

# Hetero-Solarzellen aus amorphem und kristallinem Silizium

**Dissertation**

zur

Erlangung des Doktorgrades

der Naturwissenschaften

(Dr. rer. nat.)

dem

Fachbereich Physik

der Philipps-Universität Marburg

vorgelegt von

Armin M. Froitzheim

aus Mühldorf a. Inn

Marburg/Lahn 2003



# Hetero-Solarzellen aus amorphem und kristallinem Silizium

**Dissertation**

zur

Erlangung des Doktorgrades

der Naturwissenschaften

(Dr. rer. nat.)

dem

Fachbereich Physik

der Philipps-Universität Marburg

vorgelegt von

Armin M. Froitzheim

aus Mühldorf a. Inn

Marburg/Lahn 2003

Vom Fachbereich der Physik der Philipps-Universität Marburg als Dissertation

angenommen am: 02.07.2003

Erstgutachter: Prof. Dr. W. Fuhs

Zweitgutachter: Prof. Dr. G. Weiser

Tag der mündlichen Prüfung: 23.07.2003

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einführung</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Modellierung von Heterostrukturen</b>	<b>9</b>
2.1	Halbleitergleichungen . . . . .	11
2.2	Randwerte . . . . .	14
2.2.1	Metall/Halbleiter-Grenzfläche . . . . .	15
2.2.2	Die Heterokontakt-Grenzfläche . . . . .	17
2.3	Zusammenfassung . . . . .	20
<b>3</b>	<b>Numerisches Lösen der Halbleitergleichungen</b>	<b>23</b>
3.1	Diskretisierung und Normierung der Halbleitergleichungen . . . . .	24
3.2	Iterationsformalismus . . . . .	27
3.3	Zusammenfassung . . . . .	31
<b>4</b>	<b>Simulation von a-Si:H/c-Si Heterostrukturen</b>	<b>33</b>
4.1	Simulation der a-Si:H(n)/c-Si(p)-Struktur . . . . .	34
4.1.1	Simulationsparameter für kristallines und amorphes Silizium . . . . .	34
4.1.2	Einfluss des Emitters auf die Solarzellencharakteristik . . . . .	37
4.1.3	Frontkontakt . . . . .	46
4.1.4	Grenzflächendefekte . . . . .	49
4.1.5	Zusammenfassung für die Simulation der a-Si:H(n)/c-Si(p)-Solarzelle . . . . .	54
4.2	a-Si:H(n)/c-Si(p) oder a-Si:H(p)/c-Si(n) Struktur ? . . . . .	55

4.3	Ist a-Si:H der beste Emittter? . . . . .	63
4.4	Schlussfolgerungen . . . . .	69
<b>5</b>	<b>Methoden</b>	<b>71</b>
5.1	Messverfahren . . . . .	71
5.1.1	Oberflächenphotospannung (SPV) . . . . .	72
5.1.2	Photomodulierte Kontaktstrommessung, PMCC . . . . .	77
5.1.3	I-U-Messung . . . . .	79
5.1.4	Quantenausbeute . . . . .	79
5.1.5	Photolumineszenz . . . . .	80
5.1.6	Lebensdauer . . . . .	81
5.2	Präparation der a-Si:H(n)/c-Si(p) Heterokontakt Solarzelle . . . . .	83
5.2.1	Kristalliner Silizium Wafer . . . . .	83
5.2.2	Abscheidung von amorphen Silizium . . . . .	86
5.2.3	Kontaktierung . . . . .	86
<b>6</b>	<b>Analyse der a-Si:H(n)/c-Si(p) Solarzellen</b>	<b>89</b>
6.1	Einfluss der Grenzfläche auf die Eigenschaften des Heterokontaktes . . . . .	90
6.2	Modifikation des amorphen Silizium-Emitters . . . . .	97
6.3	TCO-Kontakt . . . . .	104
6.4	Oberflächentexturierung . . . . .	108
6.5	Analyse der 16.2% Zelle . . . . .	108
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>113</b>
<b>A</b>	<b>Charakterisierung des amorphen Siliziums</b>	<b>117</b>
<b>B</b>	<b>Symbole</b>	<b>122</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>125</b>
	<b>Liste der Veröffentlichungen</b>	<b>135</b>

Danksagung 137

Lebenslauf 139



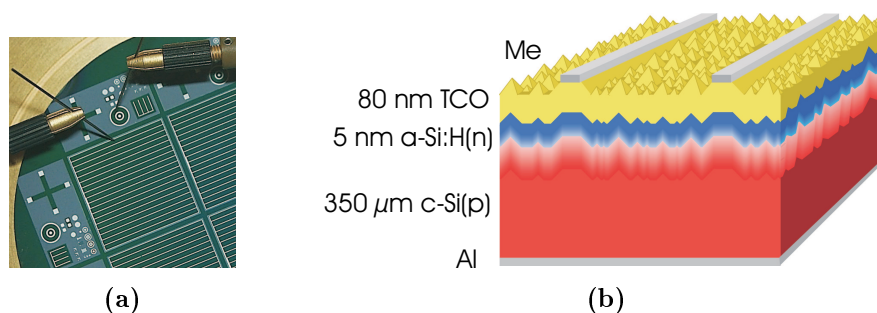
# Kapitel 1

## Einführung

Hohes Lied der Heterostruktur: Der Nobelpreis für Physik ging im Jahr 2000 an Herbert Kroemer und Zhores Alferov für ihre Pionierarbeit auf dem Gebiet der Heterostrukturen. In der Informationstechnologie bilden sie die Grundlage für viele Bauelemente wie Hochgeschwindigkeitstransistoren und Heterobipolartransistoren. Auch elektro-optische Bauelemente wie Halbleiter Laser sind ohne die Verwendung von Heterostrukturen nicht vorstellbar. In der Photovoltaik beherrscht dagegen immer noch die Siliziumsolarzelle mit einem diffundierten p/n-Übergang den Markt. Aber neben Heterosolarzellen aus Kupfer-Indium-Diselenid und Cadmiumtellurid, die derzeit noch Nischenmärkte abdecken, spielen auch in der Siliziumtechnologie Heterosolarzellen eine zunehmende Rolle. Durch Verwendung verschiedener Materialien als Emitter und Basis können deren Eigenschaften getrennt optimiert werden. Allerdings spielt bei einer Heterostruktur die Grenzfläche eine entscheidende Rolle. Pauli wird das Zitat zugeordnet, dass das Volumen etwas Göttliches und die Oberfläche (Grenzfläche) vom Teufel erschaffen sei. Diese kann eine völlig andere Defektstruktur als das Volumen aufweisen, und der Transport über sie kann über andere Mechanismen als im Volumen stattfinden. In dieser Arbeit wird die Grenzfläche des amorph/kristallinen Silizium Übergangs untersucht, und es wird sich herausstellen, dass diese gar nicht so teuflisch wie befürchtet ist. Bei günstiger Prozessführung lässt sich die Grenzfläche dieses Heteroüberganges so gut passivieren, dass sie zur

Beschreibung der Solarzellencharakteristik vernachlässigt werden kann.

Neben dem reinen Interesse an dieser Grenzfläche wird in der Photovoltaik intensiv nach Verfahren gesucht, die zu einer Prozessvereinfachung und dadurch zur Senkung der Produktionskosten führen. Interessant für die Photovoltaikindustrie ist auch eine Herstellung bei niedrigen Temperaturen. Dies würde ebenfalls zu einer Reduktion der Produktionskosten führen, da weniger thermische Energie umgesetzt werden muss und es könnten preiswertere, temperaturempfindliche Materialien, wie etwa bandgezogenes-Si (EFG-Si), als Absorber verwendet werden. Darüberhinaus ist eine amorph/kristalline Heterosolarzelle ebenso umweltverträglich wie eine diffundierte Si-Zelle und enthält keine begrenzten Ressourcen wie etwa das Indium in Kupfer-Indium-Diselenid-Zellen oder giftige Elemente wie das Cadmium in Cadmium-Tellurid Solarzellen. Solarzellen auf der Basis von amorph/kristallinen Silizium haben inzwischen einen Wirkungsgrad erreicht, der die Einführung in industriellem Maßstab erlaubt. Sanyo hat 1994 eine komplexe Solarzellenstruktur aus p-dotiertem amorphen Silizium auf n-dotiertem kristallinen Silizium vorgestellt, die einen Wirkungsgrad von 20% auf 1 cm<sup>2</sup> erreichte [1]. 2000 wurde von der gleichen Firma im Labor eine Solarzelle mit einem Wirkungsgrad von 20.7% auf einer Fläche von 100 cm<sup>2</sup> gefertigt [2, 3] und deren Module sind inzwischen auf dem Markt erhältlich (ca. 4 Euro/Wp). In Europa wurden meist Heterosolarzellen auf p-dotiertem Silizium hergestellt. Die dabei erreichten Wirkungsgrade lagen deutlich unter denen von Sanyo. Der in dieser Arbeit vorgestellte Wirkungsgrad von 16.2 % auf c-Si mit diffundiertem Rückseitenkontakt (Back-Surface-Field) stellt den bisher höchsten Wert für diesen Typ dar. Diese Heterosolarzelle bildet darüber hinaus ein Bindeglied zwischen konventioneller Dickschichttechnologie und zukünftiger Dünnschichttechnologie auf der Basis von Silizium: Eine durch Laserkristallisierung [4, 5], durch Aluminium induzierte Kristallisation [6, 7] oder durch Sputterdeposition [8, 9] realisierte polykristalline Saatschicht auf Glas dient als Substrat und evtl. Rückkontakt für einen darauf epitaktisch gewachsenen Absorber. Durch eine bei niedrigen Temperaturen (ca. 200°C) abgeschiedene dünne a-Si:H-Schicht lässt sich der Emitter prozessieren. Die Abscheidung ist kompatibel zu den vorherge-



**Abbildung 1.1:** (a) Foto einer  $2 \times 2$   $a\text{-Si:H}(n)/c\text{-Si}(p)$  Zelle. (b) Schematische Darstellung einer texturierten  $a\text{-Si:H}/c\text{-Si}$  Solarzellenstruktur. Der Frontkontakt wird durch ein Metall (Me) und ein leitendes Oxid (TCO) realisiert. Der Heteroübergang besteht aus einer  $a\text{-Si:H}(n)$ -Schicht und einem kristallinen Wafer. Der Rückkontakt wird durch Aluminium realisiert.

henden Niedertemperaturprozessen. Darüber hinaus wird wegen der geringen Dicke (ca. 5 nm) kaum Licht absorbiert, so dass der Emitter fast wie ein Fenster für den Absorber wirken kann. Die  $a\text{-Si:H}/c\text{-Si}$ -Struktur ist also sowohl aus der Sicht der Grundlagenforschung, die sich für die Defektstruktur und Bandanpassung an der Heterogrenzfläche interessiert, als auch aus der Sicht für die photovoltaische Anwendung von großem Interesse.

In dieser Arbeit wird der  $a\text{-Si:H}(n)/c\text{-Si}(p)$  Heteroübergang untersucht, da p-dotiertes kristallines Silizium das Arbeitspferd der Siliziumphotovoltaik darstellt. Insbesondere ist kostengünstiges Silizium (z.B. multikristallines oder bandgezogenes Silizium) nur als p-dotiertes Material erhältlich. Durch numerische Simulation zusammen mit Materialentwicklung und technologischer Umsetzung wird versucht, eine Brücke zwischen Theorie und Praxis zu schlagen. Es wird ein grundlegendes Verständnis der Verlustmechanismen einer solchen Solarzelle erarbeitet. Die Arbeit versteht sich so als grundlegender Beitrag in einem Gebiet, das weitgehend durch Empirie bestimmt ist.

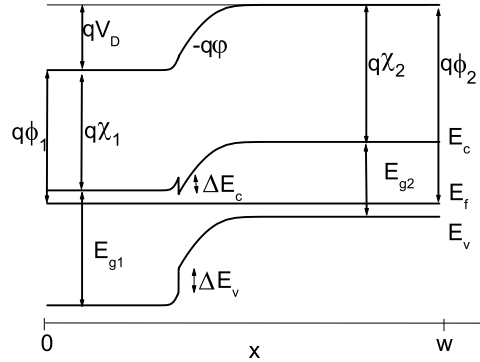
In dem ersten Teil der Arbeit wird ein Programm zur Simulation dieser Solarzelle vorgestellt, mit dem dann spezielle Solarzellenstrukturen nachgebildet und verglichen werden. Dabei werden Designkriterien für  $a\text{-Si:H}/c\text{-Si}$  Solarzellen abgelei-

tet. Im zweiten Teil wird die a-Si:H(n)/c-Si(p) Solarzelle präpariert und analysiert. Die fertige Solarzelle wurde mit den typischen Methoden der Solarzellencharakterisierung, wie Quantenausbeute und I-U-Messung, untersucht. Zusätzlich wurde versucht die Einflüsse der einzelnen Prozesse bei der Präparation der Zelle, wenn möglich direkt nach dem Prozessschritt, zu analysieren. Für diese Untersuchung wurden vor allem kontaktlose Messmethoden wie Oberflächenphotospannung und Photolumineszenz eingesetzt. Abb. 1.1(a) zeigt ein Foto einer am HMI präparierten a-Si:H(n)/c-Si(p) Solarzelle und in Abb. 1.1(b) ist eine Schematische Darstellung einer a-Si:H/c-Si Solarzelle mit Oberflächenstrukturierung abgebildet.

# Kapitel 2

## Modellierung von Heterostrukturen

Das elektro-optische Verhalten von Solarzellen kann mit Hilfe von numerischen [10, 11, 12], semianalytischen [13, 14] und analytischen Modellen [15] beschrieben werden. Dabei nimmt naturgemäß der Grad der Vereinfachung zur Beschreibung der Solarzelle vom numerischen zum analytischen Modell zu. Analytische bzw. semianalytische Ansätze bieten den Vorteil, dass sich die beobachteten Effekte durch physikalisch anschauliche Größen wie etwa der Diffusionslänge beschreiben lassen. Andererseits handelt es sich bei der zu untersuchenden a-Si:H/c-Si-Struktur um einen Heteroübergang mit einer komplexen Defektverteilung in der Bandlücke des a-Si:H und an der Grenzfläche. Bänderdiagramme für diese Heterostrukturen lassen sich dadurch nur numerisch bestimmen. Bei Heterostrukturen kann darüber hinaus die Grenzfläche den Stromtransport durch die Banddiskontinuitäten ( $\Delta E_c, \Delta E_v$ ) und die Grenzflächenzustände stark beeinflussen. Dies wird in analytischen Modellen nur unvollständig berücksichtigt. Mit Hilfe von Simulationsrechnungen gelingt es auch, zu messtechnisch nicht einfach erfassbaren Parametern wie z.B. Rekombinationsströmen an Grenzflächen zu gelangen, die hilfreich für das Verständnis und die Interpretation beobachteter Effekte sind. Des Weiteren bietet die Simulation, viel einfacher als im Experiment, die Möglichkeit, den Einfluss von bestimmten Parametern, wie etwa der Größe von  $\Delta E_c$ , auf die Solarzellencharakteristik zu untersuchen, um so zu einer Vorstellung über eine, zumindest theoretisch, optimale Solarzellen-



**Abbildung 2.1:** Bänderdiagramm einer einfachen Heterostruktur bestehend aus zwei Halbleitern, die beide ohmsch kontaktiert sind. Das Bandprofil ist durch das Valenz- ( $E_v$ ) und Leitungsband ( $E_c$ ) gegeben. Das Fermi-niveau  $E_f$  ist im thermodynamischen Gleichgewicht ortsunabhängig. Die Indizes beziehen sich auf den zugehörigen Halbleiter.  $\chi$  ist die Elektronenaffinität,  $\phi_{1,2}$  die Austrittsarbeit des Kontaktmaterials und  $E_g$  die Bandlücke des Halbleiters. Durch die unterschiedlichen Bandlücken der Halbleiter ergeben sich Valenz- ( $\Delta E_v$ ) und Leitungsbanddiskontinuitäten ( $\Delta E_c$ ). Über der Heterostruktur fällt die Diffusionsspannung  $V_D$  ab. Das Potential ist durch  $\varphi$  gegeben.

struktur zu kommen. In dieser Arbeit wird ein numerisches Modell zur Simulation von komplexen Heterosolarzellen vorgestellt.

Das Bänderdiagramm einer Heterostruktur ist in Abb. 2.1 dargestellt. Um die elektro-optischen Eigenschaften einer solchen Heterostruktur numerisch zu bestimmen, müssen die Halbleitergleichungen zusammen mit den entsprechenden Randbedingungen für die Halbleitergrenzflächen gelöst werden. Im Falle einer Heterosolarzelle existieren neben den Metallkontakten an der Vorder- und Rückseite der Zelle auch Grenzflächen zwischen den unterschiedlichen Materialien. In dem folgenden Kapitel wird die Modellierung des Volumens und der Grenzflächen eines Heterokontaktsystems beschrieben.

