪锌矿中的形式为

$$p_z^{i}=\begin{cases}e_{31}^{i}\left(\varepsilon_{\rho\rho}^{i}+\varepsilon_{\varphi\varphi}^{i}\right)+e_{33}^{i}\varepsilon_{ZZ}^{i}, & \text{纤锌矿},\\ -\dfrac{e_{14}^{i}}{\sqrt{3}}\left(\varepsilon_{\rho\rho}^{i}+\varepsilon_{\varphi\varphi}^{i}-2\varepsilon_{ZZ}^{i}\right), & \text{闪锌矿},\end{cases} \tag{17}$$

式中e_{31}^{i}(e_{33}^{i})和e_{14}^{i}分别为纤锌矿和闪锌矿结构的压电常数,沿Z轴的压电场(F)可近似表示为[18]

$$F=\frac{\langle\rho\rangle}{\langle\varepsilon\rangle}=-\frac{P_z^{\mathrm{n}}s_{\mathrm{n}}+P_z^{\mathrm{s}}s_{\mathrm{s}}}{\varepsilon_0(\varepsilon_{\mathrm{n}}s_{\mathrm{n}}+\varepsilon_{\mathrm{s}}s_{\mathrm{s}})},\tag{18}$$

式中:$\langle\rho\rangle$为圆柱形量子点两端面的有效平均电荷面密度;$\langle\varepsilon\rangle$和$\varepsilon_0$分别为平均介电常数和真空介电常数,$\varepsilon_{\mathrm{n}}$和$\varepsilon_{\mathrm{s}}$分别为核和壳材料的相对有效介电常数。

电子(空穴)波函数可以表示为[19]

$$\psi_j=f(r_j)g(z_j)。\tag{19}$$

通过分离变量的方法,r方向电子波函数可表示为[20]

$$f(r_j)=\begin{cases}A_1J_0(k_1r_j), & r_j\leqslant R_{\mathrm{n}},\\ A_2I_0(k_2r_j)+B_2K_0(k_2r_j), & R_{\mathrm{n}}<r_j\leqslant R_{\mathrm{s}},\ E_j-E_z<U,\\ 0, & \text{其他},\end{cases}\tag{20}$$

式中:$k_1=\sqrt{\frac{2m_j^{\mathrm{n}\perp}(E_j-E_z)}{\hbar^2}}$,$k_2=\sqrt{\frac{2m_j^{\mathrm{s}\perp}(U-E_j+E_z)}{\hbar^2}}$;$A_1$、$A_2$和$B_2$为波函数的归一化常数,可以通过波函数的归一化条件及连续性条件求得;E_j为电子(空穴)的基态能量,E_z为其Z方向的能量;J_0为第一类零阶贝塞尔函数,I_0和K_0分别为第一类零阶和第二类零阶修正贝塞尔函数。Airy函数的线性组合$g(z_j)$可表示为[21-22]

$$g(z_j)=Bi(+)Ai(\xi^{1/3}z-\tau/\xi^{2/3})-Ai(+)Bi(\xi^{1/3}z-\tau/\xi^{2/3}),\tag{21}$$

式中:

$$\xi=2m_j^{\parallel}eF/\hbar^2,\ \tau=2m_j^{\parallel}E_z/\hbar^2,\tag{22}$$

$$Bi(\pm)(Ai(\pm))=Bi(Ai)(\pm\xi^{1/3}H/2-\tau/\xi^{2/3})。\tag{23}$$

E_z可通过求解以下超越方程求得

$$Bi(+)Ai(-)-Ai(-)Bi(+)=0。\tag{24}$$

最后,电子(空穴)的基态能E_j可以通过对波函数的边界条件进行求解得到。

2　数值结果与讨论

本文针对InAs/InP应变柱形量子点进行了研究,具体参数如表1所示。

当壳尺寸R_{s}=10 nm,高度H=20 nm时,压电场与核半径(R_{n})的变化关系如图2所示。结果显示,压电场为负值,表明其沿着Z轴负方向。随着R_{n}的增大,电场强度先增大后减小,并且在比值R_{n}≈7 nm

表1　计算所用参数[15,23-25]

