

压电半导体光电池输出特性的机械调控研究*

杨浩桢¹, 刘金喜², 杨万里¹, 胡元太¹

(1. 华中科技大学 航空航天学院, 武汉 430074;

2. 石家庄铁道大学 工程力学系, 石家庄 050043)

摘要: 压电 PN 结光电池的性能与其内部的势垒构型和载流子分布密切相关, 因此其输出性能可以通过压电性诱导的压电势改变载流子的输运特性来调控。然而, 经典 PN 结模型因引入了耗尽层等假设而无法描述势垒区内多物理场与载流子的耦合作用, 导致其预测结果严重失真。因此, 针对光电池的核心基本单元 PN 结, 建立了力-电-光与载流子全域耦合作用的多场耦合模型, 研究了外加机械载荷对 ZnO 光电池输出特性的调控机理。结果表明: 光照强度固定时, 光电池的短路电流、开路电压和最大输出功率均随着压应力的增大而逐渐增加; 相反, 拉应力不利于光电池性能的提升。此外, 研究还发现, 加载区范围大于光照区或 n/p 区单侧同时受到光照和压应力作用时的调控效果更佳。

关键词: ZnO PN 结; 压电效应; 光电池; 数值模拟

中图分类号: O29 **文献标志码:** A **DOI:** 10.21656/1000-0887.450088

Study on Mechanical Modulation of Output Characteristics in Piezoelectric Semiconductor Photovoltaic Cells

YANG Haozhen¹, LIU Jinxi², YANG Wanli¹, HU Yuantai¹

(1. School of Aerospace Engineering, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, P.R.China;

2. Department of Engineering Mechanics, Shijiazhuang Tiedao University, Shijiazhuang 050043, P.R.China)

Abstract: The performances of piezoelectric PN junction photovoltaic cells are closely related to the internal potential barrier configurations and the distributions of carriers, and can be tuned through carrier transport characteristic changes by the piezopotentials under the piezo-effect. However, the classical PN junction model fails to describe the coupling effect between multiple physical fields and carriers in the potential barrier zone due to the depletion layer assumptions and others, and in turn gives severely distorted results. Herein a mechanics-electricity-photonics-carrier global multi-field coupling model was developed to investigate the tuning mechanism for mechanical loadings on the output characteristics of ZnO photovoltaic cells. The numerical re-

* 收稿日期: 2024-04-07; 修订日期: 2024-07-08

基金项目: 国家自然科学基金(12232007;12102141;11972164;U21A20430);河北省智能材料力学协同创新中心开放课题(KF2024002)

作者简介: 杨浩桢(1997—),男,博士生(E-mail: haozhenyang@ hust.edu.cn);

杨万里(1992—),男,讲师,博士(通讯作者. E-mail: wanli_yang_nt1@163.com);

胡元太(1964—),男,教授,博士,博士生导师(通讯作者. E-mail: hudeng@263.net).

引用格式: 杨浩桢, 刘金喜, 杨万里, 胡元太. 压电半导体光电池输出特性的机械调控研究[J]. 应用数学和力学, 2024, 45(10): 1279-1287.

sults indicate that, the short-circuit current, the open-circuit voltage, and the maximum output power of the photovoltaic cell increase with the compressive stress under a fixed light intensity, while tensile stresses are not conducive to improving the performances of photovoltaic cells. In addition, a better tuning effect occurs with a loading region wider than the illuminated region, or with both these two external fields acting in the same side of the n/p-zone.

Key words: ZnO PN junction; piezoelectric effect; photovoltaic cell; numerical analysis

0 引 言

随着能源危机和环境污染问题的日益严重,清洁、高效的能源转换技术已成为全球关注的焦点.光电池作为一种可再生能源转换技术,因其可持续、无污染的特点而备受瞩目.以氧化锌(ZnO)、氮化镓(GaN)和碳化硅(SiC)等为代表的第三代半导体材料具有宽禁带、高热导率、高击穿场强和高键和能等优点^[1],被应用在航空航天^[2]、快速充电^[3]、5G技术^[4]和新能源^[5]等领域.其中,ZnO因具有高稳定性、高电导率和高电子亲和能等优势而在光电池领域得到了广泛关注^[6-7].同时,ZnO还具有比较显著的压电性,可实现机械信号和电信号的实时转换.因此,ZnO这类压电半导体在机械载荷作用下将诱导压电势,而压电势又能改变内部载流子的输运行为,这使得器件性能的机械调控成为可能.基于此,王中林院士提出了压电光电子学^[8],将压电效应与光电转换相结合,实现了机械加载对压电半导体光电器件的性能调控,这为新型光电器件的设计和性能优化提供了新的思路.利用压电光电子效应,Sun等^[9]通过在柔性塑料基底上生长ZnO纳米线(NW)阵列,使其成为钙钛矿太阳能电池(PSCs)的电子传输层;研究发现,PSCs在1.88%弯曲应变下的能量转化效率从9.3%提高到了12.8%.Zhu等^[10]制备了ZnO/Si异质纳米光伏器件,发现内部的ZnO NW阵列不仅可以增强光吸收,还能通过应变诱导的极化电荷改变异质结的能带结构,进而有效分离光照产生的电子-空穴对,将电池的转换效率从8.97%提高到了9.51%.此外,Zhu等^[11]基于n-ZnO/p-SnS核壳NW阵列制备的柔性太阳能电池,施加弯曲变形可将其相对转换效率提高37.3%.这些研究都表明了机械加载可以提高压电半导体光电池的性能.