## 2.1 Halbleitergleichungen

Die Gleichungen für das Volumen eines Halbleiters ergeben sich aus den Maxwell-Gleichungen der Elektrodynamik linearer Medien [16, S.9 ff] und reduzieren sich im Falle eines eindimensionalen Systems zu drei nichtlinearen, gekoppelten, partiellen Differentialgleichungen, nämlich der Poissongleichung und den Kontinuitätsgleichungen für die Elektronen und Löcher:

$$-\frac{1}{q} \frac{\partial}{\partial x} \varepsilon_0 \varepsilon_r \frac{\partial \varphi(x, t)}{\partial x} = p(x, t) - n(x, t) + \rho_t(x, t) \pm N_{D/A}(x) \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial j_n(x, t)}{\partial x} = G_n(x, t) - R_n(x, t) - \frac{\partial n(x, t)}{\partial t} \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial j_p(x, t)}{\partial x} = G_p(x, t) - R_p(x, t) - \frac{\partial p(x, t)}{\partial t} \quad (2.3)$$

Dabei ist  $\varphi$  das elektrische Potential,  $n, p$  sind die freien Ladungsträgerkonzentrationen der Elektronen bzw. der Löcher.  $N_{D/A}$  sind die Konzentrationen der Donatoren bzw. Akzeptoren des Halbleiters, die als vollständig ionisiert angenommen werden. Schließlich wird durch  $\rho_t$  die Konzentration der donator- und akzeptorartigen Zustände beschrieben, deren Besetzung durch die Konzentration der freien Elektronen und Löcher bestimmt ist.  $\varepsilon_0, \varepsilon_r$  sind die absolute bzw. relative Dielektrizitätskonstante,  $j_n$  und  $j_p$  bezeichnen die Teilchenströme für die Elektronen bzw. Löcher.  $R_n, G_n$  sowie  $R_p, G_p$  sind die Rekombinations- und Generationsraten der entsprechenden Teilchenart. Dabei beschreibt G in dieser Arbeit ausschließlich die optische Generation durch Licht. Der Gesamtladungsstrom  $j_g^q$  setzt sich aus dem Löcher-, dem Elektronen-, sowie dem dielektrischen Verschiebungsstrom zusammen:

$$j_g^q(x, t) = qj_p(x, t) - qj_n(x, t) + \varepsilon_0 \varepsilon_r \frac{\partial E(x, t)}{\partial t} \quad (2.4)$$

Bisher sind neben der Annahme der Eindimensionalität des Systems noch keine weiteren Vereinfachungen gemacht worden. Zur Lösung der Halbleitergleichungen benötigt man Modelle, die das Gleichungssystem auf drei zu bestimmende Funktionen zurückführen. Welche drei Größen man wählt ist dabei belanglos. In dem Programm wird  $\rho_t, j_n, j_p, R_n$  und  $R_p$  durch die unabhängigen Parameter  $n, p$  und  $\varphi$  beschrieben. Wegen der Übersichtlichkeit werden aber im Folgenden das elektrische

Potential  $\varphi$ , das Quasifermipotential der Elektronen  $\varphi_{fn}$  und das der Löcher  $\varphi_{fp}$  als unabhängig Funktionen gewählt. Diese sind über

$$n := N_c \exp\left(-\frac{E_c - q\varphi_{fn}}{kT}\right) \quad (2.5)$$

$$p := N_v \exp\left(-\frac{q\varphi_{fp} - E_v}{kT}\right) \quad (2.6)$$

mit den Konzentrationen verknüpft. Dabei sind  $N_c$  und  $N_v$  die effektiven Zustandsdichten im Leitungs- bzw. Valenzband. Im thermodynamischen Gleichgewicht fallen die Quasifermienergien mit dem Ferminiveau der Gleichgewichtsverteilung zusammen und sind ortsunabhängig. Im Nichtgleichgewicht werden die Stromdichten durch die entsprechenden Gradienten der Quasifermipotentiale beschrieben:

$$j_n^q := q\mu_n n \frac{\partial \varphi_{fn}}{\partial x} \quad (2.7)$$

$$j_p^q := q\mu_p p \frac{\partial \varphi_{fp}}{\partial x} \quad (2.8)$$

$\mu$  ist die Beweglichkeit der jeweiligen Ladungsträger. Im einfachen Fall eines homogenen, nicht entarteten Halbleiters, ist dieser Ausdruck identisch mit der Definition der Ströme über der Summe aus Drift- und Diffusionsstrom:

$$j_n = -D_n \frac{dn}{dx} + \mu_n n \frac{d\varphi}{dx} \quad (2.9)$$

$$j_p = -D_p \frac{dp}{dx} - \mu_p p \frac{d\varphi}{dx} \quad (2.10)$$

Die Stromdichten sind damit durch die Funktionen  $n$ ,  $p$  und  $\varphi$  ausgedrückt, es fehlen noch Modelle für die Rekombinationsraten  $R$ .  $R$  wird hier durch Störstellenrekombination nach Shockley-Read-Hall beschrieben [17, 18]. Dabei wird ein Defekt durch die Defektkonzentration  $N_t$ , die energetische Lage  $E_t$ , den Ladungstyp und die Einfangquerschnitte für Elektronen  $\sigma_n$  und Löcher  $\sigma_p$  charakterisiert. Die Rekombinationsrate der Elektronen bzw. der Löcher ergibt sich danach zu:

$$R_n = c_n n (1 - f_t) N_t - e_n f_t N_t \quad (2.11)$$

$$R_p = c_p p f_t N_t - e_p (1 - f_t) N_t \quad (2.12)$$

Dabei sind die Einfangraten  $c_i$  durch  $\sigma_i v_i^{th}$  modelliert.  $v_i^{th}$  ist die thermische Geschwindigkeit der entsprechenden Ladungsträgersorte,  $e_n$  und  $e_p$  sind die Emissions-

raten für Elektronen bzw. Löcher.  $f_t$  ist die mittlere Besetzung des Zustandes und ist im **thermodynamischen Gleichgewicht** durch die Fermiverteilung

$$f_t^{eq} = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_t - E_f}{kT}\right)} \quad (2.13)$$

gegeben. Da für diesen Fall  $R_n = R_p = 0$  („detailliertes Gleichgewicht“) gelten muss, ergeben sich aus Gl. 2.11, 2.12 die Emissionsraten zu  $e_n = c_n N_c \exp\left(\frac{E_t - E_c}{kT}\right)$  bzw.  $e_p = c_p N_v \exp\left(\frac{E_v - E_t}{kT}\right)$ .

Im **stationären Gleichgewicht** gilt  $R_n - R_p = 0$ , da sich sonst die Zustände mit der Zeit umladen würden. Daraus ergibt sich die mittlere Besetzung eines Zustandes zu

$$f_t^{dc} = \frac{c_n n + e_p}{c_n n + e_n + c_p p + e_p}. \quad (2.14)$$

Der Index  $^{dc}$  steht für den stationären Zustand. Im Fall akzeptorischer Defektzustände ist deren Konzentration  $\rho_t = -f_t^{dc} N_t$  und im Fall von donatorischen Zuständen gilt  $\rho_t = (1 - f_t^{dc}) N_t$ . Mit der Beschreibung der Besetzungsfunktion für den stationären Fall durch  $n$  und  $p$  sind die Rekombinationsraten  $R_n$  und  $R_p$  und damit aber auch die Halbleitergleichungen auf die drei unabhängigen Funktionen  $\varphi$ ,  $n$  und  $p$  zurückgeführt. Sie können dann durch einen numerischen Algorithmus gelöst werden. Für den **Kleinsignalfall** müssen periodische Umbesetzungen der Defektniveaus berücksichtigt werden, wodurch sich der Ausdruck für die Besetzungsfunktion etwas ändert. Unter Kleinsignalfall ist hier zu verstehen, dass sich die Lösung für diesen durch eine lineare Approximation der Halbleitergleichungen beschreiben lässt. Bei einer kleinen periodischen Störung mit der Frequenz  $\omega$  können sich Zustände periodisch mit dem Kleinsignal umladen und es gilt ganz allgemein

$$R_n - R_p = -\frac{\partial \rho}{\partial t}. \quad (2.15)$$

Handelt es sich dabei um eine Kleinsignalstörung, so erhält man die Lösung durch eine Entwicklung um die stationäre Lösung:

$$\varphi = \varphi^{dc} + \tilde{\varphi} \exp(i\omega t) \quad (2.16)$$

$$n = n^{dc} + \tilde{n} \exp(i\omega t) \quad (2.17)$$

$$p = p^{dc} + \tilde{p} \exp(i\omega t) \quad (2.18)$$

Die Tilde  $\tilde{\phantom{x}}$  bezeichnet die komplexen Amplituden der Kleinsignalstörung. Die gleiche Approximation gilt für die Rekombinationsraten. Daraus ergeben sich diese zu

$$\tilde{R}_n = c_n \tilde{n} (1 - f_t^{dc}) N_t - c_n n^{dc} \tilde{f}_t N_t - e_n \tilde{f}_t N_t, \quad (2.19)$$

$$\tilde{R}_p = c_p \tilde{p} f_t^{dc} N_t + c_p p^{dc} \tilde{f}_t N_t + e_p \tilde{f}_t N_t. \quad (2.20)$$

Gleichung 2.15 wird im Kleinsignalfall zu  $\tilde{R}_n - \tilde{R}_p = i\omega \tilde{f}_t N_t$  und man erhält zusammen mit den Approximationen für die Rekombinationsraten die zugehörige Verteilungsfunktion

$$\tilde{f}_t = \frac{c_n (1 - f_t^{dc}) \tilde{n} - c_p f_t^{dc} \tilde{p}}{\omega_0 + i\omega}, \quad (2.21)$$

wobei  $\omega_0 = c_n n^{dc} + e_n + c_p p^{dc} + e_p$  ist. Damit sind auch für das Anlegen eines periodischen Kleinsignals alle auftretenden Funktionen durch die drei Größen  $\tilde{\varphi}, \tilde{n}, \tilde{p}$  sowie die Materialkonstanten ausgedrückt.

Sowohl für den stationären, als auch für den Kleinsignalfall benötigt man Bedingungen, um ein wohldefiniertes Randwertproblem zu erhalten. Es stellt sich zudem die Frage nach der Existenz und Eindeutigkeit der Lösung des Problems. Die Beantwortung hängt von den verwendeten Modellen, sowie den Randbedingungen ab und lässt sich nicht allgemein angeben. Für das stationäre System wurde die Existenz der Lösung unter der Annahme von Shockley-Read-Hall Rekombination und der Annahme, dass  $\mu$  der Ladungsträger verschieden von Null sind, sowie Dirichlet- bzw. Von-Neumann-Randwertbedingungen gelten, bewiesen [19]. Die Eindeutigkeit wurde für kleine Spannungen für analoge Einschränkungen gezeigt [20].

## 2.2 Randwerte

Die Halbleitergleichungen stellen ein System von drei gekoppelten partiellen, Differentialgleichungen dar, wodurch sechs Randbedingungen vorzugeben sind. Zusätzlich zu diesen Randwerten treten bei Heterokontakten Randbedingungen zwischen

den Halbleitern auf. Für die Beschreibung dieser Grenzfläche werden in dieser Arbeit zwei unterschiedliche Modelle verwendet, auf die in dem Unterkapitel 2.2.2 über Heterokontakt-Grenzflächen eingegangen wird. Zunächst sollen die Randbedingungen für die Grenzflächen zu den äußeren Kontakten angegeben werden.

### 2.2.1 Metall/Halbleiter-Grenzfläche

Das Potential wird bei  $x = 0$  auf Null gesetzt (Abb. 2.1),

$$\varphi(0) = 0. \quad (2.22)$$

Dies hat zur Folge, dass die Spannung  $V$  an dem Rückkontakt angelegt wird. Dort, bei  $x = w$ , liegt dann für spannungskontrollierte Randbedingungen das Potential auf

$$\varphi(w) = \Delta\phi_{Me} - V. \quad (2.23)$$

Dabei ist  $\Delta\phi_{Me} = \phi_2 - \phi_1$  die Differenz der Austrittsarbeiten der beiden Kontaktmetalle an der Front- und Rückseite (Abb. 2.1). In realen Bauelementen fallen typischerweise Spannungen an den Metall/Halbleiterkontakten und an den Heteroübergängen ab. Soll eine Simulation für stromkontrollierte Messungen durchgeführt werden, so ist die Randbedingung (2.23) am Rückkontakt durch eine Randbedingung für den Strom zu ersetzen:

$$J = qj_p(w) - qj_n(w) \quad (2.24)$$

Dabei ist  $J$  der aufgeprägte Strom. Die Randwerte für die einzelnen Stromkomponenten werden durch die Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeiten  $S$  beschrieben.

$$j_n(0) = -S_n^f(n(0) - n_{eq}(0)) \quad (2.25)$$

$$j_p(0) = -S_p^f(p(0) - p_{eq}(0)) \quad (2.26)$$

$$j_n(w) = S_n^b(n(w) - n_{eq}(w)) \quad (2.27)$$

$$j_p(w) = S_p^b(p(w) - p_{eq}(w)) \quad (2.28)$$

Die Gleichgewichtskonzentrationen an der entsprechenden Oberfläche sind durch den Index  $_{eq}$  gekennzeichnet. Für den Majoritätenstrom ist die Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit  $S$  gleich der thermischen Geschwindigkeit  $v_i^{th}$  der entsprechenden Ladungsträger, typischerweise  $10^7$  cm/s. Für den Minoritätenstrom kann  $S$  durch eine entsprechende Passivierung bis auf Werte von einigen cm/s reduziert sein. Die Gleichgewichtskonzentrationen  $n_{eq}$  und  $p_{eq}$  ergeben sich durch die Art des Kontaktes. Für einen ohmschen Kontakt wird eine Flachbandsituation an dem Metall/Halbleiterkontakt angenommen, so dass die Werte von  $n_{eq}$  und  $p_{eq}$  denen des ladungsneutralen Volumens entsprechen. Im Falle eines Schottky-Kontaktes ist die Gleichgewichtskonzentration der Majoritätsladungsträger an der Oberfläche durch die Barrierenhöhe  $\phi^b$  des Metall-Halbleiter-Kontaktes festgelegt:

$$n_{eq} = N_c \exp(-q\phi_n^b/kT) \quad (2.29)$$

für n-Halbleiter, mit  $\phi_n^b = \phi_{Me} - \chi$  bzw.

$$p_{eq} = N_v \exp(-q\phi_p^b/kT) \quad (2.30)$$

für p-Halbleiter, mit  $\phi_p^b = \chi + E_g/q - \phi_{Me}$

$\phi_{Me}$  ist die Austrittsarbeit des Metalls,  $\chi$  ist die Elektronenaffinität des Halbleiters und  $E_g$  dessen Bandlücke. Die Konzentration der Minoritätsladungsträger ergibt sich dann unter Annahme der Boltzmannstatistik aus dem Massenwirkungsgesetz

$$np = n_i^2, \quad (2.31)$$

mit  $n_i$  als intrinsischer Ladungsträgerkonzentration. Mit den Randbedingungen für das Potential Gl. 2.22, Gl. 2.23 bzw. Gl. 2.24 und den Randbedingungen für die Ströme Gl. 2.25, Gl. 2.26, Gl. 2.27, Gl. 2.28 sind die sechs Randbedingungen für spannungskontrollierte bzw. stromkontrollierte Simulationen des stationären Falls gegeben. Die Randbedingungen für den Kleinsignalfall ergeben sich aus denen des stationären Falles durch Taylorentwicklung.

### 2.2.2 Die Heterokontakt-Grenzfläche

Da in dieser Arbeit den Grenzflächen zwischen zwei Halbleitern besondere Aufmerksamkeit geschenkt werden muss, sollen zu deren Beschreibung zwei verschiedene Modelle herangezogen werden. So erhält man eine gewisse Vorstellung über die Abhängigkeit der Ergebnisse von den verwendeten Modellen. In dem ersten Modell gelten die Halbleitergleichungen und die Modelle für den Stromtransport über die komplette Heterostruktur, also auch für den Übergang von dem einen Halbleiter zum nächsten. Dieses Modell wird beispielsweise auch von dem Simulationsprogramm AMPS1D [12] benutzt. Es ist auch vorstellbar, dass sich die Ströme von dem einen Halbleiter zum anderen nicht durch Drift-Diffusionsströme beschreiben lassen, wie es für das Volumen eines Halbleiters gilt. Stattdessen kann der Strom über die Grenzfläche ähnlich dem Transport über einen Schottky-Kontakt durch thermionische Emission beschrieben werden. Diese Modell wird auch von dem Programm SCAPS [11] verwendet.