参数	符号	InAs		InP	
		纤锌矿	闪锌矿	纤锌矿	闪锌矿
带隙/meV	E_{g}	481.0	417.0	1 474.0	1 423.6
电子有效质量	$m_{\perp}(m_0)$	0.041 6	0.026 0	0.093 0	0.079 5
	$m_{\parallel}(m_0)$	0.037 0	0.026 0	0.078 0	0.079 5
空穴有效质量	$m_{\perp}(m_0)$	0.084	0.410	0.158	0.950
	$m_{\parallel}(m_0)$	1.700	0.410	1.273	0.950
介电常数	$\varepsilon(\varepsilon_0)$	14.50	14.50	12.74	12.74
形变势/eV	D_1	−2.69	—	−4.05	—
	D_2	−8.33	—	−7.64	—
	D_3	5.85	—	5.92	—
	D_4	−3.17	—	−3.28	—
	a_{c}	—	−5.08	—	−6.00
	a_{v}	—	−1.0	—	−0.6
晶格常数/Å	a_{n}	0.428 4	0.605 8	—	—
	a_{s}	—	—	0.415 1	0.587 0
	c_{n}	0.856 7	—	—	—
	c_{s}	—	—	0.830 1	—
弹性系数/GPa	c_{11}	110.3	92.2	131.1	109.5
	c_{12}	42.8	46.5	51.3	55.7
	c_{13}	32.1	—	38.6	—
	c_{44}	—	44.4	—	52.6
压电常数/C·m^{-2}	e_{31}	−0.045	—	0.103	—
	e_{33}	−0.028	—	0.086	—
	e_{14}	—	−0.05	—	0.06

注:—表示无参数。

时达到最强。此外,结果还显示纤锌矿结构中的压电场明显要强于闪锌矿结构中的压电场。

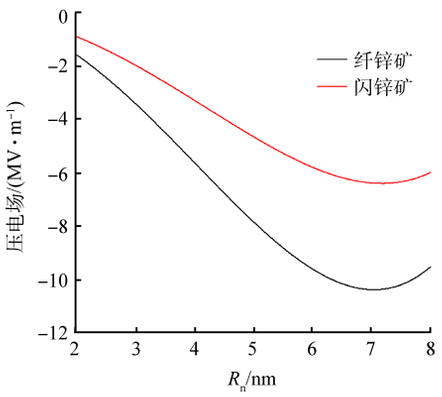


图 2　闪锌矿和纤锌矿结构中压电场随核半径(R_n)的变化

当壳尺寸 R_s=10 nm,高度 H=20 nm 时,不同应变条件下,量子点带隙与 R_n 之间的关系如图 3 所示。结果表明,量子点带隙随着 R_n 的增大而呈现单调下降的趋势。原因在于随着核尺寸的增加,量子限域效应逐渐减弱,电子与空穴的基态能量也随之降低。根据式(8),量子点的带隙也会相应减小。继续增大 R_n,系统的特性逐渐接近于导体材料的状态,导致带隙变化的幅度逐渐减小。同时,在考虑应变的情况下,量子点的带隙明显高于未考虑应变时所得到的结果,说明应变的作用非常重要,不可忽略。此外,结果还显示纤锌矿材料的带隙要明显高于闪锌矿材料的带隙。

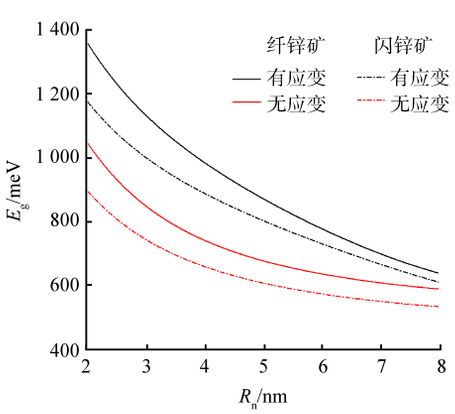


图 3　有无应变下闪锌矿和纤锌矿量子点带隙随 R_n 的变化

当壳尺寸 R_s=10 nm,高度 H=20 nm 时,不同应变条件下,体系的光电转换效率随着量子点 R_n 的变化关系如图 4 所示。光电转换效率随着量子点半径的增大而呈现下降趋势,这与相应的带隙变化趋势(图 2)一致。该结果可以通过细致平衡理论来解释,具体而言,量子点的带隙随着 R_n 的增大而逐渐减小,结果逐步偏离最佳带隙,导致光电转换效率不断降低。此外,由于应变增大了量子点的带隙,因此在考虑应变的条件下,体系的效率整体要比不考虑应变时的结果高。同时,由于闪锌矿下体系的带隙低于纤锌矿下的带隙,所以闪锌矿下体系的转换效率明显低于纤锌矿下的效率。