常见光电池的核心基本单元是PN结,通常由两个分别掺杂为n型和p型的半导体结构组成,其中电子/空穴分别是n/p区的主要载流子,一般称为多子;而与之对应的n/p区中的空穴/电子一般称为少子.当二者结合形成一个整体时,交界面附近的空穴必然会在浓度梯度的诱导下从p区扩散到n区,而电子将从n区扩散到p区.空穴离开后会留下带负电的电离受主,从而在交界面附近的p区一侧出现一个负电荷区,同理在n区一侧出现正电荷区,这两片区域构成了空间电荷区.空间电荷区中的电荷产生了从n区指向p区的电场,称为内建电场.在内建电场作用下,载流子做漂移运动,方向与扩散运动相反.两种运动形成动态平衡后,PN结具有统一的Fermi能级,空间电荷区中的能带弯曲形成势垒,所以空间电荷区也被称为势垒区.光电池工作依靠内建电场驱使势垒区内的光生电子-空穴对分离与向外输运,因此其性能与结界面附近的势垒构型密切相关.另外,交界面附近的物理场与载流子剧烈变化,可以诱导出丰富的物理现象.然而,以往光电器件性能的机械调控研究大多是基于Shockley模型,该模型中引入了耗尽层假设、小注入假设和Boltzmann边界条件等一系列近似^[12].这样的假设存在以下局限性:1)模型开环,切断了势垒区及两侧载流子运动与势垒构型之间的联系;2)忽略了势垒区中电子和空穴的复合/产生机制;3)非热平衡状态下,耗尽层边界近似采用了Boltzmann分布规律;4)非热平衡状态下,假设远离PN结界面处的电场为零.综上,Shockley模型仅能定性描述PN结的基本特征,并且由于没有明确定义多子电流,无法阐明多子电流与少子电流的相互作用规律^[13-14],更无法揭示势垒区内力-电-载流子的耦合作用规律,导致其预测的电学性能严重失真.因此,建立完备的PN结光电池模型,深入研究压电半导体光电池性能的机械调控机理,对于推动光电池技术的发展和具有重要应用具有重要意义.

本文采用唯象的压电半导体理论,以ZnO同质PN结光电池为研究对象,摒弃了耗尽层和小注入等假设,建立了全域耦合的力-电-光与载流子的多场耦合作用模型,研究了机械加载对压电半导体光电池光伏特性和输出功率等电学性能的作用规律.结果表明,在固定光照下,压应力引起的电场增量将驱动光照区外少

子进入光照区,相当于增加了光生载流子数量;同时,载流子的再分布增大了势垒高度,促进了光照产生的电子-空穴对的分离,从而有效地提高了光电池的输出性能。

1 压电半导体光电池模型

当半导体材料受到光照后,一旦电子吸收了足够的能量,将从价带跃迁至导带,并在价带中留下一个空穴,进而形成电子-空穴对。这种因电子由带与带之间跃迁所形成的吸收过程称为本征吸收。由本征吸收产生的电子-空穴对,在 PN 结势垒区内建电场的作用下,p 区的电子穿过 PN 结进入 n 区,n 区的空穴进入 p 区,从而在 PN 结两端形成光生电动势,这一现象即为 PN 结的光生伏特效应^[12]。需要注意的是,要发生本征吸收,如式(1)所示,光子的能量必须大于等于半导体的禁带宽度 E_g :

$$hv \geq E_g, \quad (1)$$

其中 h 为 Planck 常数, v 为光的频率,可表示为

$$v = c_0/\lambda, \quad (2)$$

其中 c_0 为真空光速, λ 为光的波长,将式(2)代入式(1),则本征吸收的波长上限值 λ_{\max} 可表示为

$$\lambda_{\max} = \frac{1.24}{E_g(\text{eV})} \mu\text{m}. \quad (3)$$

将 ZnO 的禁带宽度 $E_g = 3.34 \text{ eV}$ 代入式(3),可知 ZnO 的吸收上限值为 $\lambda_{\max} = 0.37 \mu\text{m}$ 。如图 1 所示,本文不考虑其他吸收过程,使用固定波长的紫外激光作为入射光源,其入射方向垂直于光电池的轴线。另外,入射波长参考实验数据^[15-16]取为 $\lambda = 0.36 \mu\text{m}$ 。在光照区域,光生载流子的产生率可写作^[17-18]

$$G_L = \frac{\alpha I_0 \lambda}{hc_0} e^{-\alpha z}, \quad (4)$$

其中 I_0 表示初始光照强度, z 表示光的入射深度; α 为材料的吸收系数,可表示为

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda}, \quad (5)$$

其中 k 为材料的消光系数^[19]。

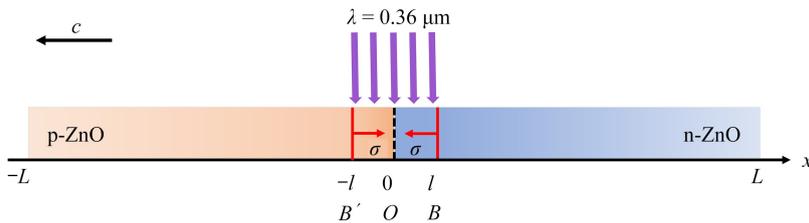


图 1 ZnO 光电池模型示意图

Fig. 1 Schematic diagram of the ZnO photovoltaic cell model

另外,由于结构细长,可将图 1 所示的 ZnO 光电池结构简化为一维(1D)模型来描述其物理特性^[20]。因此,平衡方程可写成

$$\sigma_{,x} = 0. \quad (6)$$

根据静电电荷平衡条件,载流子浓度和电位移 D 的关系可由式(7)所示的 Gauss 定理表示:

$$D_{,x} = q(p - p_0 - n + n_0), \quad (7)$$

式中, n 和 p 代表电子和空穴的浓度, n_0 和 p_0 是初始载流子浓度。考虑完全电离,此时 $(N_A, N_D) = (p_{p_0} - n_{p_0}, n_{n_0} - p_{n_0})$, 下标“p”和“n”分别代表 p 区和 n 区,其中 N_A 和 N_D 分别表示 p 区的受主和 n 区的施主掺杂浓度, $q = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C}$ 是元电荷。