#### Heterokontaktgrenzfläche als dünne Übergangsschicht

Dieses Modell verwendet eine Zwischenschicht, in der die Materialparameter des einen Halbleiters auf die Parameter des zweiten Halbleiters überführt werden. Dadurch tritt in der Poissongleichung 2.1 eine Ableitung der Dielektrizitätskonstanten auf. In den Strömen treten zusätzliche Terme auf, da sich die Elektronenaffinität  $\chi$  und die Bandlücke  $E_g$ , die den Verlauf der Bandkanten  $E_c^0(\chi)$  und  $E_v^0(\chi, E_g)$  bestimmen, und eventuell die effektiven Zustandsdichten ändern. Dies führt zu den folgenden Ausdrücken für die Ströme:

$$j_n = -D_n \frac{\partial n}{\partial x} + \mu_n n \frac{\partial}{\partial x} \varphi_{n,eff} \quad (2.32)$$

mit  $\varphi_{n,eff} = \left( \varphi - \frac{E_c^0}{q} + \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{N_c}{N_0}\right) \right)$

$$j_p = -D_p \frac{\partial p}{\partial x} - \mu_p p \frac{\partial}{\partial x} \varphi_{p,eff} \quad (2.33)$$

mit  $\varphi_{p,eff} = \left( \varphi - \frac{E_v^0}{q} - \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{N_v}{N_0}\right) \right)$

Das Potential  $\varphi$  in den Gl. 2.9, 2.10 für die Ströme wird demnach durch effektive Potentiale  $\varphi_{n,eff}$  und  $\varphi_{p,eff}$  in den Gl. 2.32, 2.33 ersetzt, die neben dem elektrischen Potential von den intrinsischen Bandverläufen und den effektiven Zustandsdichten abhängen. Die in den obigen Gleichungen auftretende Größe  $N_0$  ist lediglich zur Normierung eingefügt worden, hat aber keine Auswirkung auf die Absolutwerte der Ströme, da sie bei der Bildung der Ableitung aus der Gleichung herausfällt. Die Defektzustände der Grenzfläche werden in der Zwischenschicht verteilt. Dieses Modell benötigt keine zusätzlichen Gleichungen, die die zwei Halbleiter verbinden.

### Thermisches Emissionsmodell

In diesem Modell gelten die Halbleitergleichungen, wie sie in Gl. 2.1-2.3 beschrieben sind jeweils bis zur Grenzfläche. Die Grenzflächen werden als Randbedingungen aufgefasst. Der Transport über die Grenzfläche wird ähnlich einem Schottky-Kontakt behandelt. Die Grenzfläche ist durch Grenzflächenzustände charakterisiert. Das Potential ist auf der linken Seite der Grenzfläche gleich dem der rechten Seite:

$$\varphi|_{x_{it-}} = \varphi|_{x_{it+}} \quad (2.34)$$

Dabei ist  $x_{it-}$  der Ort infinitesimal links der Grenzfläche und  $x_{it+}$  ist die x-Koordinate infinitesimal rechts der Grenzfläche. Diese Annahme schließt das Auftreten einer Dipolschicht aus, denn dann müsste an der Grenzfläche ein Potentialsprung auftreten und die Schicht eine endliche Dicke haben. Als zweite Randbedingung für das Potential wird der Gauß'sche Satz auf die Poissongl. 2.1 angewendet: Die Ladung in den Grenzflächenzuständen  $q_{it}$  ist gleich der Differenz der dielektrischen Verschiebungen.

$$\varepsilon_0(\varepsilon_r \frac{\partial \varphi}{\partial x})|_{x_{it+}} - \varepsilon_0(\varepsilon_r \frac{\partial \varphi}{\partial x})|_{x_{it-}} = q_{it} \quad (2.35)$$

Der Stromtransport über die Grenzfläche wird durch thermische Emission sowie durch Rekombination über Grenzflächenzustände beschrieben [21, 22]:

$$j_n|_{x_{it\mp}} = j_n^{th} \pm j_{x_{it\mp}}^{rec_n} \quad (2.36)$$

$$j_p|_{x_{it\mp}} = j_p^{th} \pm j_{x_{it\mp}}^{rec_p} \quad (2.37)$$

Die Ströme  $j_{x_{it\mp}}^{rec_n}$  und  $j_{x_{it\mp}}^{rec_p}$  beschreiben die Rekombinationsströme der Elektronen und Löcher über die Grenzflächenzustände der beiden Halbleiter.  $j_n^{th}$  ist der thermische Emissionsstrom über die Barriere im Leitungsband:

$$j_n^{th} = (v_n^{th}n)|_{x_{it-}} - (v_n^{th}n)|_{x_{it+}} \exp\left(-\frac{|\Delta E_c|}{kT}\right) \quad \text{falls } \Delta E_c < 0 \quad (2.38)$$

$$j_n^{th} = (v_n^{th}n)|_{x_{it-}} \exp\left(-\frac{|\Delta E_c|}{kT}\right) - (v_n^{th}n)|_{x_{it+}} \quad \text{falls } \Delta E_c > 0 \quad (2.39)$$

Die Vorzeichenkonvention für  $\Delta E_c$  ist über

$$\Delta E_c = q(\chi_{x_{it+}} - \chi_{x_{it-}}) \quad (2.40)$$

festgelegt, wobei  $\chi$  die Elektronenaffinität ist. Da in dieser Arbeit von einer Boltzmannstatistik für die Ladungsträger ausgegangen wird, lässt sich die thermische Geschwindigkeit durch [23, S.261]

$$v_n^{th} = (kT/2m\pi)^{1/2} \frac{A_n^* T^2}{qN_c}, \quad (2.41)$$

ausdrücken.  $m$  ist dabei die effektive Masse der Elektronen und  $A_n^*$  die effektive Richardsonkonstante für diese. Mit diesem Ansatz werden quantenmechanische Effekte, wie Tunnelströme und Reflexion von Ladungsträgern mit Energien größer als die Barrierenenergie, vernachlässigt. Ebenfalls unberücksichtigt ist die Absenkung der Barriere durch das Bildkraftpotential. Alle Vernachlässigungen, bis auf die der Reflexion, bewirken eine effektive Verringerung von  $\Delta E_c$ . Für den thermionischen Anteil des Transports von Löchern über die Heterokontaktgrenzfläche gelten analoge Gleichungen:

$$j_p^{th} = (v_p^{th}p)|_{x_{it-}} - (v_p^{th}p)|_{x_{it+}} \exp\left(-\frac{|\Delta E_v|}{kT}\right) \quad \text{falls } \Delta E_v < 0 \quad (2.42)$$

$$j_p^{th} = (v_p^{th}p)|_{x_{it-}} \exp\left(-\frac{|\Delta E_v|}{kT}\right) - (v_p^{th}p)|_{x_{it+}} \quad \text{falls } \Delta E_v > 0 \quad (2.43)$$

mit

$$\Delta E_v = (E_g + q\chi)|_{x_{it+}} - (E_g + q\chi)|_{x_{it-}} \quad \text{und} \quad (2.44)$$

$$v_p^{th} = \frac{A_p^* T^2}{qN_v}, \quad (2.45)$$

wobei hier  $A_p^*$  für die effektive Richardsonkonstante der Löcher steht. Da die Grenzflächenzustände mit beiden angrenzenden Halbleitern wechselwirken können, gilt für sie eine modifizierte Besetzungsfunktion  $f_{it}$ . Die Rekombinationsströme in Grenzflächenzustände der Dichte  $N_{it}$  sind durch

$$j_{x_{it\pm}}^{recn} = c_n^\pm n^\pm (1 - f_{it}) N_{it} - e_n^\pm f_{it} N_{it} \quad (2.46)$$

$$j_{x_{it\pm}}^{recp} = c_p^\pm p^\pm f_{it} N_{it} - e_p^\pm (1 - f_{it}) N_{it} \quad (2.47)$$

gegeben. Da im thermodynamischen Gleichgewicht das Prinzip des „detaillierten Gleichgewichts“ gilt und die Besetzungsfunktion durch die Fermifunktion zu beschreiben ist, gelten für die Emissionsraten die gleichen Beziehungen wie für Zustände im Volumen. Im Falle des stationären Gleichgewichts muss nun  $j_{x_{it+}}^{recn} + j_{x_{it-}}^{recn} - j_{x_{it+}}^{recp} - j_{x_{it-}}^{recp} = 0$  gelten, da der Grenzflächenzustand mit beiden Halbleitern wechselwirkt, und sich diese Zustände im stationären Gleichgewicht nicht umladen dürfen. Daraus ergibt sich die Besetzungsfunktion für einen Grenzflächenzustand im stationären Fall zu:

$$f_{it}^{dc} = \frac{\sum_{k=\pm} c_n^k n^k + e_p^k}{\sum_{k=\pm} c_n^k n^k + e_n^k + c_p^k p^k + e_p^k} \quad (2.48)$$

Analog zu der Verteilungsfunktion für den Kleinsignalfall im Volumen des Halbleiters lässt sich die Verteilungsfunktion für Grenzflächenzustände im Kleinsignalfall berechnen. Diese unterscheidet sich von der Verteilungsfunktion im Volumen nur dadurch, dass die Grenzflächenzustände mit beiden Halbleitern wechselwirken können:

$$\tilde{f}_{it} = \frac{\sum_{k=\pm} (c_n^k (1 - f_{it}^{dc}) \tilde{n}^k - c_p^k f_{it}^{dc} \tilde{p}^k)}{\sum_{k=\pm} \omega_0^k + i\omega} \quad (2.49)$$

## 2.3 Zusammenfassung

Mit der Beschreibung der Halbleitergleichungen, entsprechenden Modellen für den Transport und die Rekombination sowie der Beschreibung der Randwerte und Grenzflächen ist die Modellierung der Heterostruktur abgeschlossen und in ein mathema-

---

tisches Modell überführt worden. Dies wurde für das thermodynamische Gleichgewicht, das stationäre Gleichgewicht und eine periodische Kleinsignalstörung vorgestellt, um Messmethoden wie etwa Strom-Spannungs- und Kapazitäts-Spannungsmessungen simulieren zu können. Es handelt sich dabei um ein System von gekoppelten, nichtlinearen Differentialgleichungen, deren Lösung nur iterativ auf numerischem Weg gefunden wird. Dies ist der Inhalt des nächsten Kapitels.



# Kapitel 3

## Numerisches Lösen der Halbleitergleichungen

Um das aufgestellte Gleichungssystem numerisch zu lösen, müssen die Differentialgleichungen zunächst in eine diskretisierte Form gebracht werden. Hierzu wird die Methode der finiten Differenzen verwendet. Diese so erhaltenen Gleichungen sind algebraische Gleichungen, die mit einem Newton-Algorithmus iterativ bis zu einer gewünschten Genauigkeit gelöst werden. Die Lösung ist im besten Fall eine exakte Lösung der algebraischen Gleichungen, niemals eine der ursprünglichen Halbleitergleichungen. Die Übereinstimmung der numerischen Lösung mit einer exakten Lösung der Halbleitergleichungen hängt von der Wahl der unabhängigen Funktionen sowie der Diskretisierung ab [16]. Im folgenden wird die Diskretisierung und das iterative Lösen der Gleichungen für den stationären und den Kleinsignalfall beschrieben, wobei viele Ansätze von [16] übernommen wurden. Für das Lösen des Kleinsignalfalles wurde [24] genutzt.

### 3.1 Diskretisierung und Normierung der Halbleitergleichungen

Die Methode der finiten Differenzen überführt kontinuierliche Variablen auf diskrete Werte. Dabei wird die kontinuierliche Variable  $x$  durch eine endliche Zahl von Gitterpunkten  $x_l$  approximiert. Der Index  $l$  bezeichnet im Folgenden den Wert der entsprechenden Funktion am Gitterpunkt mit der Ortskoordinate  $x_l$ . Durch die Diskretisierung der Halbleitergleichungen wird die Lösung der resultierenden Gleichungen nur noch auf den Gitterpunkten bestimmt. Daher müssen diese möglichst so gewählt werden, dass der Abstand zwischen ihnen dort klein ist, wo sich die zu berechnenden Funktionen stark ändern. Dies ist typischerweise in der Umgebung der Halbleitergrenzflächen und der Metall/Halbleiter-Kontakte der Fall. Es ist sinnvoll, die Gitterpunkte hier enger zu setzen als im Volumen der Halbleiter. Die Unabhängigkeit der Lösung von der Diskretisierung lässt sich durch den Vergleich mit einer Rechnung, bei der die doppelte Anzahl von Gitterpunkten verwendet wird, prüfen. Ist die Lösung der neuen Diskretisierung gleich der ursprünglichen, so wird angenommen, dass die Lösung unabhängig von der Diskretisierung ist.

Bei der Diskretisierung der Funktionswerte wird die Funktion  $f(x_l)$  durch  $f_l$  beschrieben. Deren Ableitung wird durch eine finite Differenz ersetzt. Die Länge des Intervalls  $h_l$  sei durch  $x_{l+1} - x_l$  festgelegt, und der Index  $l+1/2$  bezeichnet den Wert der entsprechenden Funktion in der Mitte des Intervalls  $h_l$ , der durch Taylorentwicklung linearer Ordnung um den Gitterpunkt  $x_l$  approximiert wird.  $\Delta f_l$  sei durch  $f_{l+1} - f_l$  definiert. Die erste Ableitung einer Funktion  $f$  wird durch

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_l = 2 \frac{f_{l+1/2} - f_{l-1/2}}{h_{l-1} + h_l} \quad (3.1)$$

angenähert. Damit lassen sich dann auch alle Approximationen für höhere Ableitungen bestimmen, und man erhält die diskretisierte Form der Poissongleichung (2.1) zu:

$$\frac{4\varepsilon_0}{q} \frac{\varepsilon_{r,l+1/2} - \varepsilon_{r,l-1/2}}{h_{l-1} + h_l} \frac{\varphi_{l+1/2} - \varphi_{l-1/2}}{h_{l-1} + h_l}$$

$$+ \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_{r,l}}{q} \frac{\frac{\varphi_{l+1} - \varphi_l}{h_l} - \frac{\varphi_l - \varphi_{l-1}}{h_{l-1}}}{\frac{h_l + h_{l-1}}{2}} + p_l - n_l + \rho_{t,l} \pm N_{D/A,l} = 0. \quad (3.2)$$

Zur Diskretisierung der Kontinuitätsgleichung der Elektronen wird analog [16, S.155] vorgegangen. Zunächst werden die Definitionen für die Ströme in dem Intervall  $(x_l, x_{l+1})$

$$j_{n,l+1/2} = -D_n \frac{\partial n}{\partial x} + \mu_n n \frac{\partial \varphi_{n,eff}}{\partial x} \quad (3.3)$$

als Differentialgleichung erster Ordnung für die Ladungsträgerkonzentration  $n$  aufgefasst. Die Randwerte sind durch  $n(x_l) = n_l$  und  $n(x_{l+1}) = n_{l+1}$  festgelegt. Unter den Annahmen, dass die Ableitung des effektiven Potentials  $\varphi_{eff}$  zwischen zwei Gitterpunkten konstant ist, für die Beweglichkeiten  $\mu$  die Einsteinrelation  $D = \mu kT/q$  gilt und diese konstant auf dem Integrationsintervall  $(x_l, x_{l-1})$  sind, lässt sich die Differentialgleichung 3.3 für die Ladungsträgerkonzentration  $n(x)$  lösen. Daraus erhält man den Elektronenstrom in diskretisierter Form:

$$j_{n,l+1/2} = D_{n,l+1/2} \frac{B(-q \frac{\varphi_{eff,l+1} - \varphi_{eff,l}}{kT}) n_l - B(q \frac{\varphi_{eff,l+1} - \varphi_{eff,l}}{kT}) n_{l+1}}{h_l} \quad (3.4)$$

$B(z)$  ist dabei die Bernoullifunktion, die durch

$$B(z) = \frac{z}{e^z - 1} \quad (3.5)$$

definiert ist.  $B(z)$  wird durch Approximationen angenähert [16, S.169], die durch die Rechengenauigkeit des Computers bestimmt sind. Die analytische Lösung von Gl. 3.3 und anschließende Diskretisierung des Stromes (Gl. 3.4) führt im Vergleich zur direkten Diskretisierung von Gl. 3.3 zu einer besseren Approximation für die tatsächliche Ladungsträgerverteilung und zu einer besseren Konvergenz des Lösungsalgorithmus [25]. Mit diesem Ausdruck für den Elektronenstrom ergibt sich die Kontinuitätsgleichung für Elektronen (Gl. 2.2) in diskretisierter Form zu:

$$G_l - R_l + D_{n,l+1/2} \frac{B(q \frac{\Delta \varphi_{eff,l}}{kT}) n_{l+1} - B(-q \frac{\Delta \varphi_{eff,l}}{kT}) n_l}{h_l \frac{h_{l-1} + h_l}{2}} - D_{n,l-1/2} \frac{B(q \frac{\Delta \varphi_{eff,l-1}}{kT}) n_l - B(-q \frac{\Delta \varphi_{eff,l-1}}{kT}) n_{l-1}}{h_{l-1} \frac{h_{l-1} + h_l}{2}} = 0 \quad (3.6)$$

Der Löcherstrom berechnet sich ganz analog zu:

$$j_{p,l+1/2} = -D_{p,l+1/2} \frac{B(-q \frac{\varphi_{eff,l+1} - \varphi_{eff,l}}{kT}) p_{l+1} - B(q \frac{\varphi_{eff,l+1} - \varphi_{eff,l}}{kT}) p_l}{h_l}, \quad (3.7)$$

womit dann die Kontinuitätsgleichung der Löcher in der diskretisierten Form die folgende Gestalt hat:

$$G_l - R_l + D_{p,l+1/2} \frac{B(-q \frac{\Delta\varphi_{eff,l}}{kT}) p_{l+1} - B(q \frac{\Delta\varphi_{eff,l}}{kT}) p_l}{h_l \frac{h_{l-1} + h_l}{2}} - D_{p,l-1/2} \frac{B(-q \frac{\Delta\varphi_{eff,l-1}}{kT}) p_l - B(q \frac{\Delta\varphi_{eff,l-1}}{kT}) p_{l-1}}{h_{l-1} \frac{h_{l-1} + h_l}{2}} = 0 \quad (3.8)$$

Die Diskretisierung der Randwerte für das Potential ist trivial, lediglich bei der Diskretisierung der Gleichung 2.35 tritt die erste Ableitung des Potentials an einem Grenzflächenpunkt auf. Hier erfolgt die Diskretisierung an der Grenzfläche durch eine Taylorentwicklung:

$$\frac{d\varphi}{dx}|_{x_{it+}} = \frac{d\varphi}{dx}|_{l+1/2} - \frac{h_l}{2} \frac{d^2\varphi}{dx^2}|_l \quad (3.9)$$

Die zweite Ableitung des Potentials wird durch die Poissongleichung (2.1),  $p_l - n_l + \rho_l \pm N_{l,A/D}$ , ersetzt. Analog werden die Elektronenstromdichten an den Grenzflächenpunkten durch

$$j_n|_l = j_n|_{l+1/2} - \frac{h_l}{2} \frac{dj_n}{dx}|_l \quad (3.10)$$

approximiert, wobei  $\frac{dj_n}{dx}|_l$  durch die Kontinuitätsgleichung der Elektronen (Gl. 2.2) zu  $G_l - R_l$  festgelegt ist. Durch diese Approximationen ist der Fehler, der durch die Diskretisierung an den Grenzflächen gemacht wird, von der gleichen Ordnung wie der Fehler, der durch die Diskretisierung der Volumengleichungen hervorgerufen wird [16, S.172]. Damit liegen nun alle Gleichungen in diskretisierter Form vor. Bevor im nächsten Abschnitt der Lösungsalgorithmus beschrieben wird, soll noch auf die Normierung der Gleichungen eingegangen werden.