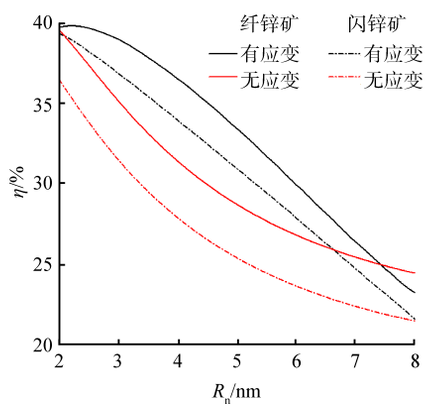


图 4　有无应变下闪锌矿和纤锌矿量子点太阳能电池转换效率随 R_n 的变化

当壳尺寸 R_s=10 nm,高度 H=20 nm 时,不同应变条件下,短路电流密度与 R_n 之间的关系变化如图 5 所示。随着核尺寸的增大,短路电流密度呈单调上升趋势。其原因在于核尺寸越大,量子点的带隙越小,这将增加光子的吸收量,从而产生更多的电子-空穴对,这些电子和空穴在电场的作用下形成电流,导致短路电流密度增加。另一方面,量子点带隙变小也会拓宽半导体材料的吸收谱,使其能够覆盖更宽的波长范围,有助于提高对太阳光谱的利用率,进一步增加短路电流密度。此外,由于应变增大了量子点的带隙,且纤锌矿的带隙大于闪锌矿,故有应变的短路电流密度明显低于无应变的短路电流密度,且纤锌矿的短路电流密度明显低于闪锌矿的短路电流密度。

当壳尺寸 R_s=10 nm,高度 H=20 nm 时,不同应变条件下,开路电压与 R_n 的变化关系如图 6 所示。随着 R_n 的增加,开路电压表现出单调递减的趋势,其变化幅度也逐渐减小,这一现象与相应的带隙变化趋势(图 2)相一致。这是因为带隙的大小决定了电子从价带跃迁至导带所需的能量。当半导体材料被光照射时,电子吸收光子能量后从价带跃迁至导带,导致在价带处产生空穴,从而形成电子-空穴对。在开路状态下,这种较高能量的电子和空穴分离所产生的电势差相对较大,从而导致较高的开路

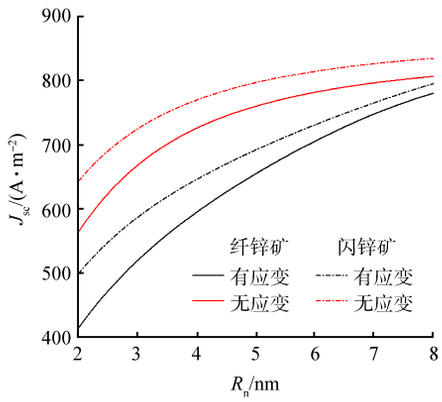


图5　有无应变下闪锌矿和纤锌矿量子点太阳能电池短路电流密度随R_n的变化

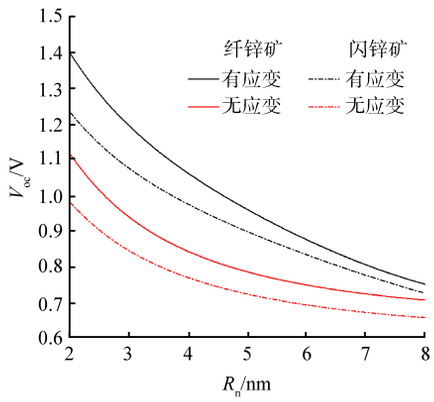


图6　有无应变下闪锌矿和纤锌矿量子点太阳能电池开路电压随R_n的变化

电压。所以,开路电压的大小在一定程度上取决于带隙的大小,较大的带隙通常会导致较高的开路电压[26]。此外,由于纤锌矿结构下体系的带隙要高于闪锌矿结构,所以纤锌矿材料的开路电压要高于闪锌矿材料的开路电压。