为考虑 Poisson 效应的影响将模型进行应力放松,相应的本构方程可改写成

$$\sigma = \hat{c}S - \hat{e}E, \quad (8)$$

$$D = \hat{e}S + \hat{\epsilon}E, \quad (9)$$

其中 $\hat{c} = c_{33} - 2c_{13}^2/(c_{11} + c_{12})$, $\hat{e} = e_{33} - 2e_{31}e_{13}/(c_{11} + c_{12})$ 和 $\hat{\epsilon} = \epsilon_{33} + 2e_{31}^2/(c_{11} + c_{12})$ 分别是应力放松修正

后的弹性常数、压电常数和介电常数^[21]; $S = u_{,x}$ 和 $E = -\phi_{,x}$ 分别表示应变和电场.需要指出的是,现有研究^[21]表明载荷应施加在 PN 结界面附近,否则载流子的再分布将屏蔽极化电场,因此本文在交界面附近施加了一对对称的拉/压应力 (σ).当 PN 结受到机械载荷作用后,将式(8)代入式(9),则 D 可表示为

$$D = \begin{cases} (\hat{e}/\hat{c})\sigma + \bar{\varepsilon}E, & \text{in loaded sub-regions,} \\ \bar{\varepsilon}E, & \text{in non-loaded sub-regions,} \end{cases} \quad (10)$$

式中 $\bar{\varepsilon} = \hat{\varepsilon} + \hat{e}^2/\hat{c}$.

在光照区域,载流子电流的连续性方程可表示为

$$\begin{cases} \mu_n n E_{,x} + \mu_n E n_{,x} + D_n n_{,xx} - R + G_L = 0, \\ -\mu_p p E_{,x} - \mu_p E p_{,x} + D_p p_{,xx} - R + G_L = 0; \end{cases} \quad (11)$$

在无光照区域,载流子电流连续性方程可表示为

$$\begin{cases} \mu_n n E_{,x} + \mu_n E n_{,x} + D_n n_{,xx} - R = 0, \\ -\mu_p p E_{,x} - \mu_p E p_{,x} + D_p p_{,xx} - R = 0, \end{cases} \quad (12)$$

式中 (μ_n, μ_p) 和 (D_n, D_p) 分别是载流子的迁移率和扩散系数,扩散系数可通过 Einstein 关系式 $D_{(n,p)} = \mu_{(n,p)} k_0 T/q$ 给出. k_0 为 Boltzmann 常数, T 表示温度,本文中选取常温 300 K,复合率 R 如下:

$$R = \frac{np - n_i^2}{\tau_p(n + n_i) + \tau_n(p + n_i)}, \quad (13)$$

其中 (τ_n, τ_p) 分别表示非平衡电子和空穴的寿命, n_i 表示 ZnO 的本征载流子浓度.

将式(2)、(10)和(13)代入式(9)、(11)和(12),将获得载流子和电势的控制方程.其连续性条件和边界条件为:

- 1) 电势、电位移、载流子和载流子电流密度在 PN 结界面和加载点处连续;
- 2) $\phi(-L) = 0$, $\phi(L) = V_D^0 - V$;
- 3) $\Delta n_p(-L) = n_p - n_{p0} = 0$, $\Delta p_n(L) = p_n - p_{n0} = 0$;
- 4) $\Delta p_p(-L) = p_p - p_{p0} = 0$, $\Delta n_n(L) = n_n - n_{n0} = 0$.

在上述条件中, Δn 和 Δp 代表非平衡载流子. $x = \pm L$ 代表 PN 结的两端, V 表示对外输出的光生电动势. PN 结的初始势垒 V_D^0 可表示为^[22]

$$V_D^0 = 2.3(kT/q) \lg(N_A N_D / n_i^2). \quad (14)$$

以 ZnO 中的耗尽层宽度 l 为参考来设置加载区长度,其中 $l = \sqrt{\varepsilon V_D^0 (N_A + N_D) / (2q N_A N_D)}$ ^[22].无特别说明时,光照施加在 $B'B$ 区域内,长度为 $2l$;加载点设置在 B' 点和 B 点,即加载区与光照区域重合.ZnO 的 c 轴方向由 n 区指向 p 区,其材料参数如下^[23]:

$$\begin{cases} c_{11} = 209.7 \text{ GPa}, c_{12} = 121.1 \text{ GPa}, c_{13} = 105.1 \text{ GPa}, c_{33} = 210.9 \text{ GPa}, \\ e_{31} = 0.537 \text{ C/m}^2, e_{33} = -1.32 \text{ C/m}^2, \varepsilon_{33} = 9.16\varepsilon_0, \tau_n = \tau_p = 1 \times 10^{-5} \text{ s}, \\ n_i = 1 \times 10^{12} \text{ m}^{-3}, \mu_n = 0.0205 \text{ m}^2/(\text{V}\cdot\text{s}), \mu_p = 0.007 \text{ m}^2/(\text{V}\cdot\text{s}). \end{cases} \quad (15)$$