In dem Simulationsprogramm werden als unabhängige Variablen, das Potential  $\varphi$  sowie die Elektronen- und Löcherkonzentration  $n$  bzw.  $p$  gewählt. Da diese Variablen von völlig unterschiedlicher Größenordnung sind und sich in der Heterostruktur sehr

Größe	Skalierung	Skalierungswert
$x$	$x_0$	Gesamtlänge des Heterosystems $L$
$\varphi$	$\varphi_0$	$kT/q$
$n, p, N_{A/D}, \rho_t$	$c_0$	$\max(N_c, N_v)$
$q_{it}$		$c_0/x_0$
$\mu_n, \mu_p$	$\mu_0$	$\max(\mu_n, \mu_p)$
$D_n, D_p$		$\mu_0\varphi_0$
$R, G$		$\mu_0\varphi_0c_0/x_0^2$
$S_n, S_p$		$\varphi_0\mu_0/x_0$
$j_g, j_n, j_p$	$j_0$	$c_0\mu_0\varphi_0/x_0$
$t$	$t_0$	$x_0^2/(\mu_0\varphi_0)$
Poissongl. 2.1		$\max(e_r)e_0/(qc_0)$
Kontgl. 2.2 u. 2.3		$j_0/x_0$
Gaussgl. 2.35		$c_0/x_0$

**Tabelle 3.1:** Skalierung der Halbleitergleichung bzw. der darin vorkommenden Größen

unterschiedlich verhalten, ist es nötig, die Größen in einer günstigen Skalierung darzustellen. Die in dem Programm verwendete Skalierung ist in Tabelle 3.1 aufgeführt und entspricht der Skalierung von [16, S. 142].

## 3.2 Iterationsformalismus

Da alle Iterationsmethoden von einer Startnäherung ausgehen, soll hier die in dieser Arbeit verwendete Startnäherung für die Variablen  $\varphi_l, n_l, p_l$  vorgestellt werden. Die Startwerte für die Konzentrationen von  $n_l$  und  $p_l$  werden aus der Neutralitätsbedingung für die einzelnen Halbleiter bestimmt, die man durch das Newton'sche Iterationsverfahren aus den Gleichungen

$$\begin{aligned}
 p - n + \rho_t \pm N_{D/A} &= 0, \\
 np &= n_i^2
 \end{aligned}$$

erhält. Diese Neutralitätswerte werden dann als Startwert für jeden Gitterpunkt des zugehörigen Halbleiters angenommen. Für das Gebiet der Grenzflächen erhält man das Diffusionspotential aus der Lage des Fermi-niveaus und den Elektronenaffinitäten. Dieses wird unter der Annahme eines quadratischen Potentialverlaufes in

den beiden Halbleitern festgelegt. Außerhalb der Raumladungszonen ist das Potential konstant. Mit den so bestimmten Startwerten für  $n_l$ ,  $p_l$  und  $\varphi_l$  beginnt der im folgenden Abschnitt beschriebene Iterationsalgorithmus.

Zunächst soll der stationäre Fall vorgestellt werden. Die Lösung für den Kleinsignalfall ergibt sich dann aus einer einfachen Weiterentwicklung der stationären Lösung. Für jeden der  $N$  Gitterpunkte müssen die für diesen Gitterpunkt geltenden drei Gleichungen erfüllt sein. Dies führt auf  $3N$  Gleichungen für die  $3N$  unbekanntes  $\varphi_l, n_l, p_l$  mit  $l = 1..N$ . Mit  $\vec{f}_l$  als einem 3-dimensionalen Vektor für den Gitterpunkt  $l$ , in dem die diskretisierte und skalierte Form der Poissongleichung (erste Vektorkomponente), die beiden Kontinuitätsgleichungen (zweite und dritte Vektorkomponente) bzw. die entsprechenden Randbedingungen enthalten sind, lässt sich das Gleichungssystem durch die Vektorgleichungen

$$\vec{f}_l(\vec{\varphi}, \vec{n}, \vec{p}) = 0 \quad l = 1..N \quad (3.11)$$

zusammenfassen. Als Lösung sind die  $N$ -dimensionalen Vektoren  $\vec{\varphi}, \vec{n}, \vec{p}$  gesucht. Die Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems erfolgt mit dem Newtonschen Iterationsalgorithmus. Ausgehend von der  $k$ -ten Iteration  $\vec{\varphi}^k, \vec{n}^k, \vec{p}^k$  werden mit Hilfe einer linearen Taylorentwicklung die neuen Vektoren  $\vec{\varphi}^{k+1}, \vec{n}^{k+1}, \vec{p}^{k+1}$  über

$$\vec{\varphi}^{k+1} = \vec{\varphi}^k + \delta\vec{\varphi}^{k+1} \quad \text{etc.} \quad (3.12)$$

bestimmt. Mit der Definition

$$\vec{F}(\vec{\varphi}, \vec{n}, \vec{p}) := \begin{pmatrix} \vec{f}_1(\vec{\varphi}, \vec{n}, \vec{p}) \\ \vdots \\ \vec{f}_N(\vec{\varphi}, \vec{n}, \vec{p}) \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \vec{\delta}_i^k := \begin{pmatrix} \delta\varphi_i^k \\ \delta n_i^k \\ \delta p_i^k \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

lassen sich die Korrekturvektoren  $\vec{\delta}_i^{k+1}$  durch das Auflösen des linearen Gleichungssystems

$$\vec{F}(\vec{\varphi}^{k+1}, \vec{n}^{k+1}, \vec{p}^{k+1}) = \vec{F}(\vec{\varphi}^k, \vec{n}^k, \vec{p}^k) + \mathbf{M} \begin{pmatrix} \vec{\delta}_1^{k+1} \\ \vdots \\ \vec{\delta}_N^{k+1} \end{pmatrix} = 0 \quad (3.14)$$

nach  $\bar{\delta}_l^{k+1}$  berechnen.  $M$  ist die  $N \times N$  Jacobimatrix aus den  $3 \times 3$  Blockmatrizen  $M_{lm}$

$$M_{lm} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_l^\varphi}{\partial \varphi_m} & \frac{\partial f_l^\varphi}{\partial n_m} & \frac{\partial f_l^\varphi}{\partial p_m} \\ \frac{\partial f_l^n}{\partial \varphi_m} & \frac{\partial f_l^n}{\partial n_m} & \frac{\partial f_l^n}{\partial p_m} \\ \frac{\partial f_l^p}{\partial \varphi_m} & \frac{\partial f_l^p}{\partial n_m} & \frac{\partial f_l^p}{\partial p_m} \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

Die Matrix  $M$  hat durch die Diskretisierung der Halbleitergleichungen fast Tridiagonalgestalt in den Blockmatrizen  $M_{l-1}, M_l, M_{l+1}$ . Lediglich für Gitterpunkte, die zu einem Grenzflächenpunkt  $l$  gehören, treten durch die Diskretisierung von Gleichung (2.35) auch nichtverschwindende Blockmatrizen  $M_{l+2}$  auf, da hier das elektrische Feld rechts und links der Grenzfläche bestimmt wird. Das obige Gleichungssystem (3.14) lässt sich also wie folgt schreiben:

$$M_{l-1}^k \bar{\delta}_{l-1}^{k+1} + M_l^k \bar{\delta}_l^{k+1} + M_{l+1}^k \bar{\delta}_{l+1}^{k+1} + M_{l+2}^k \bar{\delta}_{l+2}^{k+1} = -\bar{f}_l^k \quad (3.16)$$

Da für einen Grenzflächenpunkt  $l$  die Matrize  $M_{l+2}$  nicht verschwindet, muss das gewöhnliche Gaußsche Lösungsverfahren für Tridiagonalmatrizen ein wenig modifiziert werden. Mit dem Lösungsansatz

$$\bar{\delta}_l^k = \mathcal{A}_l^k \bar{\delta}_{l+1}^k + \mathcal{B}_l^k \bar{\delta}_{l+2}^k + \vec{\Gamma}_l^k, \quad (3.17)$$

lassen sich durch Einsetzen in Gl. 3.16 zunächst die Hilfsmatrizen  $\mathcal{A}_l^k$  und  $\mathcal{B}_l^k$ , sowie die Hilfsvektoren  $\vec{\Gamma}_l^k$  rekursiv zu

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_l^k &= \begin{cases} -(M_{11})^{-1}(M_{12}) & \text{für } l = 1 \\ -(M_{l-1} \mathcal{A}_{l-1} + M_l)^{-1}(M_{l-1} \mathcal{B}_{l-1} + M_{l+1}) & \text{für } l = 2..N-1 \\ 0 & \text{für } l = N \end{cases} \\ \mathcal{B}_l^k &= \begin{cases} 0 & \text{für } l = 1, N, N-1 \\ -(M_{l-1} \mathcal{A}_{l-1}^k + M_l)^{-1} M_{l+2} & \text{für } l = 2..N-2 \end{cases} \\ \vec{\Gamma}_l^k &= \begin{cases} -(M_{11})^{-1} \vec{f}_1 & \text{für } l = 1 \\ -(M_{l-1} \mathcal{A}_{l-1} + M_l)^{-1} (\vec{f}_l + M_{l-1} \vec{\Gamma}_{l-1}) & \text{für } l = 2..N \end{cases} \end{aligned}$$

berechnen. Mit diesen bestimmt man über die Gleichung 3.17 die Korrekturvektoren

ren, woraus man schließlich mit Gl. 3.12 die neuen Werte für die Lösungsvektoren  $\vec{\varphi}^{k+1}, \vec{n}^{k+1}, \vec{p}^{k+1}$  erhält. Dieser Berechnungsalgorithmus wird solange wiederholt, bis die Gleichungen 3.11 mit zufriedenstellender Genauigkeit erfüllt sind. Das Abbruchkriterium ist hier ähnlich dem von Selberherr [16, S.208] gewählt:

$$\max(\{|f_l^\varphi(\vec{\varphi}^k, \vec{n}^k, \vec{p}^k)|, |f_l^n(\vec{\varphi}^k, \vec{n}^k, \vec{p}^k)|, |f_l^p(\vec{\varphi}^k, \vec{n}^k, \vec{p}^k)|\}, l = 1..N) < 10^{-14}$$

Die Lösung für den Kleinsignalfall erhält man ganz analog. Formal lassen sich die Halbleitergleichungen für eine Kleinsignalstörung mit Hilfe der stationären Halbleitergleichungen wie folgt schreiben:

$$f_l^\varphi(\vec{\varphi}, \vec{n}, \vec{p}) = 0 \quad (3.18)$$

$$f_l^n(\vec{\varphi}, \vec{n}, \vec{p}) + i\omega\tilde{n}_l = 0 \quad (3.19)$$

$$f_l^p(\vec{\varphi}, \vec{n}, \vec{p}) + i\omega\tilde{p}_l = 0 \quad (3.20)$$

$f_l^\varphi, f_l^n, f_l^p$  sind die Poissongleichung und die Kontinuitätsgleichungen bzw. die entsprechenden Randbedingungen. Durch die zeitabhängige Kleinsignalmodulation treten zusätzlich  $i\omega n$  und  $i\omega p$  in den Kontinuitätsgleichungen auf. Durch diese Modulation, muss das Gleichungssystem für komplexe Matrizen gelöst werden. Liegt die Lösung des stationären Problems vor, so ergibt sich die Lösung für den Kleinsignalfall durch Taylorentwicklung:

$$\vec{F}(\vec{\varphi}, \vec{n}, \vec{p}) = \vec{F}(\vec{\varphi}^{dc}, \vec{n}^{dc}, \vec{p}^{dc}) + \tilde{M} \begin{pmatrix} \vec{\delta}_1 \\ \vdots \\ \vec{\delta}_N \end{pmatrix} = 0 \quad (3.21)$$

Dieses Gleichungssystem hat formal das gleiche Aussehen wie Gl. 3.14, nur dass hier die Korrekturvektoren  $\vec{\delta}_m$  direkt die Lösungsvektoren des Kleinsignalfalls darstellen. Durch die Zeitabhängigkeit  $i\omega t$  werden die  $3 \times 3$  Blockmatrizen komplex, wodurch auch die Lösungsvektoren  $\vec{\delta}_m$  zu komplexen Größen werden:

$$\tilde{M}_{lm} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_l^\varphi}{\partial \varphi_m} & \frac{\partial f_l^\varphi}{\partial n_m} & \frac{\partial f_l^\varphi}{\partial p_m} \\ \frac{\partial f_l^n}{\partial \varphi_m} & \frac{\partial f_l^n}{\partial n_m} + i\omega\delta_{lm} & \frac{\partial f_l^n}{\partial p_m} \\ \frac{\partial f_l^p}{\partial \varphi_m} & \frac{\partial f_l^p}{\partial n_m} & \frac{\partial f_l^p}{\partial p_m} + i\omega\delta_{lm} \end{pmatrix} \quad \vec{\delta}_m = \begin{pmatrix} \tilde{\varphi}_m \\ \tilde{n}_m \\ \tilde{p}_m \end{pmatrix} \quad l, m = 1..N$$