当壳尺寸R_s=10 nm,高度H=20 nm时,考虑多重激子效应下,体系的光电转换效率随着量子点R_n的变化关系如图7所示。多重激子效应对太阳能电池的转换效率带来了显著的提升。对M=1,2,3,4这4种情况进行详细的对比分析,显示随着M的增加,太阳能电池效率的增加幅度逐渐减小,这一结果与文献[13]报道的结果一致。此外,随着M的增加,效率曲线明显出现非单调变化的特点,且最大效率出现的位置随着M的增加,逐渐向大尺寸量子点方向移动。随着量子点半径的增加,不同M下曲线的差异增大。这是因为随着量子点半径的增加,其带隙逐渐减小,量子点能够吸收更多的光子,从而产生更多的电子-空穴对,故多重激子效应更为显

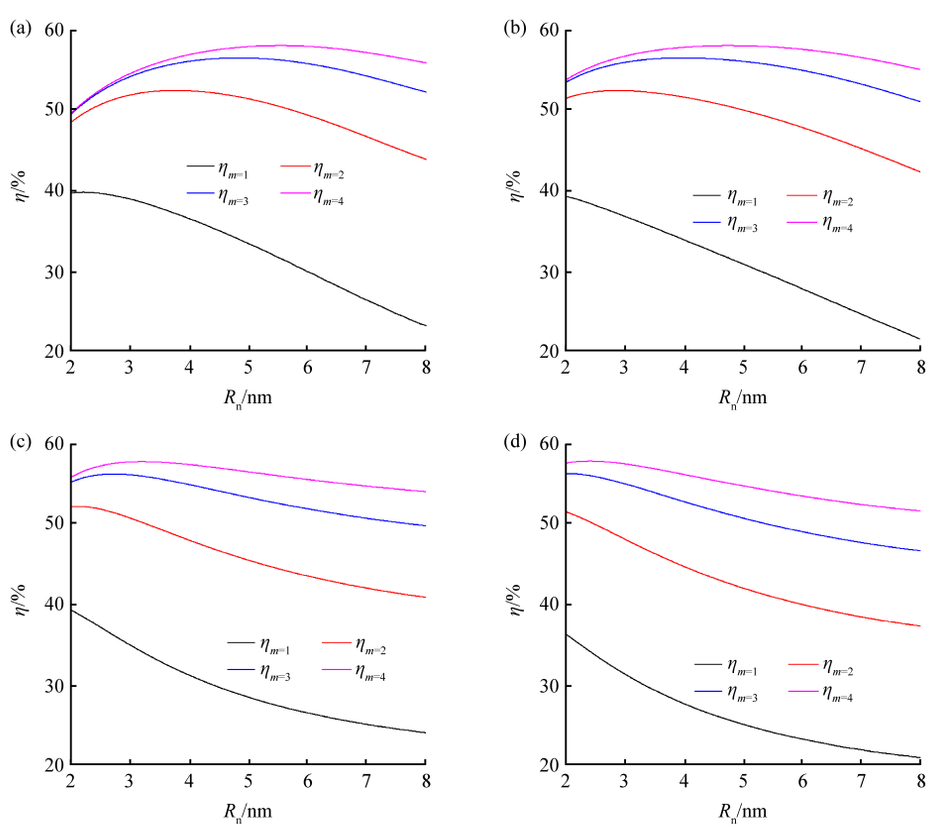


图7　多重激子效应、有无应变下闪锌矿和纤锌矿量子点太阳能电池转换效率随R_n的变化
(a)有应变纤锌矿;(b)有应变闪锌矿;(c)无应变纤锌矿;(d)无应变闪锌矿

著。此外,有应变的多重激子效应的趋势要略微高于无应变的多重激子效应。

3 结束语

在有效质量近似作用下,本文对应变纤锌矿和闪锌矿InAs/InP柱状量子点太阳能电池的光伏特性展开研究。探讨了应变及其产生的极化电场,以及多重激子效应影响下光电转换效率、开路电压及短路电流密度随体系尺寸的变化特征。结果表明,量子点的核尺寸增大与光电转换效率、带隙以及开路电压之间呈现单调递减的关系,而短路电流密度则呈现出单调递增的趋势。由于应变会增大量子点的带隙,所以会提高开路电压和光电转换效率,但会降低短路电流密度。考虑多重激子效应后,太阳能电池的转换效率明显提高。此外,通过对比2种结构,发现纤锌矿结构下体系的光电转换效率、开路电压高于闪锌矿结构,而短路电流密度则低于闪锌矿结构。这里需要说明的是,由于本文所研究的材料带隙相对于其他半导体材料如CdTe、CdS、ZnS和GaP等要小得多[27-28],所以得到的结果与以上这些材料区别明显。

参 考 文 献

[1] 王占国.半导体太阳能电池研发现状与发展趋势[J].江苏科技信息,2007(12):1-4.