ZnO PN 结的两种掺杂浓度为 $N_A = N_D = 1 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$,横截面积为 $2.598 \times 10^{-14} \text{ m}^2$ ^[24-25].由于本文使用 1D 模型,参考结构横截面积计算所得的直径值,结合式(4),将 G_L 在横截面上进行等效平均化处理,其大小仅与 I_{t0} 有关.为进一步满足准中性区条件,模型长度应远大于非平衡少子的平均扩散长度 $L_{(n,p)} = \sqrt{D_{(n,p)} \tau_{(n,p)}}$,并且由 Einstein 关系式与式(15)可知 $L_n > L_p$,因此本文中 $L = 150L_n$.

2 ZnO 光电池性能的机械调控

2.1 光电池基本特性

光生电动势 V 表示光电池向外输出的电势大小,其值取决于外接电阻 R_{out} 的大小,即 $V = IR_{\text{out}}$, I 为整个回路的电流.当 $R_{\text{out}} = 0$ 时, V 也为 0,代表短路状态,此时整个回路中电流值最大,即为短路电流 I_{sc} .然而,随着 R_{out} 逐渐增大,光生电动势 V 逐渐增大,PN 结势垒高度会逐渐降低.当 R_{out} 趋近于无穷大时,输出的电流为

0,即为开路状态,此时 V 达到 PN 结光电池所能提供的最大值,就是开路电压 V_{oc} 。根据前文描述,光生电动势产生的驱动力是 PN 结的内建电场,所以开路电压的值一般不会大于 PN 结的势垒高度值。 J_{sc} 与 V_{oc} 是表征光电池性能的基本参数,可通过改变施加在光电池上的外偏压模拟外电路变化的过程^[26-27],获得光电池 $I-V$ 曲线,曲线与 I 轴和 V 轴的交点分别为 J_{sc} 与 V_{oc} 。

首先,为验证本文模型的可行性,图 2(a) 给出了光电池在不同光照强度下,且无机械加载时的 $J-V$ 曲线,从曲线中获取 J_{sc} 与 V_{oc} ,并与 Shockley 模型所得值对比。需要特别指出的是,为方便与 Shockley 模型比较,本小节中光照区域范围为 p 区和 n 区非平衡少子的平均扩散长度之和 ($-L_n \leq x \leq L_p$)。由图 2(b) 可知,在一定范围内,随着光照强度的增加, J_{sc} 与 V_{oc} 都逐渐增加,但 V_{oc} 会趋于稳定且上限值大小没有超过 PN 结的初始势垒高度 V_D^0 ,这符合光电池的基本规律^[28]。通过本文模型获得的 J_{sc} 与 V_{oc} 都明显小于 Shockley 模型的所得值,与实验测试^[29-30] 结论一致,这是由于后者忽略了势垒区中电子和空穴的复合/产生作用,相当于在势垒区内产生的光生载流子没有损耗,导致其所测的值偏大。因此,本文所用模型可以更精确地描述光电池的基本特性与性能变化规律。

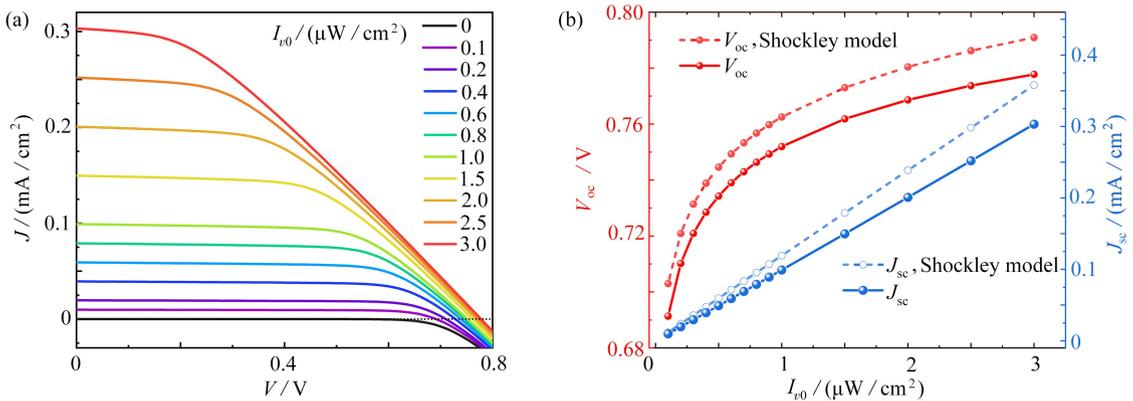


图 2 不同光照强度下光电池的伏安特性曲线和开路电压与短路电流

Fig. 2 $J-V$ characteristic curves and J_{sc} and V_{oc} of the photovoltaic cell under different light intensities