$\delta_{lm}$  ist das Kroneckersymbol. Die Vektoren  $\vec{\varphi}^{dc}, \vec{n}^{dc}, \vec{p}^{dc}$  wurden durch die vorhergehende Iterationsprozedur für die stationäre Lösung bestimmt. Zwei Arten von Kleinsignalstörungen sind in dem Simulationsprogramm implementiert. Die erste behandelt das Anlegen einer sinusförmigen Wechselspannung  $V = V^{dc} + \tilde{V} \exp(i\omega t)$  am Rückkontakt. Bei der zweiten Kleinsignalstörung wird die Probe durch ein in der Intensität moduliertes Laserlicht, also durch eine modulierte Generation  $G_l = G_l^{dc} + \tilde{G}_l \exp(i\omega t)$ , angeregt. Für den stationären Fall wurde das Gleichungssystem bereits gelöst und für den Kleinsignal-Störvektor  $\vec{F}$  ergibt sich dadurch

$$\begin{aligned}\vec{F}(\vec{\varphi}^{dc}, \vec{n}^{dc}, \vec{p}^{dc}) &= (0, 0, \dots, \tilde{V}, 0, 0)^T \\ \vec{F}(\vec{\varphi}^{dc}, \vec{n}^{dc}, \vec{p}^{dc}) &= (0, \tilde{G}_{n1}, \tilde{G}_{p1} \dots, 0, \tilde{G}_{nN}, \tilde{G}_{pN})^T\end{aligned}$$

für Spannungs- bzw. Lichtmodulation. Der Index  $^T$  steht für die Transponierung des Vektors und enthält lediglich die Abweichungen des Kleinsignalfalles von der stationären Lösung. Die Lösung für den Kleinsignalfall erhält man mit den obigen Angaben nun in einem Schritt durch das Auflösen des Gleichungssystems 3.21. Die Inversion der Matrize  $\tilde{M}$  erfolgt wie für das stationäre System. Es muss lediglich mit komplexen Zahlen gerechnet werden. Damit sind die Kleinsignalstörungen  $\tilde{\varphi}_l, \tilde{n}_l, \tilde{p}_l$  bestimmt und die Wechselströme lassen sich daraus berechnen. Der Gesamtwechselstrom  $j_g^q(\omega)$  ist aufgrund der Struktur der Maxwellgleichungen ortsunabhängig und man erhält aus ihm für den Fall der Spannungsmodulation die Kapazität  $C$  und den Leitwert  $G$  zu:

$$C(\omega) = \frac{1}{\omega} \frac{\text{Im}(j_g^q(\omega))}{\tilde{V}} \quad (3.22)$$

$$G(\omega) = \frac{\text{Re}(j_g^q(\omega))}{\tilde{V}} \quad (3.23)$$

### 3.3 Zusammenfassung

Im vorangegangenen Kapitel wurde die in der Modellierung beschriebenen Differentialgleichungen mit Hilfe der Methode der finiten Differenzen diskretisiert. Die numerische Lösung des gekoppelten Systems algebraischer Gleichungen wurde durch

ein Newton-Iterationsverfahren erreicht, wobei die Poissongleichung und die beiden Kontinuitätsgleichungen jeweils im Unterschied zu dem Gummel-Algorithmus simultan gelöst werden. Dies berücksichtigt die Kopplung des Gleichungssystems besser, wodurch defektreiche Halbleiter adäquater beschrieben werden können. Für den Fall des thermionischen Transports über die Halbleitergrenzfläche musste das Gauß'sche Eliminationsverfahren zur Invertierung tridiagonaler Matrizen erweitert werden. In der Simulation unterschiedlicher a-Si:H/c-Si-Strukturen zeigte sich, dass die beiden Transportmodelle für die untersuchten Fälle zu qualitativ ähnlichen Ergebnissen führten. Mit Hilfe des Simulationsprogrammes lässt sich sowohl der stationäre Fall, als auch der Kleinsignalfall berechnen. Das Programm AFORS-HET (Automat For Simulation HETerostructures) bietet eine bedienerfreundliche Oberfläche, die es erlaubt eine Heterostruktur mit einer beliebigen Anzahl von Schichten und Defekten zu simulieren. Es können Strom-Spannungs-Kennlinien, Quantenausbeuten, electron beam induced current- (EBIC), Oberflächenphotospannungs-, Kapazitäts-Spannungsmessungen und Elektrolumineszenz-Messungen simuliert werden. In dieser Arbeit werden im wesentlichen Strom-Spannungs- und interne Quantenausbeute Messungen simuliert. Im nächsten Kapitel wird AFORS-HET für die a-Si/c-Si Heterostruktur angewandt.

# Kapitel 4

## Simulation von a-Si:H/c-Si

### Heterostrukturen

In dem folgenden Kapitel wird mit Hilfe des entwickelten Simulationsprogrammes der Einfluss des Frontkontaktes, der Eigenschaften des amorphen Siliziums und der Grenzflächenzustandsdichte auf die Solarzellencharakteristik untersucht. Dazu wird zunächst die Modellierung der a-Si:H(n)/c-Si(p) Struktur mit ihren Parametern für die einzelnen Schichten vorgestellt. Aus den Simulationsergebnissen leitet sich eine ideale Solarzellenstruktur für die a-Si:H(n)/c-Si(p) Zelle ab. Eine solche Struktur wird mit anderen Strukturen verglichen, die ebenfalls kristallines Silizium als Absorber haben, nämlich dem invertierten Solarzellentyp a-Si:H(p)/c-Si(n), sowie Heterostrukturen mit mikrokristallinem Silizium ( $\mu$ c-Si:H) und epitaktisch gewachsenem Silizium (epi-Si) als Emitter.

## 4.1 Simulation der a-Si:H(n)/c-Si(p)-Struktur

### 4.1.1 Simulationsparameter für kristallines und amorphes Silizium

Kaum ein Material ist so intensiv untersucht worden wie kristallines Silizium, weshalb dessen Materialparameter sehr gut bekannt sind. Sie sind für das verwendete Simulationsprogramm in Tabelle 4.1 aufgeführt. Da kristallines Silizium sehr rein hergestellt werden kann, wird auf eine komplizierte Defektverteilung verzichtet und eine homogene Verteilung von Defekten in der Bandlücke angenommen. Dabei sind die Zustände oberhalb der Bandmitte akzeptorartig und unterhalb der Bandmitte donatorartig. Zum Teil wurde auch nur mit einem Defekt in der Bandmitte gerechnet. Aufgrund ihrer geringen Konzentration haben diese keinen Einfluss auf die Ladungsbilanz und auf das Bandprofil, sondern lediglich auf die Diffusionslänge der Minoritäten im kristallinen Silizium. Die Werte für den Absorptionskoeffizienten  $\alpha(E)$  stammen aus [26].

Auch hydrogenisiertes amorphes Silizium (a-Si:H) wurde intensiv untersucht [29], [30]. Allerdings ist über sehr dünne Schichten ( $\approx 10$  nm) weniger bekannt. Die in der Tabelle (4.2) aufgeführten Parameter liegen einem Modell zugrunde, das im Folgenden beschrieben wird. Amorphes Silizium hat, im Gegensatz zu kristallinem Silizium, keine Fernordnung. Seine Gitterstruktur kann nicht mit reziproken Gittervektoren beschrieben werden und folglich existiert keine Auswahlregel für  $k$  bei der Lichtabsorption. Der Absorptionskoeffizient von a-Si:H ist daher für Energien nahe der Bandlücke  $E_g$  hoch. Die Werte für den Absorptionskoeffizienten von n-dotiertem a-Si:H sind [31] entnommen. In der Nahordnung ist a-Si:H dem kristallinen Silizium ähnlich, wobei die Bindungswinkel und -längen um die Werte des kristallinen Siliziums fluktuieren. Die Unordnung hat zur Folge, dass Zustände aus den Bändern abspalten und sich lokalisierte Zustände in der Bandlücke, nahe den Bandkanten bilden. Sie fallen exponentiell zur Bandmitte hin ab und werden durch

Material-Parameter (Einheit)	Abkürzung	Wert
relative Dielektrizitätskonstante	$\epsilon_r$	11.9 <sup>†</sup>
Elektronenaffinität (eV)	$q\chi$	4.05 <sup>†</sup>
Bandlücke (eV)	$E_g$	1.12 <sup>†</sup>
Effektive Leitungsbandzustandsdichte ( $cm^{-3}$ )	$N_c$	$2.86 \cdot 10^{19}$ ‡
Effektive Valenzbandzustandsdichte ( $cm^{-3}$ )	$N_v$	$3.1 \cdot 10^{19}$ ‡
Elektronenbeweglichkeit ( $cm^2/(Vs)$ )	$\mu_n$	1450 <sup>†</sup>
Löcherbeweglichkeit ( $cm^2/(Vs)$ )	$\mu_p$	480 <sup>†</sup>
Defektparameter für einen Defektzustand		
Defektkonzentration ( $cm^{-3}$ )	$N_t$	$10^{11}..10^{14}$
Energetische Lage (eV)	$E_t$	Bandmitte
Elektronen Einfangquerschnitt ( $cm^2$ )	$\sigma_n$	$10^{-14}$
Löcher Einfangquerschnitt ( $cm^2$ )	$\sigma_p$	$10^{-14}$
Defektparameter für eine kontinuierliche Defektzustandverteilung in der Bandlücke		
Defektkonzentration ( $cm^{-3}eV^{-1}$ )	$N_t$	$10^{11}..10^{14}$
Ladungstyp $E > 0.56$ eV		akzeptorartig
Ladungstyp $E < 0.56$ eV		donatorartig
Einfangquerschnitt des geladenen Zustands ( $cm^2$ )	$\sigma_{n/p}$	$10^{-14}$
Einfangquerschnitt des ungeladenen Zustands ( $cm^2$ )	$\sigma_{p/n}$	$10^{-14}$

**Tabelle 4.1:** Material- und Modellierungsparameter für kristallines Silizium zur Simulation bei Raumtemperatur <sup>†</sup>[23],<sup>‡</sup>[27].

Material-Parameter (Einheit)	Abkürzung	Wert
relative Dielektrizitätskonstante	$\epsilon_r$	11.9 <sup>†</sup>
Elektronenaffinität (eV)	$q\chi$	3.9
Bandlücke (eV)	$E_g$	1.7*
Effektive Leitungsbandzustandsdichte ( $cm^{-3}$ )	$N_c$	$1 \cdot 10^{20}$ †
Effektive Valenzbandzustandsdichte ( $cm^{-3}$ )	$N_v$	$1 \cdot 10^{20}$ †
Elektronenbeweglichkeit ( $cm^2/(Vs)$ )	$\mu_n$	5
Löcherbeweglichkeit ( $cm^2/(Vs)$ )	$\mu_p$	1
Tail-Zustände (LB) u. (VB)		
Zustandsdichte an LB Beweglichkeitskante ( $cm^{-3}eV^{-1}$ )	$N_{0c}$	$1 \cdot 10^{21}$ †
LB-Tail charakteristische Energie (meV)	$E_{0c}$	70 <sup>†</sup>
Zustandsdichte an VB-Beweglichkeitskante ( $cm^{-3}eV^{-1}$ )	$N_{0v}$	$2 \cdot 10^{21}$ †
VB-Tail charakteristische Energie (meV)	$E_{0v}$	160 <sup>†</sup>
Einfangquerschnitt des ungeladenen Zustand ( $cm^2$ )	$\sigma_{n/p}$	$10^{-16}$ †
Einfangquerschnitt des geladenen Zustands ( $cm^2$ )	$\sigma_{p/n}$	$10^{-14}$ †
Gauß-förmige Verteilung der Dangling-Bond-Zustände (DB)		
Zustandsdichte des donorartigen Zustandes ( $cm^{-3}$ )	$N_d$	$1.5 \cdot 10^{19}$
Energie des donorartigen Zustandes oberhalb VB (eV)	$E_d$	0.4 <sup>†</sup>
Zustandsdichte des akzeptorartigen Zustandes ( $cm^{-3}$ )	$N_a$	$1.5 \cdot 10^{19}$
Energie des akzeptorartigen Zustandes oberhalb VB (eV)	$E_a$	0.6 <sup>†</sup>
Breite der Verteilung (eV)	$\sigma$	0.15 <sup>†</sup>
Einfangquerschnitt des ungeladenen Zustands ( $cm^2$ )	$\sigma_{n/p}$	$10^{-16}$ †
Einfangquerschnitt des geladenen Zustands ( $cm^2$ )	$\sigma_{p/n}$	$10^{-14}$ †
Lage des Fermi-niveaus (eV)	$E_c - E_f$	0.25*

**Tabelle 4.2:** <sup>†</sup> Materialparameter für n-dotiertes amorphes Silizium zur Simulation bei Raumtemperatur in Anlehnung an [28]. \* Eigene Messung.

die Zustandsdichteverteilung

$$N_{vb}(E) = N_{0v} \cdot \exp\left(-\frac{E - E_v}{E_{0v}}\right), \quad (4.1)$$

$$N_{cb}(E) = N_{0c} \cdot \exp\left(\frac{E - E_c}{E_{0c}}\right), \quad (4.2)$$

beschrieben. Die zugehörigen Größen sind in Tab. 4.2 erklärt. Darüber hinaus treten Defekte durch offene Siliziumbindungen auf. Die nicht mit Wasserstoff abgesättigten offenen Bindungen bilden tiefe Defektzustände, die Dangling Bonds (DB). Sie können unbesetzt ( $D^+$ ), ein- bzw. zweifach besetzt sein ( $D^0$ ,  $D^-$ ). Die Energie zwischen dem einfach und zweifach besetzten Zustand unterscheidet sich um die Korrelationsenergie  $\Delta U$ , für die ein Wert von  $\Delta U = 0.2$  eV angenommen wird. Für die DB's gilt eine von der Shockley-Read-Hall Statistik abweichende Besetzungsstatistik [32]. Sie berücksichtigt die Möglichkeit der zweifachen Besetzung des Zustandes, sowie die Korrelationsenergie. In dieser Arbeit werden in Anlehnung an [33, 28], die Dangling Bonds durch zwei getrennte Zustände, deren Energie sich um  $\Delta U$  unterscheidet, mit Hilfe der Shockley-Read-Hall Statistik simuliert. Diese werden durch zwei Gauß-Verteilungen der Defektzustände beschrieben:

$$N_a(E) = N_a \cdot \exp\left(-\frac{(E - E_a)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (4.3)$$

$$N_d(E) = N_d \cdot \exp\left(-\frac{(E - E_d)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (4.4)$$

Die Symbole sind in Tab. 4.2 aufgeführt, wobei sich die Indizes  $a$  und  $d$  auf den akzeptor- bzw. donatorartigen Zustand beziehen. Dotiertes a-Si:H hat eine höhere Defektdichte als undotiertes a-Si:H, da durch die Dotierung zusätzliche Defekte in der Bandlücke erzeugt werden. Die Dotiereffizienz nimmt mit steigender Dotierung ab. Der minimale Abstand des Fermi-niveaus von der Leitungsbandkante der hier auf c-Si hergestellten dotierten a-Si:H Schichten liegt bei etwa  $E_c - E_f \simeq 0.25$  eV. Die Bandlücke von amorphem Silizium ist größer als die des kristallinen Materials (ca. 1.7 eV gegenüber 1.12 eV), so dass a-Si:H neben der Realisierung eines n/p-Übergangs als Fensterschicht für den kristallinen Absorber wirken soll.

Bilden a-Si:H und c-Si einen Heteroübergang, so ergeben sich infolge der unterschied-

lichen Bandlücken der beiden Halbleiter Diskontinuitäten im Valenz- und Leitungsband,  $\Delta E_v$  und  $\Delta E_c$ . Diese werden in der Literatur mit unterschiedlichen Ansätzen bestimmt. Im einfachen Modell von Anderson [34] ist  $\Delta E_c$  durch die Differenz der Elektronenaffinitäten bestimmt. Andere Modelle berechnen die Lage der Valenzbänder der Halbleiter aus den Eigenfunktionen der zugehörigen Atome des Festkörpers mit Hilfe der linearen Superposition [35] oder mit Hilfe von Pseudopotentialen [36]. Die Differenz der Valenzbandkantenenergien ergibt dann  $\Delta E_v$ . In [37] wird aus der Bandstruktur des Valenz- und Leitungsbandes das Neutralniveau für die Halbleiter berechnet. Diese bilden dann das gemeinsame Bezugsniveau, woraus sich die Diskontinuitäten bestimmen. In [38, 39] wird die Bestimmung des Neutralniveaus  $E_N$  vereinfacht aus den effektiven Zustandsdichten im Valenz- und Leitungsband

$$E_N = \frac{N_c E_v + N_v E_c}{N_c + N_v} \quad (4.5)$$

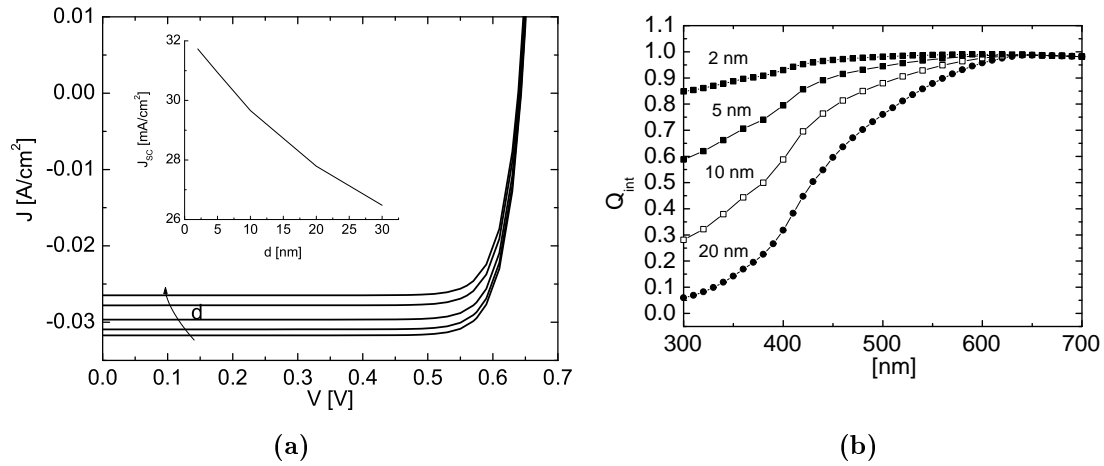
berechnet.  $E_v$  und  $E_c$  sind dabei die energetischen Lagen der Valenz und Leitungsbandkanten. Die Neutralniveaus von kristallinem Silizium und a-Si:H ergeben sich mit den Werten aus Tab. 4.1 und Tab. 4.2 zu 0.58 eV und 0.85 eV. Daraus erhält man  $\Delta E_c$  zu 0.3 eV. Einen Überblick über experimentell bestimmte Banddiskontinuitäten dieses Systems gibt Tab. 4.3. Hier zeigt sich, dass  $\Delta E_v$  größer als  $\Delta E_c$  ist. Die experimentellen Ergebnisse beziehen sich allerdings alle auf a-Si:H/c-Si-Strukturen mit undotiertem a-Si:H und demnach nicht auf die Heteroübergänge in einer a-Si:H(n)/c-Si(p)-Struktur. In dieser Arbeit wird  $\Delta E_c$  für die Simulation mit 150 meV angenommen. In einem eigenen Abschnitt wird speziell der Einfluss der Diskontinuität auf die Solarzellencharakteristik untersucht.