[2] 谭华,倪朕伊,皮孝东,等.硅量子点在光电器件中的应用研究进展[J].激光与光电子学进展,2017,54(3):20.

[3] 陈其扬,石磊,闫祖威.内建电场影响下应变纤锌矿$ZnSnN_2/In_xGa_{(1-x)}N$柱形量子点太阳能电池的转换效率[J].发光学报,2021,42(4):534-541.

[4] SHOCKLEY W,QUEISSER H J. Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cells[J]. Journal of Applied Physics,1961,32(3):510-519.

[5] FANG D Q, ZHANG Y, ZHANG S L. Band gap engineering of $ZnSnN_2$/ZnO (001) short-period superlattices via built-in electric field[J]. Journal of Applied Physics,2016,120(21):215703.

[6] FENG Z Y, YAN Z W. Polaron effect on the optical rectification in spherical quantum dots with electric field [J]. Chinese Physics B,2016,25(10):446-451.

[7] KLIMOV V I, MIKHAILOVSKY A A, XU S, et al. Optical gain and stimulated emission in nanocrystal quantum dots[J]. Science,2000,290(5490):314-317.

[8] BEARD M C, ELLINGSON R J. Multiple exciton generation in semiconductor nanocrystals: toward efficient solar energy conversion[J]. Laser & Photonics Reviews,2008,2(5):377-399.

[9] LUQUE A,MARTI A,NOZIK A J. Solar cells based on quantum dots: multiple exciton generation and intermediate bands[J]. MRS Bulletin, 2007, 32(3): 236-241.

[10] NOZIK A J. Quantum dot solar cells[J]. Physica E (Low-dimensional Systems and Nanostructures),2002, 14(1/2):115-120.

[11] SCHALLER R D,KLIMOV V I. High efficiency carrier multiplication in PbSe nanocrystals: implications for solar energy conversion[J]. Physical Review Letters, 2004,92(18):186601.

[12] SHI L,YAN Z W. Electric field and shape effect on the linear and nonlinear optical properties of multi-shell ellipsoidal quantum dots [J]. Superlattices and Microstructures,2016,94:204-214.

[13] HANNA M C,NOZIK A J. Solar conversion efficiency of photovoltaic and photoelectrolysis cells with carrier multiplication absorbers[J]. Journal of Applied Physics, 2006,100(7):74510.

[14] LIN C C,LIU W L,SHIH C Y. Detailed balance model for intermediate band solar cells with photon conservation [J]. Optics Express, 2011, 19(18): 16927-16933.

[15] SHI L,YAN Z W. Binding energy and photoionization cross section of piezoelectric core/shell quantum dots [J]. Physics Letters A,2023,466:128725.

[16] HAJLAOUI C, PEDESSEAU L, RAOUAFI F, et al. First-principles density functional theory study of strained wurtzite InP and InAs[J]. Journal of Physics D (Applied Physics),2013,46(50):505106.

[17] VURGAFTMAN I, MEYER J R, RAM-MOHAN L R. Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys[J]. Journal of Applied Physics,2001,89 (11):5815-5875.

[18] BOXBERG F, SONDERGAARD N, XU H Q. Photovoltaics with piezoelectric core－shell nanowires [J]. Nano Letters,2010,10(4):1108-1112.

[19] KOH T S, XU X, SPECTOR H N, et al. Excitons in semiconductor quantum discs[J]. Journal of Physics (Condensed Matter),2001,13(7):1485-1498.

[20] WAGNER J M, BECHSTEDT F. Properties of strained wurtzite GaN and AlN: Ab initio studies[J]. Physical Review B,2002,66(11):5202.

[21] RABINOVITCH A, ZAK J. Electrons in crystals in a finite-range electric field[J]. Physical Review B,1971,4 (8):2358-2370.

[22] DUQUE C A, MORALES A, PORRASMONTENEGRO N, et al. Effects of applied electric fields on the infrared transitions between hydrogenic states in GaAs low-dimensional systems[J]. Physical Review B, 1997, 55(16): 10721-10728.

[23] CAMPOS T, FARIA-JUNIOR P E, GMITRA M, et al. Spin-orbit coupling effects in zinc-blende InSb and wurtzite InAs nanowires: realistic calculations with multiband $k\cdot p$ method[J]. Physical Review B, 2018, 97(24): 245402.