注 为了解释图中的颜色,读者可以参考本文的电子网页版本,后同。

2.2 机械加载对光电池性能的影响

为探究机械加载对 ZnO 光电池输出性能的影响,以初始光照强度 $I_{0,0} = 0.1 \mu\text{W}/\text{cm}^2$ 时为例进行分析。图 3(a) 给出了不同大小机械加载下光电池的 $J-V$ 曲线,应力 σ 的正负分别代表拉伸和压缩,并从曲线中获取 V_{oc} 和 J_{sc} 。由图 3(b) 可知, V_{oc} 与 J_{sc} 随着压应力的增加逐渐增大;而随着拉应力增大,二者则明显减小。这表明压应力能提高光电池的性能,而拉应力将大幅削弱光电池的性能,因此本文将重点分析压应力提高光电池性能的原因。为说明机械加载对光电池性能的调控机理,图 4 给出了不同大小压应力作用下,势垒区附近的电场增量 $\Delta E(E|_{\sigma} - E|_{\sigma=0})$ 与电势 ϕ , 其中 $\bar{x} = x/l$, $|\bar{x}| \leq 1$ 的范围即为势垒区,同时也是光照区域,加载点 B' 和 B 分别位于 $\bar{x} = -1, 1$ 。由于载流子再分布的屏蔽作用,远离势垒区的区域各物理量没有明显变化,为了便于比较,图 4(a) 中只展示了 $|\bar{x}| \leq 1.25$ 的区域,图 4(b) 只展示了 $|\bar{x}| \leq 3$ 的区域。

由图 4(a) 可知,随着压应力的增大,电场变化量逐渐增大。具体表现为,加载区 $B'B$ 内的电场增量为负 ($\Delta E < 0$), B' 点左侧的电子和 B 点右侧的空穴将被吸入加载区 $B'B$ 中。这些少数子进入到加载区,相当于增加了光照区内光生载流子的数量。同时,负电场增量吸引加载区外两侧的少数子进入加载区,使 B' 点和 B 点处的少数子浓度降低,会引起加载区外的少数子往加载区 $B'B$ 扩散,导致加载区外的电场发生变化。而 B'^- 与 B^+ 的电场得到增强 ($\Delta E > 0$), 会对 B'^+ 处的空穴与 B^- 处的电子产生往回的推力作用,使被吸入加载区 $B'B$ 的少数子可以更多地保留在 $B'B$ 中。因此, B' 点的电子浓度降低,空穴浓度升高; B 点则是电子浓度升高,空穴浓度降低,这使得加载点 B' 和 B 附近的复合率降低,同时这种载流子的再分布会诱导如图 4(b) 所示的势垒构型变化。随着压应力的增大,加载区内的势垒高度逐渐增加,这使光生载流子更容易穿过 PN 结交界面到达对侧,进而有助于光生电子-空穴对的分离。相反,拉应力模式下,会吸引势垒区外的多数子进入势垒区内,这使得大

量光生载流子在势垒区内被复合,相当于减少了光生载流子数量,同时拉应力引起的载流子再分布会降低势垒高度,甚至出现反型的情况^[21],将抑制光生电子-空穴对的分离.从前文光电池的发电机理中可知,短路电流与载流子产生率相关,开路电压与器件中复合程度相关^[27].这与研究结果相对应,压应力通过减少复合和增加光生载流子数量来提高开路电压和短路电流;而拉应力作用下的情况正相反,吸引多子进入了光照区内,既增大了复合率,又使得光生载流子因被复合而大幅减少,因此开路电压和短路电流均明显减小.另外,因为压应力调控的是少子,所能引起的载流子变化量较小,因此开路电压和短路电流的变化量相比于拉应力作用时变化较小.

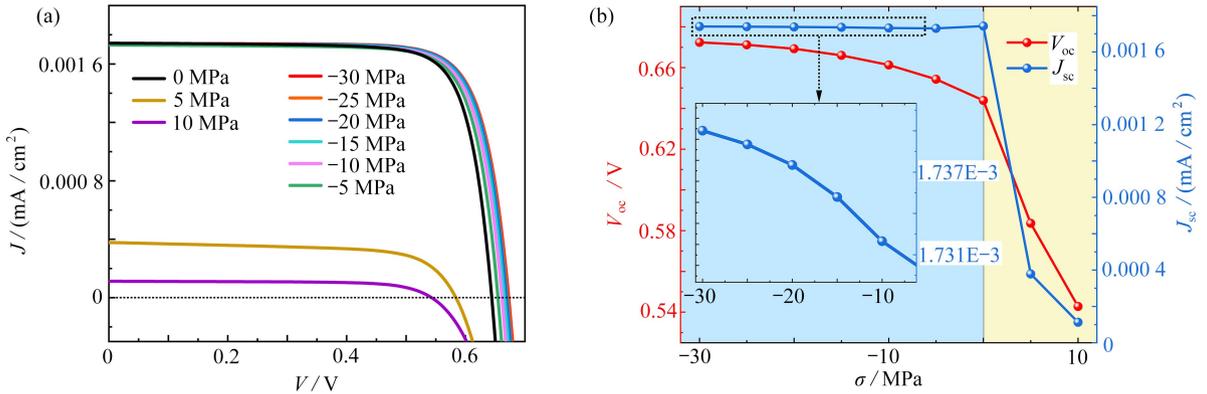


图3 不同大小加载下光电池的伏安特性曲线和开路电压与短路电流

Fig. 3 J - V characteristic curves and J_{sc} and V_{oc} of the photovoltaic cell under different applied stresses