#### 4.1.2 Einfluss des Emitters auf die Solarzellencharakteristik

Der Einfluss der Emitter-Schichtdicke auf die I-U-Charakteristik einer mit AM1.5 beleuchteten Solarzelle ist in Abb. 4.1(a) gezeigt. Mit zunehmender Schichtdicke nimmt der Kurzschlussstrom  $J_{sc}$  ab. Dies ist auf eine erhöhte Absorption im a-Si:H zurückzuführen. Die dort erzeugten Ladungsträger rekombinieren und tragen

Lit.	Methode	$\Delta E_c$ [meV]	$\Delta E_v$ [meV]	Struktur
[40]	CV	$\simeq 200$		a-Si:H(i)/c-Si(p)
[41]	IPE	90	710	a-Si:H(i)/c-Si(p),(n)
[42]	OP,SP	$50 \pm 50$	$580 \pm 20$	a-Si:H(i)/c-Si(n)
[43]	$Q_{int}$	150–175	465 – 490	a-Si:H(i)/c-Si(n)
[44]	Y	10–90		a-Si:H(i)/c-Si(n)
[45]	NY		$440 \pm 20$	a-Si:H(i)/c-Si(p)
[46]	CT	10	670	a-Si:H(i)/c-Si(p),(n)

**Tabelle 4.3:** Zusammenfassung von experimentell bestimmten Leitungs- und Valenzbanddiskontinuitäten  $\Delta E_c$ ,  $\Delta E_v$ . Abkürzungen der Methoden: CV Kapazität-Spannung, IPE Innere Photoemission, OP Optische Pulse, SP Spannung Pulse,  $Q_{int}$  interne Quantenausbeute, Y Admittanz, NY Niedrigenergie-photoausbeute, CT Kapazität-Temperatur. Tabelle aus [14]



**Abbildung 4.1:** (a) Simulierte I-U Charakteristiken für die a-Si:H Emitterdicken von 2, 5, 10, 20, 30 nm. (b) Simulierte interne Quantenausbeute für a-Si:H/c-Si-Solarzellen mit a-Si:H-Emitter Schichtdicken von  $d = 2, 5, 10, 20$  nm im Wellenlängenbereich 300-700 nm. Für größere Anregungswellenlängen ist  $Q_{int}$  nur durch die Eigenschaften des c-Si und die des Rückkontaktes bestimmt und unabhängig von der Emitterdicke und erreicht bei  $\lambda \simeq 1200$  nm wieder den Wert 0.

nicht zu  $J_{sc}$  bei. Es sei darauf hingewiesen, dass sich die Leerlaufspannung  $V_{oc}$  mit abnehmender Schichtdicke geringfügig erhöht. Dies ist durch die Zunahme des Kurzschlussstromes für dünnere a-Si:H Emitter Schichten mit Hilfe einer Diodengleichung

$$j = j_0(\exp(V/kT) - 1) \quad (4.6)$$

zu erklären. Falls der Sperrsättigungsstrom  $j_0$  unabhängig von der Schichtdicke des amorphen Siliziums ist, gilt für die Differenz der Leerlaufspannungen:

$$\Delta V_{oc} = kT \ln(J_{sc1}/J_{sc2}) \quad (4.7)$$

$J_{sc1}, J_{sc2}$  sind dabei die Kurzschlussströme für Solarzellen mit zwei unterschiedlichen amorphen Emitterdicken. Zur genaueren Charakterisierung des Einflusses des amorphen Emitters dient die Bestimmung der internen Quantenausbeute  $Q_{int}$  der Heterosolarzelle. Sie wird in Kap. 5.1.4 beschrieben und im experimentellen Teil zur Analyse der Zellen herangezogen. In Abb. 4.1(b) ist die berechnete interne Quantenausbeute für a-Si:H(n)/c-Si(p)-Solarzellen für eine Schichtdickenserie des a-Si:H-Emitters von 2-20 nm im Wellenlängenbereich von 300-700 nm dargestellt.  $Q_{int}$  erreicht unabhängig von der Emitterdicke bei  $\lambda \simeq 600$  nm den Wert 1 da bei diesen Dicken kaum Ladungsträger im rekombinationsaktiven a-Si:H erzeugt werden. Dafür werden sie im c-Si nahe der Raumladungszone absorbiert und tragen dann zum Strom bei, weil die Diffusionslänge im c-Si viel größer ist als die Absorptionstiefe. Für  $\lambda > 600$  nm hängt  $Q_{int}$  nur noch von den Eigenschaften des c-Si sowie des Rückkontaktes ab und sinkt bei  $\lambda \simeq 1200$  nm wieder auf einen Wert von 0, da ab diesem Wellenlängenbereich die Absorption im c-Si und a-Si:H zu vernachlässigen ist. Mit kleiner werdender Schichtdicke nimmt  $Q_{int}$  für  $\lambda$  zwischen 300 und 600 nm zu. Mit wachsender Emitterdicke steigt die Absorption im a-Si:H und die geringe Lebensdauer der Minoritäten im amorphen Silizium führt zu einer Abnahme von  $Q_{int}$  in diesem Wellenlängenbereich.

Für eine genauere Analyse der Rekombinationsverluste in der amorphen Schicht, lässt sich die Definition der Quantenausbeute für eine Heterokontaktsolarzelle, die

aus mehreren Schichten  $i$  besteht, mit Hilfe der Kontinuitätsgleichung für die Elektronen (Gl. 2.2) wie folgt umformen:

$$Q_{int} = \frac{j_n^q(0) + j_p^q(0)}{q \int G dx} \quad (4.8)$$

$$= \frac{j_n^q(0) - j_n^q(W) + j_n^q(W) + j_p^q(0)}{q \int G dx}$$

$$= \frac{q \int (G - R) dx + j_n^q(W) + j_p^q(0)}{q \int G dx}$$

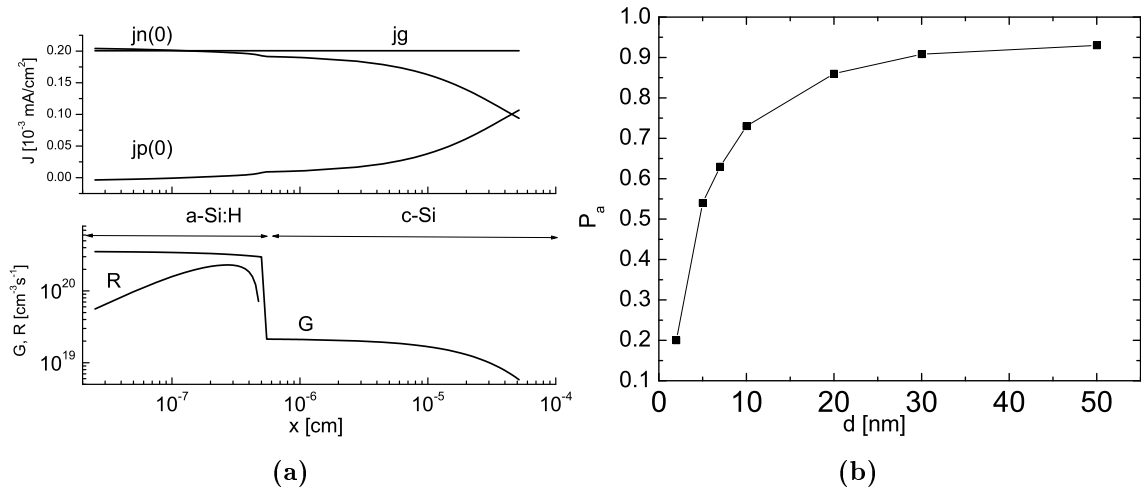
$$= \sum_i \frac{\int_i G dx}{\int G dx} \frac{\int_i (G - R) dx}{\int_i G dx} - \left| \frac{j_n^q(W)}{q \int G dx} \right| - \left| \frac{j_p^q(0)}{q \int G dx} \right|$$

$$= \sum_i W_i (1 - P_i) - V_b - V_f \quad (4.9)$$

$$\text{mit } W_i = \frac{\int_i G dx}{\int G dx} \text{ und } P_i = \frac{\int_i R dx}{\int_i G dx}$$

$$\text{mit } V_b = \frac{j_n^q(W)}{q \int G dx} \text{ und } V_f = \frac{j_p^q(0)}{q \int G dx}$$

Dabei bezieht sich der Index  $i$  auf die Schicht  $i$  und  $\int_i$  ist das Integral über die Dicke dieser Schicht.  $P_i$  ist die Wahrscheinlichkeit für die Rekombination von Elektron-Loch-Paaren und  $W_i$  die Wahrscheinlichkeit für Absorption in der Schicht  $i$ .  $Q_{int}$  lässt sich demnach als Wahrscheinlichkeit interpretieren, dass ein Elektron-Loch Paar in einer der Schichten  $i$  zum Strom beiträgt, vermindert um die Oberflächenrekombinationsverluste  $V_f$  und  $V_b$ , die durch die Terme mit  $j_p^q(0)$  und  $j_n^q(W)$  gegeben sind. Diese Terme lassen sich aus der Simulation bestimmen, siehe Abb. 4.2(a). In dieser Abbildung ist der Elektronen- ( $j_n^q$ ) und Löcherstrom ( $j_p^q$ ) sowie der Gesamtstrom ( $j_g$ ) in Abhängigkeit von  $x$  für eine Anregung mit einer Lichtwellenlänge von 450 nm unter Kurzschlussbedingungen dargestellt. Sie zeigt zusätzlich die Rekombinations- (R) und Generationsraten (G). Der Abb. ist zu entnehmen, dass R im a-Si:H viel höher als im c-Si ist und für diese Anregungswellenlänge im a-Si:H nahezu homogen angeregt wird. Durch Integration von R bzw. G über die Schichten ergeben sich dann die Wahrscheinlichkeiten für die Absorption  $W_i$  und die Rekombination  $P_i$  in der amorphen und kristallinen Schicht. Aus Abb. 4.2(a) oben lässt sich entnehmen, dass der Oberflächenrekombinationsstrom ( $j_p(0)$ ) zu vernachlässigen ist und damit auch  $V_f$ . Das Gleiche gilt für den Verluststrom an dem



**Abbildung 4.2:** (a) Beispiel für den Stromverlauf und die Rekombination in einer a-Si:H(n)/c-Si(p) Zelle mit einem 5nm dickem Emitter und einer Anregungswellenlänge von 450 nm.  $G$  ist die Generationsrate und  $R$  ist die Rekombinationsrate von Ladungsträgern.  $R$  im c-Si ist zu vernachlässigen und in diesem Darstellungsmaßstab nicht zu sehen.  $j_g$  ist der Gesamtstrom (b) Rekombinationswahrscheinlichkeit  $P_a$  in der a-Si:H Schicht als Funktion der Emitterdicke  $d$ .

Rückkontakt ( $j_n(w)$ ) (in Abb. 4.2(a) nicht dargestellt). Die Auswertung mit Gl. 4.9 für verschiedene Wellenlängen ergibt eine relative Unabhängigkeit der Rekombinationswahrscheinlichkeit  $P_a$  von der Wellenlänge und einen geringen Beitrag von Oberflächenverlusten. Der Oberflächenverlust ist bei kurzwelligem Licht (350 nm) größer als bei längerwelligem Licht. Die Wahrscheinlichkeit für die Rekombination im Absorber ist in dem genannten Wellenlängenbereich verschwindend klein, da die Ladungsträgerpaare in der Nähe der Raumladungszone erzeugt werden und die Diffusionslänge für Elektronen im kristallinen Silizium in dieser Simulation mit ca.  $200 \mu\text{m}$  groß gegenüber der Raumladungszone ist. Die Simulation zeigt, dass die Verluste an der Vorderseite ( $V_f$ ) kaum eine Rolle spielen. Allgemein gilt, dass der Hauptverlust für Licht mit  $\lambda < 600\text{nm}$  durch Rekombination in der amorphen a-Si:H Schicht gegeben ist. In Abb.4.2(b) ist die Wahrscheinlichkeit der Rekombination in der amorphen Schicht für die Anregungswellenlänge von 450 nm in Abhängigkeit von der Emitterdicke des amorphen Siliziums dargestellt. Sie nimmt mit abnehmender

Schichtdicke ab, da die Wahrscheinlichkeit bei dünnen Schichten größer wird, den ladungstrennenden Kontakt zu erreichen. Dies liegt daran, dass die Diffusionslänge im a-Si:H im nm Bereich und damit in der Größenordnung der Schichtdicke liegt.

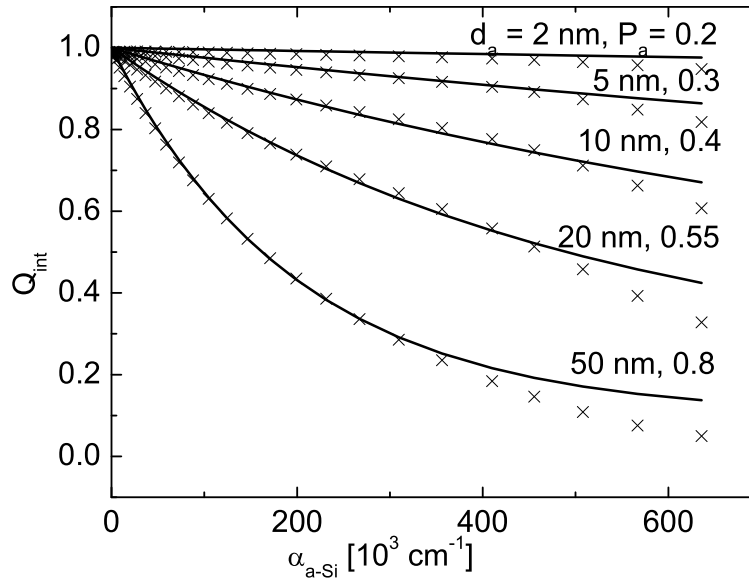
Um aus der experimentell bestimmten internen Quantenausbeute die Rekombination im a-Si:H berechnen zu können, muss man Gl. 4.9 vereinfachen. Mit den Annahmen, dass:

- die Oberflächenrekombinationsterme ( $j_p(0) = 0 \text{ mA/cm}^2$ ) vernachlässigbar sind,
- die Rekombinationswahrscheinlichkeit für den Wellenlängenbereich zwischen 300 nm und 600 nm im c-Si zu vernachlässigen ist ( $P_c = 0$ ),
- die Rekombinationswahrscheinlichkeit im a-Si:H  $P_a$  in dem Wellenlängenbereich zwischen 300 und 600 nm unabhängig von der Wellenlänge ist,

gelangt man zu folgendem Ausdruck [47]:

$$\begin{aligned}
 Q_{int} &\simeq \frac{\int_{a-Si} G dx}{\int G dx} \frac{\int_{a-Si} (G - R) dx}{\int_{a-Si} G dx} + \frac{\int_{c-Si} G dx}{\int G dx} \frac{\int_{c-Si} G - R dx}{\int_{c-Si} G dx} \\
 &= 1 - P_a + P_a \exp(-\alpha_{a-Si} d)
 \end{aligned} \tag{4.10}$$

Dabei ist  $d$  die Dicke des amorphen Siliziums und  $\alpha_{a-Si}$  der Absorptionskoeffizient von amorphem Silizium. Abb. 4.3 zeigt die Abhängigkeit der internen Quantenausbeute von dem Absorptionskoeffizienten des a-Si:H für verschiedene Schichtdicken des a-Si:H-Emitters. Dabei ist die simulierte interne Quantenausbeute ( $\times$ ) und eine Anpassung (durchgezogene Linie) aus Gl. 4.10 für verschiedene Schichtdicken dargestellt.  $P_a$  ist der einzige freie Parameter dieser Gleichung. Aus der Abbildung ist zu entnehmen, dass für  $\alpha > 4 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$  die angepassten Kurven (Gl. 4.10) von den simulierten Kurven abweichen, und zwar besonders ausgeprägt bei größeren Schichtdicken. Die Anregung wird mit zunehmendem  $d$  und zunehmendem  $\alpha$

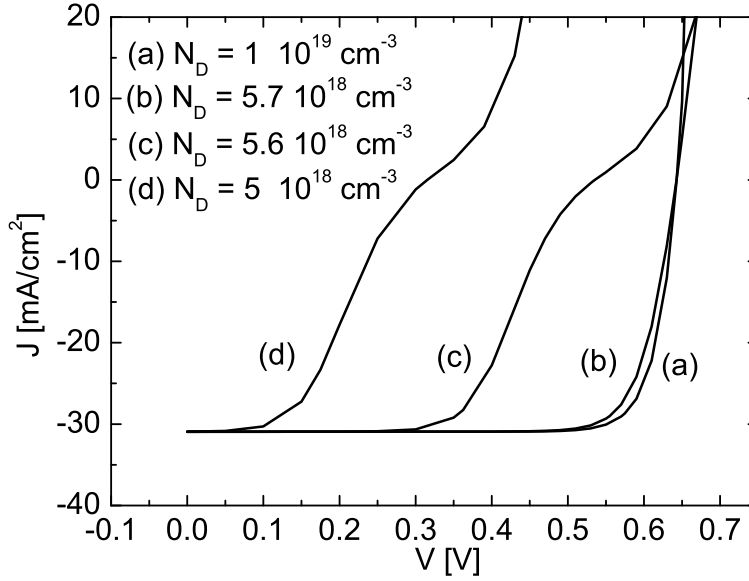


**Abbildung 4.3:** Simulierte interne Quantenausbeute ( $\times$ ) in Abhängigkeit des Absorptionskoeffizienten von a-Si:H für die Schichtdicken 2, 5, 10, 20, 50 nm. Die durchgezogenen Linien sind Anpassungen mit Gl. 4.10 bei dem  $P_a$  die Wahrscheinlichkeit für Rekombination in a-Si:H angibt.

räumlich inhomogen ( $\exp(-\alpha d) \neq 1$ ), was zur Folge hat, dass die Näherung (Gl. 4.10) einer wellenlängenunabhängigen Rekombinationswahrscheinlichkeit  $P_a$  nicht mehr gültig ist. Für  $\alpha < 4 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$  lassen sich die Kurven befriedigend durch die Funktion 4.10 beschreiben.