[24] VURGAFTMAN I, MEYER J A, RAM-MOHAN L R. Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys[J]. Journal of Applied Physics, 2001, 89(11): 5815-5875.

[25] TEDESCHI D, DE-LUCA M, GRANADOS-DEL-AGUILA A, et al. Value and anisotropy of the electron and hole mass in pure wurtzite InP nanowires[J]. Nano Letters, 2016, 16(10): 6213-6221.

[26] ZHANG J, SHI L, YAN Z W. Conversion efficiency of strained wurtzite $In_xGa_{1-x}N/ZnSnN_2$ core/shell quantum dot solar cells under external electric field [J]. Optoelectronics Letters, 2023, 19(3): 144-150.

[27] SHI L, YAN Z W. Conversion efficiency of strained core/shell quantum dot solar cell: converting from type-I to type-II structures [J]. Journal of Applied Physics, 2019, 125(17): 174302.

[28] SAHIN M. Effect of the shell material and confinement type on the conversion efficiency of core/shell quantum dot nanocrystal solar cells [J]. Journal of Physics (Condensed Matter), 2018, 30(20): 205301.

(责任编辑:兰丽丽)

(上接第38页)

[16] DEVAUX F, MOREAU P A, DENIS S, et al. Computational temporal ghost imaging [J]. Optica, 2016, 3(7): 698-701.

[17] JIANG W J, LI X Y, JIANG S, et al. Increase the frame rate of a camera via temporal ghost imaging[J]. Optics and Lasers in Engineering, 2019, 122: 164-169.

[18] TIAN Y, GE H, ZHANG X J, et al. Acoustic ghost imaging in the time domain [J]. Physical Review Applied, 2020, 13(6): 064044.

[19] XU Y K, SUN S H, LIU W T, et al. Detecting fast signals beyond bandwidth of detectors based on computational temporal ghost imaging [J]. Optics Express, 2018, 26(1): 99-107.

[20] 孙宝清,王玉鹏.时域鬼成像及其应用[J].中国激光, 2021, 48(12): 343-360.

[21] PAN Z L, ZHANG L H. Optical cryptography-based temporal ghost imaging with chaotic laser [J]. IEEE Photonics Technology Letters, 2017, 29(16): 1289-1292.

[22] WANG Y P, CHEN H L, JIANG W J, et al. Optical encryption for visible light communication based on temporal ghost imaging with a Micro-LED [J]. Optics and Lasers in Engineering, 2020, 134: 106290.

[23] KANG Y, ZHANG L H, YE H L, et al. Hybrid encryption scheme based on temporal ghost imaging[J]. Applied Physics B, 2021, 127(8): 124.

[24] CHEN X W, JIN M Y, LIN R Z, et al. Visible light communication based on computational temporal ghost imaging and Micro-LED-based detector[J]. Optics and Lasers in Engineering, 2022, 152: 106956.

[25] CHEN X W, JIN M Y, CHEN H L, et al. Computational temporal ghost imaging for long-distance underwater wireless optical communication [J]. Optics Letters, 2021, 46(8): 1938-1941.

[26] KANG Y, ZHANG L H, YE H L, et al. One-to-many optical information encryption transmission method based on temporal ghost imaging and code division multiple access[J]. Photonics Research, 2019, 7(12): 1370-1380.

[27] DIFFIE W, HELLMAN M E. New directions in cryptography [J]. IEEE Transactions on Information Theory, 1976, 22(6): 644-654.

[28] RIVEST R L, SHAMIR A, ADLEMAN L. A method for obtaining digital signatures and public-key cryptosystems [J]. Communications of the ACM, 1978, 21(2): 120-126.

[29] ZHANG C N. Integrated approach for fault tolerance and digital signature in RSA [J]. IEE Proceedings-Computers and Digital Techniques, 1999, 146(3): 151-159.

[30] HUANG Y L, LEU F Y, YOU I, et al. A secure wireless communication system integrating RSA, Diffie-Hellman PKDS, intelligent protection-key chains and a data connection core in a 4G environment[J]. The Journal of Supercomputing, 2014, 67: 635-652.

[31] VANSTONE S A, ZUCCHERATO R J. Short RSA keys and their generation[J]. Journal of Cryptology, 1995, 8: 101-114.

[32] BHASKAR R, HEGDE G, VAYA P R. An efficient hardware model for RSA encryption system using Vedic mathematics[J]. Procedia Engineering, 2012, 30: 124-128.

(责任编辑:兰丽丽)