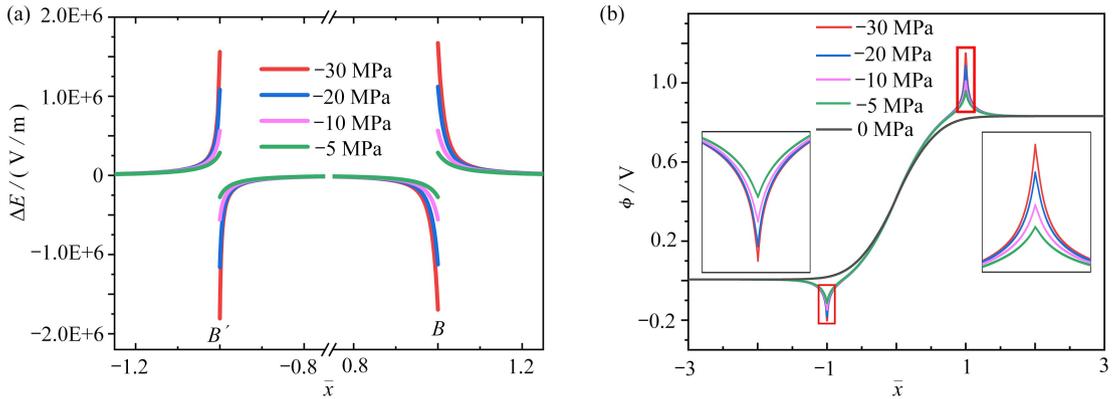


图4 不同大小压应力下光电池内的电场增量和电势

Fig. 4 The electric field increments and potentials of the photovoltaic cell under different applied compressive stresses

与此同时,输出功率 $P = IV$ 也是衡量光电池性能的重要指标之一.本文以不加载时的最大输出功率 P_{0max} 为参考,将输出功率无量纲为 $\Delta\bar{P} = (P - P_{0max})/P_{0max}$, 压电半导体光电池的 P - V 特性如图5所示,由图可知,机械加载能明显调控其 P - V 特性,并且压应力越大, $\Delta\bar{P}$ 越大,当 $\sigma = -30$ MPa 时,最大值为 4.2%.这是因为压应力作用时光生载流子数量增加,使得相同的光生电动势时可以产生更大的输出电流,进而使光电池输出功率得到提高.

2.3 光照区与加载区的分布对光电池性能机械调控效果的影响

为进一步研究机械加载调控光电池性能的影响因素,本文通过改变光照区与加载区的长度和位置,来研究其对光电池性能机械调控效果的影响.以加载点位置和光照区域范围的不同区分,选取以下具有代表性的几种组合,应力大小变化范围均为 $-30 \text{ MPa} \leq \sigma \leq 0 \text{ MPa}$.各个组合下输出功率变化量的最大值 $\Delta\bar{P}_{max}$ 如表

1 所示,表中符号“-”代表该组合下机械加载不会提高光电池的输出功率,即 $\Delta\bar{P}_{\max} \leq 0$ 。

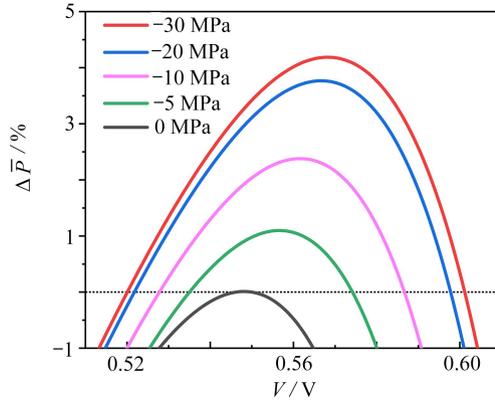


图 5 不同大小压应力下光电池的无量纲化输出功率

Fig. 5 The normalized output power changes of the photovoltaic cell under different applied compressive stresses

表 1 不同加载区与光照区组合作用下光电池的输出功率变化

Table 1 Normalized output power changes of the photovoltaic cell under different loadings and illuminations in different regions

\bar{x}			\bar{x}		
loaded point position	illuminated sub-region	$\Delta\bar{P}_{\max} / \%$	loaded point position	illuminated sub-region	$\Delta\bar{P}_{\max} / \%$
0, 1	[0, 1]	6.5	-0.5, 0.5	[-0.5, 0.5]	5.0
-1, 1	[0, 1]	4.7	-1, 1	[-0.5, 0.5]	2.2
-1, 0	[0, 1]	-	-0.5, 0.5	[-1, 1]	-
0, 1	[-1, 1]	-	-1, 1	[-2, 2]	-

比较表 1 结果可知,在机械加载施加在势垒区附近的前提下,加载区域与光照区域重合或者大于光照区域时,才能通过压应力作用有效提高光电池的输出特性,其中调控效果最好的是光照和加载区域均在 n 区势垒区的组合,类似地,将光照区 ($\bar{x} \in [-1, 0]$) 和加载点 ($\bar{x} = -1, 0$) 均设置在 p 区势垒区也具有相同的调控效果。