Für einen idealen Heterokontakt, mit einem ohmschen Frontkontakt, einer hohen Dotierung und ohne Grenzflächenzustände wie er für die bisherigen Simulationen verwendet wurde, lässt sich demnach schließen, dass der Emitter so dünn wie technologisch möglich zu wählen ist.

Bei den bisherigen Simulationen wurde  $E_c - E_f$  des amorphen Siliziums mit 0.2-0.25 eV angenommen. Da insbesondere für dünne a-Si:H Schichten  $E_c - E_f$  nur unsicher zu bestimmen ist, wurde der Einfluss von  $E_c - E_f$  der a-Si:H Schicht auf die Solarzellencharakteristik untersucht. Dazu wurde die Dotierung im a-Si:H variiert. In Abb. 4.1.2 ist die Solarzellencharakteristik für Emmitter mit unterschiedlicher a-Si:H Dotierungen dargestellt. Neben der Abnahme von  $V_{oc}$  mit sinkender Dotierkonzentration ist ein Doppeldiodenverhalten der Solarzellencharakteristik festzustellen.

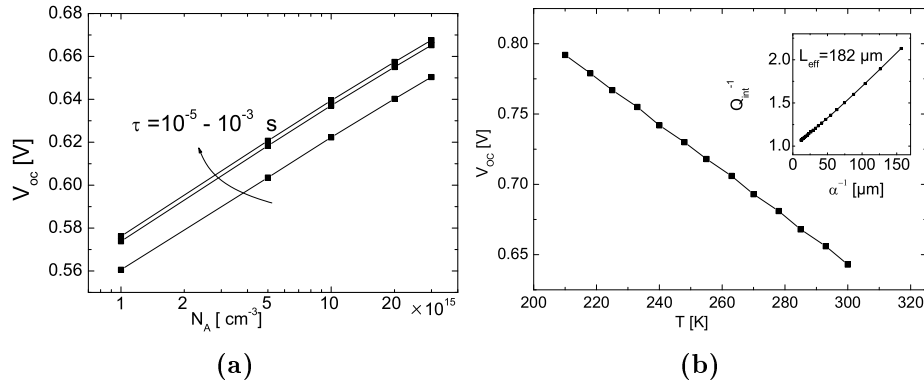


**Abbildung 4.4:**  $I$ - $U$  Kennlinie für 10 nm dicken  $a$ -Si:H( $n$ ) Emitter bei unterschiedlichen Dotierungen. Mit wachsendem  $E_c - E_f$  (abnehmender Dotierung) tritt eine S-förmige  $I$ - $U$ -Kennlinie auf und  $V_{oc}$  verringert sich.

Der Füllfaktor ist für Dotierungen  $< 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  reduziert und für  $V > V_{oc}$  steigt der Strom wieder stark mit der Spannung an, wodurch die S-förmige Kennlinie zustande kommt. Eine Erklärung für dieses Verhalten wird in Kap. 4.1.3 gegeben. Da keine Grenzflächendefekte in dieser Simulation berücksichtigt wurden, und die Rekombination für dünne  $a$ -Si:H Emitter hauptsächlich in der kristallinen Basis stattfindet, lässt sich erwarten, dass der Grenzwert für  $V_{oc}$  aus einer Diodengleichung abgeleitet werden kann, deren Sperrsättigungsstrom  $j_0$  sich aus dem Sperrsättigungsstrom des Emitters  $j_e$  und der Absorber  $j_b$  zusammensetzt. Ist darüber hinaus die  $a$ -Si:H-Schicht hoch dotiert, so kann man annehmen, dass der  $j_e$  vernachlässigbar ist und  $j_0$  lässt sich dann nach [48, 49] durch

$$j_0 = qD_n n_i^2 / (N_A L_{eff}) \quad (4.11)$$

berechnen. Dabei ist  $q$  die Elementarladung,  $D_n$  die Diffusionskonstante,  $n_i$  die intrinsische Ladungsträgerkonzentration,  $L_{eff}$  die effektive Diffusionslänge (siehe Kap. 5.1.4) und  $N_A$  die Akzeptorkonzentration des Silizium-Absorbers.  $V_{oc}$  lässt



**Abbildung 4.5:** (a) Abhängigkeit der Leerlaufspannung von  $N_A$ . Der Parameter  $\tau$  ist ein Maß für die Lebensdauer der Minoritäten im c-Si und wurde aus  $\tau = 1/c_n N_t$  bestimmt. (b) Abhängigkeit der Leerlaufspannung von  $T$ . Im Inset ist die Bestimmung der effektiven Diffusionslänge, wie sie in Kap. 5.1.4 beschrieben wird, dargestellt.

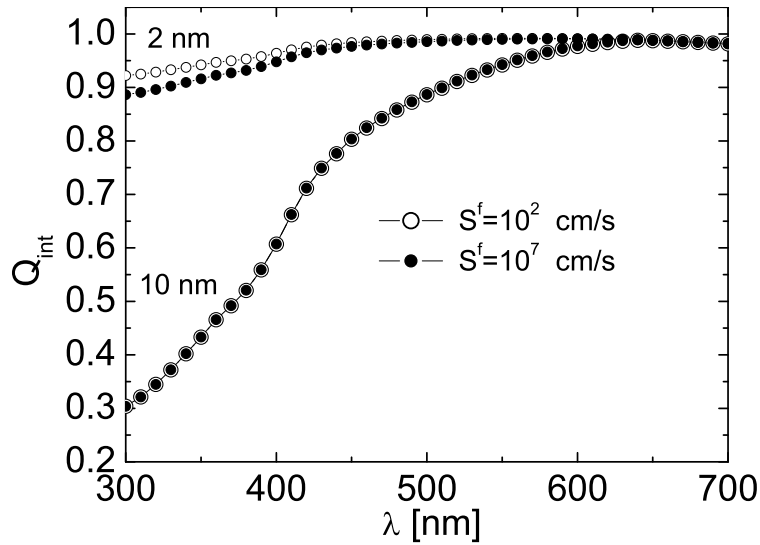
sich aus der Dioden-Gleichung ableiten:

$$V_{oc} = \frac{kT}{q} \ln(J_{sc}/j_0) \quad (4.12)$$

Damit erhält man dann [47]:

$$V_{oc} = \frac{E_g}{q} - \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{qDN_cN_v}{J_{sc}N_AL_{eff}}\right) \quad (4.13)$$

Hier ist  $E_g$  die Bandlücke,  $N_c$  und  $N_v$  sind die effektiven Zustandsdichten des Leitungs- bzw. Valenzbandes von kristallinem Silizium (Tab. 4.1). Aus Gl. 4.13 ergibt sich eine charakteristische Abhängigkeit der Leerlaufspannung von  $N_a$  und der Temperatur. In Abb. 4.5(a) u. 4.5(b) werden diese Abhängigkeiten mit Hilfe der Simulation überprüft. Für Abb. 4.5(a) wurde nur die Dotierkonzentration und für Abb. 4.5(b) nur die Temperatur variiert. Dabei wurde angenommen dass alle Parameter temperaturunabhängig sind. Für beide Fälle ergibt sich die aus Gl. 4.13 erwartete Abhängigkeit. Es stimmen auch die Absolutwerte von Simulation und Theorie nach Gl. 4.13 überein. Für die Bestimmung des Absolutwertes von  $V_{oc}$  wird  $L_{eff}$  benötigt. Die Bestimmung von  $L_{eff}$  ist in dem Inset von Abb. 4.5(b) dargestellt und entspricht der Methode wie sie in Kap. 5.1.4 beschrieben wird. Zu erwähnen ist, dass keine Grenzflächenzustände in der simulierten Struktur vorliegen, die  $V_{oc}$



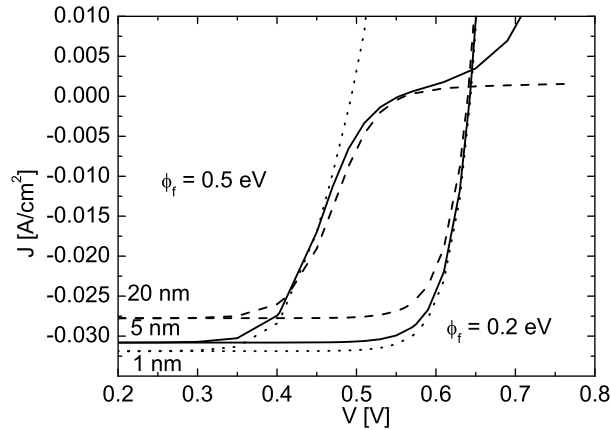
**Abbildung 4.6:** Interne Quantenausbeute im Anregungs-Bereich zwischen 300 und 700 nm für die Emitterdicken 2 und 10 nm und jeweils einer Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit  $S^f$  von  $10^2$  bzw.  $10^7$  cm/s.

verringern könnten.

Eine Eigenschaft des Heteroüberganges, die experimentell schwer zugänglich ist, ist  $\Delta E_c$ . Im einfachen Andersonmodell ergibt sich diese Größe aus der Differenz der Elektronenaffinitäten. In einem Bereich für die Elektronenaffinität des amorphen Siliziums zwischen 3.6-4 eV ergibt die Simulation keinen nennenswerten Einfluss auf die Solarzellencharakteristik. Dies ändert sich jedoch, wenn Defekte an der a-Si:H(n)/c-Si(p) Grenzfläche in die Simulation mit einbezogen werden ( Kap. 4.1.4).

### 4.1.3 Frontkontakt

Für die a-Si:H/c-Si Solarzellenstruktur wird der Frontkontakt durch das Metallgrid und ein transparentes leitendes Oxid (TCO) gebildet. Das TCO hat neben der Funktion als Antireflexschicht vor allem die Aufgabe, die Querleitfähigkeit zu erhöhen. Es bildet mit dem amorphen Emitter einen Heteroübergang. In der Simulation wird der Frontkontakt durch die Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit  $S^f$  und die Austrittsarbeit des TCO beschrieben. Das Metall wird in der Simulation nicht

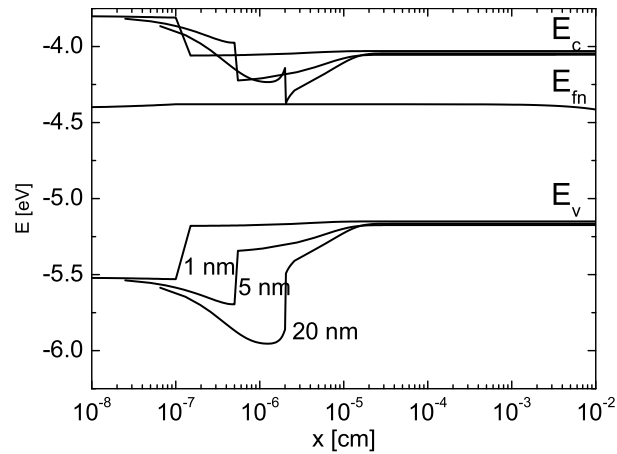


**Abbildung 4.7:** *I-U Charakteristiken für die a-Si:H Schichtdicken  $d = 1$  (gepunktet), 5 (durchgezogen), 20 nm (gestrichelt) bei verschiedenen Austrittsarbeiten des Frontkontaktmaterials. Die Austrittsarbeit führt zu einer Diffusionsspannung  $\phi_f/q$  zwischen Frontkontakt und a-Si:H Emitter: 0.2 und 0.5 V, die der Diffusionsspannung über dem a-Si:H(n)/c-Si(p) Übergang entgegengerichtet ist. Für eine Schichtdicke von 5 nm ist eine S-förmige Strom-Spannungs-Kennlinie zu beobachten.*

berücksichtigt. Die Differenz der Austrittsarbeiten von TCO und a-Si:H führt zu einer Diffusionsspannung  $\phi_f/q$ , welche über der Struktur abfällt.

In Abb. 4.6 ist die interne Quantenausbeute einer a-Si:H/c-Si Solarzelle für zwei Emitterdicken und Werten für  $S^f$  von  $10^2$  und  $10^7$  cm/s dargestellt. Daraus ist ersichtlich, dass für amorphe Emitter, wegen der starken Rekombination in der amorphen Schicht, die Oberflächenrekombination am Frontkontakt kaum eine Rolle spielt (vgl. Kapitel 4.1.2).

Der Einfluss unterschiedlicher Austrittsarbeiten des Frontkontaktes auf die I-U Charakteristik ist in Abb. 4.7 dargestellt. Führt die Austrittsarbeitsdifferenz  $\phi_f/q$  zwischen TCO und a-Si:H(n) zu einer Anreicherung der Majoritätsladungsträger im a-Si:H(n) (hier Elektronen), so wird die I-U Charakteristik kaum beeinflusst, da es sich dann bei dem Frontkontakt um einen ohmschen Kontakt handelt. Die I-U Charakteristik für  $\phi_f/q < 0.2$  V stimmt mit der für 0 V (ohmscher Kontakt) überein. Führt  $\phi_f/q$  dagegen dazu, dass eine stärkere Verarmung vorliegt, so handelt es sich um einen Schottky-Kontakt, der die Solarzellencharakteristik erheblich beeinflussen kann. Abb. 4.7 zeigt berechnete I-U Charakteristiken für Emitter-Schichtdicken von



**Abbildung 4.8:** Bänderdiagramme der TCO/a-Si:H(n)/c-Si(p)-Struktur in halblogarithmischer Darstellung unter Leerlaufbedingungen für die Schichtdicken 1, 5 und 20 nm des a-Si:H Emitters. Der Frontkontakt ist wegen der logarithmischen Darstellung nicht abgebildet ( $x=0$  cm). Die Austrittsarbeitendifferenz zwischen TCO und a-Si:H(n) führt zu einer Diffusionsspannung  $\phi_f/q$  von 0.5 V zwischen Frontkontakt und a-Si:H. Das Quasiferminiveau für Löcher  $E_{fp}$  ist wegen der Übersichtlichkeit nicht eingezeichnet.