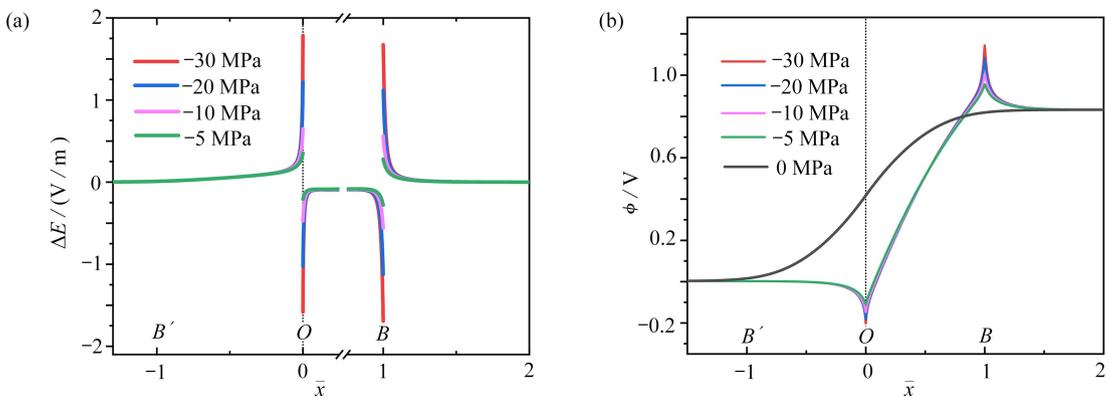


图 6 光照和加载区域都在 n 区时光电池的电场增量和电势

Fig. 6 The electric field increments and potentials of the photovoltaic cell with both the illumination and loading regions in the n-zone

以 n 区的势垒区同时受到光照和压应力作用时为例,如图 6(a) 所示,压应力作用下加载区 OB 中 $\Delta E < 0$, 这对加载区外两侧的少子有一定的向内吸引作用,并对 O^+ 处的空穴与 B^- 处的电子产生往回的推力作用,使空穴在 O 点堆积,电子在 B 点堆积,这与对称加载(加载点关于 O 点对称)时相同,但由于 O 点为交界面处,多子与少子的初始浓度差最小,此处电场引起的载流子浓度变化更明显,复合率降低更多,作用范围也更

大.如图6(b)所示,相比于对称加载时只有加载点附近的势垒发生变化,此时不仅n区内的势垒高度明显增加,且相较无机械加载时整个势垒区内低电势的范围得到了拓宽,这更有利于光照区产生的电子-空穴对的分离.同时p区没有光照,少子浓度相比于n区处于较低水平,加之交界面处的少子被吸入加载区,两种作用可以降低n区的光生载流子穿过交界面进入p区时的复合率,有利于光电池向外输送光生载流子.因此,相比于对称加载,这种非对称的加载方式可以获得更大的调控效果.以此类推,若加载区与光照区不重合,如n区光照p区加载,不仅p区内的势垒高度明显增加,且会拓宽整个势垒区内的高电势范围,这将抑制n区光生载流子向p区运动;若加载区小于光照区,加载区内穿过交界面的光生载流子在到达加载区外后易被复合,因此无法实现提高输出功率的作用.

3 结 论

本文摒弃耗尽层和小注入等假设,建立了力-电-光与载流子的多场耦合作用模型,并以ZnO同质PN结光电池为例,阐明了固定光照强度下机械加载调控光电池输出特性的机理.研究发现,机械加载可以驱动势垒区外少子进入加载区,相当于增加了光生载流子数量,并且载流子的再分布将降低加载点附近的复合率,增加势垒高度,促进光生电子-空穴对的分离,进而增大短路电流和开路电压,同时二者综合作用使得光电池输出功率增大.另外,研究还发现,在加载区设置在势垒区附近的前提下,加载区域应与光照区域重合或大于光照区域,否则机械加载将失去调控效果.相比于光照和压应力对称分布在PN结的整个势垒区,只将其施加在n/p区的势垒区的非对称加载方式可以获得更好的调控效果.

参考文献(References):

- [1] WANG Z L, WU W, FALCONI C, et al. Piezotronics and piezo-phototronics with third-generation semiconductors[J]. *MRS Bulletin*, 2018, **43**(12): 922-927.
- [2] 李骅, 刘敏, 刘金城, 等. 氧化锌气敏传感器性能的改善及在民航系统的应用[J]. 材料导报, 2014, **28**(21): 53-56. (LI Yan, LIU Min, LIU Jincheng, et al. Zinc oxide gas sensor: performance improvement and application in civil aviation system[J]. *Materials Review*, 2014, **28**(21): 53-56. (in Chinese))
- [3] 蔡蔚, 孙东阳, 周铭浩, 等. 第三代宽禁带功率半导体及应用发展现状[J]. 科技导报, 2021, **39**(14): 42-55. (CAI Wei, SUN Dongyang, ZHOU Minghao, et al. Third generation wide bandgap power semiconductors and their applications[J]. *Science & Technology Review*, 2021, **39**(14): 42-55. (in Chinese))
- [4] WU C, MEHLMAN Y, KUMAR P, et al. A phased array based on large-area electronics that operates at gigahertz frequency[J]. *Nature Electronics*, 2021, **4**: 757-766.
- [5] SHAISLAMOV U, KIM H, YANG J M, et al. CuO/ZnO/TiO₂ photocathodes for a self-sustaining photocell: efficient solar energy conversion without external bias and under visible light[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2020, **45**(11): 6148-6158.
- [6] CONSONNI V, BRISCOE J, KÄRBER E, et al. ZnO nanowires for solar cells: a comprehensive review[J]. *Nanotechnology*, 2019, **30**(36): 362001.
- [7] WIBOWO A, MARSUDI M A, AMAL M I, et al. ZnO nanostructured materials for emerging solar cell applications[J]. *RSC Advances*, 2020, **10**(70): 42838-42859.
- [8] YANG Q, GUO X, WANG W, et al. Enhancing sensitivity of a single ZnO micro-/nanowire photodetector by piezo-phototronic effect[J]. *ACS Nano*, 2010, **4**(10): 6285-6291.
- [9] SUN J, HUA Q, ZHOU R, et al. Piezo-phototronic effect enhanced efficient flexible perovskite solar cells[J]. *ACS Nano*, 2019, **13**(4): 4507-4513.
- [10] ZHU L, WANG L, PAN C, et al. Enhancing the efficiency of silicon-based solar cells by the piezo-phototronic effect[J]. *ACS Nano*, 2017, **11**(2): 1894-1900.
- [11] ZHU L, WANG L, XUE F, et al. Piezo-phototronic effect enhanced flexible solar cells based on n-ZnO/p-SnS core-shell nanowire array[J]. *Advanced Science*, 2017, **4**(1): 1600185.
- [12] 刘恩科, 朱秉升, 罗晋生. 半导体物理学[M]. 7版. 北京: 电子工业出版社, 2008. (LIU Enke, ZHU Bingsheng, LUO Jinsheng. *The Physics of Semiconductors*[M]. 7th ed. Beijing: Publishing House of Electronics Industry,

- 2008.(in Chinese))
- [13] YANG W, HONG R, YANG H, et al. A high performance piezoelectric hetero-junction based on the configuration reform on interfacial potential barrier[J]. *Composite Structures*, 2024, **328**: 117723.
- [14] YANG W, LIU J, XU Y, et al. A full-coupling model of PN junctions based on the global-domain carrier motions with inclusion of the two metal/semiconductor contacts at endpoints[J]. *Applied Mathematics and Mechanics(English Edition)*, 2020, **41**(6): 845-858.
- [15] IBRAHEM M A, VERRELLI E, LAI K T, et al. Dual wavelength (ultraviolet and green) photodetectors using solution processed zinc oxide nanoparticles[J]. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2017, **9**(42): 36971-36979.
- [16] YANG H, YANG W, HU Y. Experimental study on the influence of annealing temperature on the piezoelectric property of ZnO bulk single crystal[J]. *Materials Today Communications*, 2024, **38**: 108251.
- [17] XIE W, PENG W, WANG Y, et al. On the piezophototronic effect in heterojunction photodiode with type-II energy band; theoretical model for anisotype heterojunction[J]. *Physica Status Solidi (RRL): Rapid Research Letters*, 2023, **17**(9): 2300034.
- [18] GUO M, QIN G, LU C, et al. Photoexcitation dominated electrical behaviors in a nano GaN PN junction[J]. *Mechanics of Advanced Materials and Structures*, 2023; 1-7. DOI: 10.1080/15376494.2023.2242832.
- [19] AGUILAR O, DE CASTRO S, GODOY M P F, et al. Optoelectronic characterization of Zn_{1-x}Cd_xO thin films as an alternative to photonic crystals in organic solar cells[J]. *Optical Materials Express*, 2019, **9**(9): 3638.
- [20] LI S, CHENG R, MA N, et al. Analysis of piezoelectric semiconductor fibers under gradient temperature changes[J]. *Applied Mathematics and Mechanics(English Edition)*, 2024, **45**(2): 311-320.
- [21] YANG W, LIU J, HU Y. Mechanical tuning methodology on the barrier configuration near a piezoelectric PN interface and the regulation mechanism on I—V characteristics of the junction[J]. *Nano Energy*, 2021, **81**: 105581.
- [22] 黄昆, 韩汝琦. 半导体物理基础[M]. 北京: 科学出版社, 1979.(HUANG Kun, HAN Ruqi. *The Physical Basis of Semiconductors*[M]. Beijing: Science Press, 1979.(in Chinese))
- [23] YANG Y, YANG W, WANG Y, et al. A mechanically induced artificial potential barrier and its tuning mechanism on performance of piezoelectric PN junctions[J]. *Nano Energy*, 2022, **92**: 106741.
- [24] WANG Z L, YANG R, ZHOU J, et al. Lateral nanowire/nanobelt based nanogenerators, piezotronics and piezo-phototronics[J]. *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 2010, **70**(36): 320-329.
- [25] ZHANG C, WANG X, CHEN W, et al. An analysis of the extension of a ZnO piezoelectric semiconductor nanofiber under an axial force[J]. *Smart Materials and Structures*, 2017, **26**(2): 025030.
- [26] 沈亮. 新型结构异质结太阳能电池的研究[D]. 长春: 吉林大学, 2009.(SHEN Liang. Study on heterojunction solar cells fabricated by novel structure[D]. Changchun: Jilin University, 2009.(in Chinese))
- [27] 申衍伟. ZnO 异质结光电器件的制备及其性能研究[D]. 北京: 北京科技大学, 2016.(SHEN Yanwei. Studies on preparation and performance characteristics of ZnO based heterojunction optoelectronic devices [D]. Beijing: University of Science and Technology Beijing, 2016. (in Chinese))
- [28] 高平奇, 王子磊, 林豪, 等. 太阳能电池物理与器件[M]. 广州: 中山大学出版社, 2022.(GAO Pingqi, WANG Zil-ei, LIN Hao, et al. *The Physics and Devices of Solar Cells*[M]. Guangzhou: Sun Yat-sen University Press, 2022.(in Chinese))
- [29] HAVERKORT J E M, GARNETT E C, BAKKERS E P A M. Fundamentals of the nanowire solar cell; optimization of the open circuit voltage[J]. *Applied Physics Reviews*, 2018, **5**(3): 031106.
- [30] CUI Y, WANG J, PLISSARD S R, et al. Efficiency enhancement of InP nanowire solar cells by surface cleaning[J]. *Nano Letters*, 2013, **13**(9): 4113-4117.