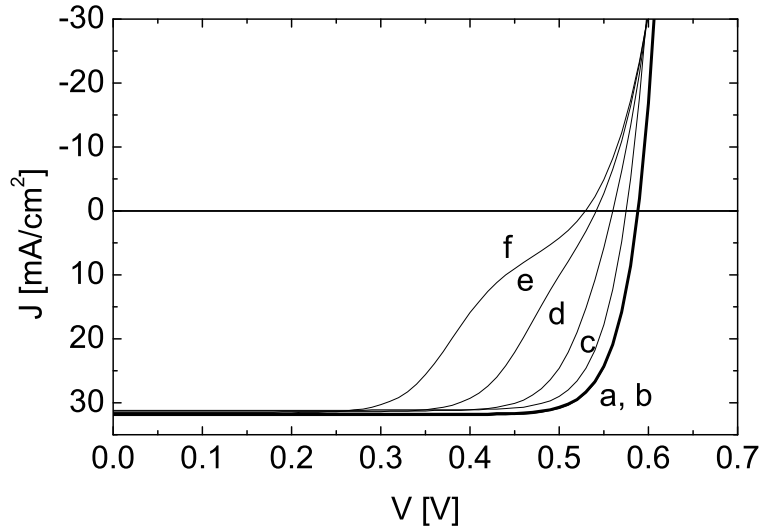
$d = 1, 5, 20$  nm bei  $\phi_f/q$  von 0.2 und 0.5 V. Bei  $d = 5$  und 20 nm nimmt mit höherer Austrittsarbeit  $V_{oc}$  und vor allem der Füllfaktor der I-U-Kennlinie ab. Bei der dünnsten Schicht wird hauptsächlich  $V_{oc}$  verringert. Ein weiteres Charakteristikum ist das Verhalten für  $V > V_{oc}$ . Während der Strom für den Emitter mit  $d = 20$  nm kaum ansteigt, zeigt sich für einen Emitter mit  $d = 5$  nm ein zweiter steiler Anstieg des Stromes (S-Kennlinie). Dieser Verlauf ähnelt dem, der in Abb. 4.1.2 beschrieben wurde und auf die Dotierung des a-Si:H zurückzuführen war. Bei der Simulation für den Emitter mit  $d = 1$  nm ist kein Abknicken der I-U Kennlinie festzustellen. An den Bänderdiagrammen für die drei Simulationen unter Leerlaufbedingungen lässt sich das unterschiedliche Verhalten erklären (siehe Abb.4.8). Das Bänderdiagramm lässt sich für den dicken Emitter (20 nm) als Reihenschaltung eines Schottky-Kontaktes mit einem n/p-Übergang verstehen. Zwischen der Bandverbiegung des Frontkontaktes und der des Heteroübergangs existiert ein Neutralgebiet. Daraus ergibt sich, dass die Spannung auf die beiden Übergänge, Frontkontakt/a-Si:H und a-Si:H/c-Si, verteilt ist. Der Schottky-Frontkontakt ist in Sperrrichtung geschaltet und begrenzt

für  $V > V_{oc}$  den Strom. Das Bänderdiagramm für die Zelle mit dem dünnen Emitter (1 nm) zeigt eine an Ladungsträgern verarmte a-Si:H Schicht, da der Abstand vom Fermi-niveau zum Leitungsband viel größer ist als durch die Dotierung des a-Si:H zu erwarten ist (0.25 eV). Dieser an Ladungsträgern völlig verarmte Emitter bewirkt, dass das TCO direkt Einfluss auf die Raumladungszone des c-Si Absorbers nimmt. Dadurch tritt in diesem Fall auch kein sperrendes Verhalten auf, da der Frontkontakt nicht als sperrender Schottky-Kontakt wirkt. Bei größeren Bandverbiegungen an der Oberfläche sinkt hier  $V_{oc}$ . Das System bildet im Prinzip einen Schottky-Kontakt mit dem c-Si(p), da das a-Si:H verarmt ist, so dass eine Art MIS-Struktur durch Metall (TCO), Isolator (a-Si:H), Halbleiter (c-Si) entsteht. Eine höhere Barriere für a-Si:H(n) bedeutet dann eine geringere Barriere für c-Si(p) und damit eine geringere Leerlaufspannung. Bei der Zelle mit 5 nm ist das Doppeldiodenverhalten zu beobachten, da bei kleinen Spannungen noch zwei getrennte Übergänge vorliegen, weshalb die Zelle auch für  $V > V_{oc}$  zunächst noch sperrt. Bei weiterer Erhöhung der Spannung verarmt der Emitter an Ladungsträgern, und es tritt der gleiche Fall auf wie für die Zelle mit dem 1 nm dicken Emitter.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass für dünne Emitter die Austrittsarbeit des TCO-Frontkontaktes die Strom-Spannungs-Charakteristik der beleuchteten Solarzelle negativ beeinflusst, wenn sie zu einer Diffusionsspannung  $> 0.2$  V zwischen TCO und a-Si:H führt.

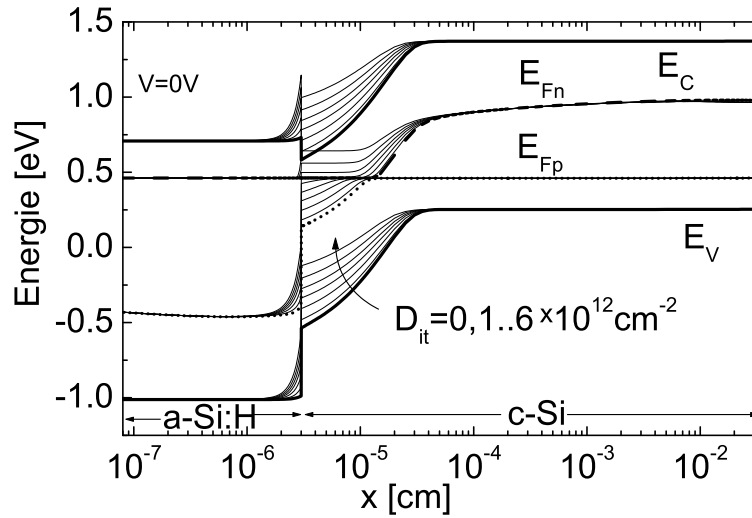
#### 4.1.4 Grenzflächendefekte

Defekte im Bereich der Hetero-Grenzfläche sind für die Funktion der Heterostruktur von sehr großer Bedeutung. Eine wesentliche Ursache können Oberflächenzustände des kristallinen Siliziums sein. Darüber hinaus kann die amorphe Schicht auf der Waferoberfläche durch die initialen Wachstumsbedingungen im Vergleich zum amorphen Volumen eine modifizierte Defektkonzentration aufweisen. Zusätzlich können Defekte durch die Plasmaabscheidung des a-Si:H(n) im kristallinen Si induziert werden [50, 51].



**Abbildung 4.9:** *I-U Kennlinien beleuchteter a-Si:H(n)/c-Si(p) Heterosolarzellen bei  $T = 300$  K mit den Grenzflächenzustandsdichten von (a)  $0\times$ , (b)  $1\times$ , (c)  $3\times$ , (d)  $4\times$ , (e)  $5\times$ , (f)  $6 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ .*

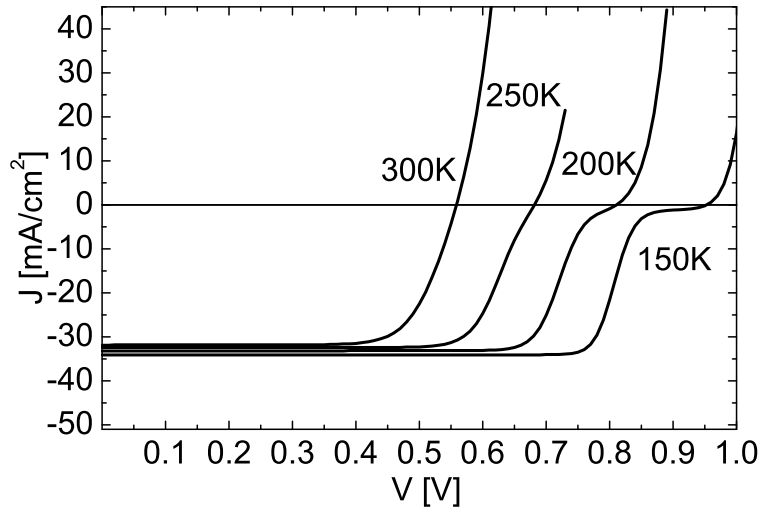
In der Simulation wurden die beiden Modelle zur Simulation von Heterokontaktgrenzflächen verwendet. Zum einen wird das thermionische Emissionsmodell verwendet und zum anderen wird eine 5 nm dicke Defektschicht eingefügt, die bis auf die Defektkonzentration (Einheit:  $\text{cm}^{-3}$ ) die Eigenschaften des kristallinen Siliziums hat. Da beide Simulationsmodelle vergleichbare Effekte zeigen, wird unabhängig vom Modell die gesamte Defektdichte angegeben (Einheit:  $\text{cm}^{-2}$ ), indem über die Dicke der Defektschicht integriert wird. Abb. 4.9 zeigt I-U Kennlinien zu deren Berechnung das thermionische Emissionsmodell verwendet wurde. Der Defekt ist dabei in der Bandmitte des kristallinen Siliziums lokalisiert und wird als akzeptorartig angenommen. Bei Defektdichten  $N_{it}$  oberhalb von  $10^{12} \text{cm}^{-2}$  nehmen  $V_{oc}$  und der Füllfaktor ab. Die Ausbildung einer S-förmigen Kennlinie ist für höhere Defektzustandsdichten zu beobachten. Zur Erklärung sind in Abb. 4.10 die zugehörigen Bänderdiagramme der beleuchteten Struktur im Kurzschlussfall gezeigt. Erreicht  $N_{it}$  einen Wert von  $10^{12} \text{cm}^{-2}$ , so wird die Ladung in den Defekten vergleichbar mit der Ladung in der Raumladungszone und das Bandprofil ändert sich. Dabei verringert sich die Bandverbiegung im kristallinen Silizium, da weniger Akzeptoren



**Abbildung 4.10:** Bänderdiagramm einer beleuchteten a-Si:H(n)/c-Si(p) Heterostruktur im Kurzschlussfall bei  $T = 300\text{ K}$  mit den Grenzflächenzustandsdichten von  $0\times$ ,  $1\times$ ,  $3\times$ ,  $4\times$ ,  $5\times$ ,  $6\times 10^{12}\text{ cm}^{-2}$ .

im Si-Absorber benötigt werden, um die Ladungen im a-Si:H(n) zu kompensieren. Gleichzeitig erhöht sich die Bandverbiegung im a-Si:H, da sich die Diffusionsspannung der Struktur mit  $N_{it}$  nicht ändert. Mit der Verringerung der Bandverbiegung im c-Si nimmt die Löcherkonzentration an der Grenzfläche zu. Damit erhöht sich die Rekombinationsrate der Grenzflächenzustände und wächst mit steigender Spannung  $V$  weiter an. Für  $V < V_{oc}$  bedeutet dies einen Verlustmechanismus, der den Photostrom reduziert. Für  $V > V_{oc}$  bestimmt der Rekombinationsstrom die Strom-Spannungs-Charakteristik, weshalb der Strom wieder stark ansteigt, was zur S-Form der Kennlinie führt. Diese nimmt mit steigender Defektkonzentration zu, da der Stromtransport über die Grenzflächenzustände immer bedeutsamer wird.

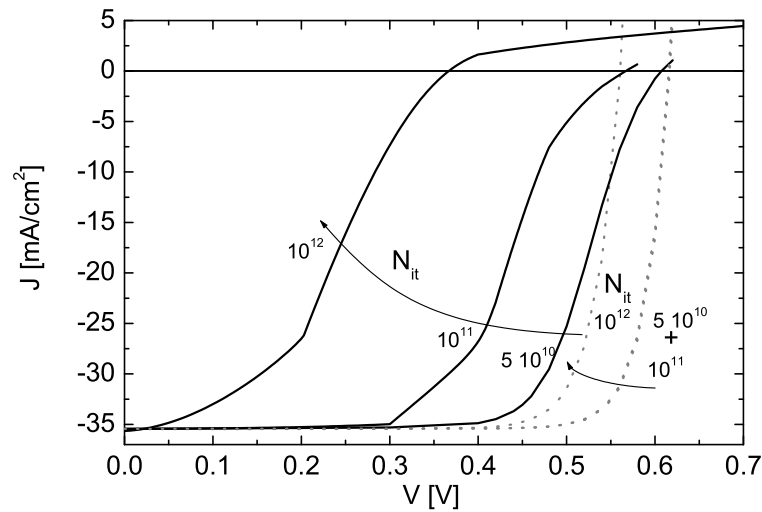
In Abb. 4.11 ist die I-U-Charakteristik für einen Wert von  $N_{it} = 4 \times 10^{12}\text{ cm}^{-2}$  bei unterschiedlichen Temperaturen gezeigt. Während bei Raumtemperatur noch kein S-förmiges Verhalten zu beobachten ist, nimmt die S-Form der Kennlinie mit sinkender Temperatur zu, wobei  $V_{oc}$  ansteigt. Wieder ist das Auftreten der S-Form mit der Zunahme von Löchern als Rekombinationspartner an der Grenzfläche verbunden. Mit sinkender Temperatur nimmt  $V_{oc}$  zu und damit die Bandverbiegung unter Leerlaufbedingungen ab. Bei tieferen Temperaturen stehen dann mehr Löcher



**Abbildung 4.11:** *I-U Charakteristiken einer beleuchteten a-SiH/c-Si Struktur bei verschiedenen Temperaturen mit einer Defektkonzentration von  $D_{it} = 4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .*

für die Rekombination an der Grenzfläche zur Verfügung. Wieder ist für  $V < V_{oc}$  der Rekombinationsstrom ein Verluststrom, der den Photostrom verringert. Für  $V > V_{oc}$  ist der Rekombinationsstrom ein Strom der das gleiche Vorzeichen hat wie der Dunkelstrom und somit steigt der Gesamtstrom wieder stark an. Das Auftreten einer S-förmigen Kennlinie sowohl bei Raumtemperatur als auch bei tiefen Temperaturen kann also durch eine erhöhte Rekombination an der a-Si:H(n)/c-Si(p) Grenzfläche beschrieben werden. Andere Autoren [52] haben das Auftreten der S-Form mit sinkender Temperatur durch  $\Delta E_c > 0.3 \text{ eV}$  beschrieben. Bei dieser Simulation wurde  $\Delta E_c$  mit 150 meV angenommen. Dies zeigt, dass nicht unbedingt eine hohe Banddiskontinuität an der a-Si:H/c-Si Grenzfläche nötig ist um eine temperaturabhängige Ausprägung der S-Kennlinie zu beobachten. Insgesamt scheinen vielmehr die Grenzflächenzustände sowie die Dotierung des a-Si:H und des Frontkontaktes Einfluss auf die Kennlinienform zu nehmen.

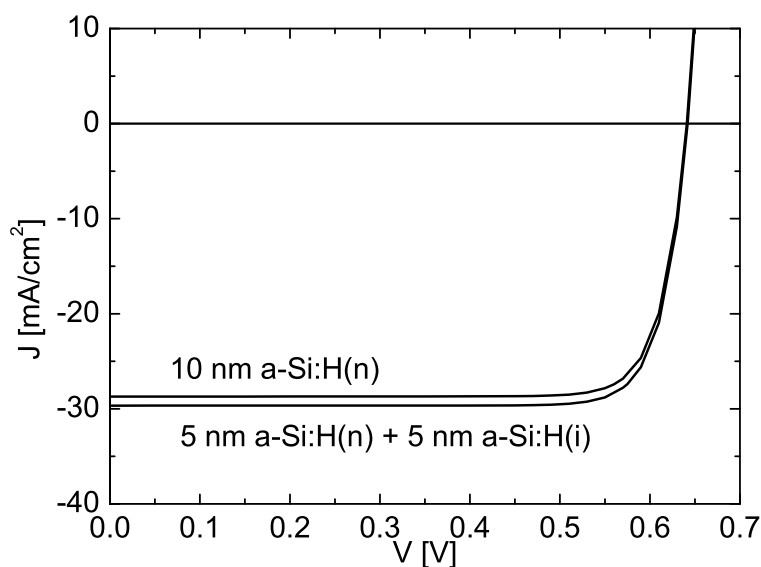
Defekte an der Grenzfläche verstärken den Einfluss von  $\phi_f/q$  zwischen TCO und a-Si:H der in Kap. 4.1.3 bereits diskutiert wurde. Abb. 4.12 zeigt den Einfluss von  $N_{it}$  auf die IU Kennlinien für zwei Werte  $\phi_f/q$  von Austrittsarbeitsdifferenzen: 0 V, also einem ohmscher Kontakt und 0.5 V, einem Schottky-Kontakt. Für  $\phi_f/q = 0.5$



**Abbildung 4.12:** *I-U Charakteristik einer beleuchteten Zelle mit einer Emittendicke von 10 nm bei ohmschen Frontkontakt (gepunktete Linien,  $\phi_f/q = 0$  V Diffusionsspannung über TCO/a-Si Kontakt) und bei einem Schottky-Frontkontakt (durchgezogene Linien,  $\phi_f/q = 0.5$  V) für verschiedene Defektkonzentrationen in einer 5 nm dicken Defektschicht an der Hetero-Grenzfläche.*

V verarmt der Emitter und das Fermi-niveau rückt an der a-Si:H/c-Si-Grenzfläche in Richtung Bandmitte (siehe Kapitel 4.1.3). Dadurch erhöht sich die Löcherkonzentration an der Grenzfläche des a-Si:H/c-Si(p)-Heteroübergangs und die Rekombination über die Grenzflächendefekte steigt an. Dies führt zu einer erheblich stärkeren Abnahme von  $V_{oc}$  als bei dem ohmschen Frontkontakt für gleiche  $N_{it}$ . Das obige Ergebnis zeigt, dass  $N_{it}$  so gering wie möglich zu halten ist. Ein Weg dazu ist die Einführung einer Pufferschicht aus undotiertem a-Si:H(i), welches eine erheblich niedrigere Defektdichte als dotiertes a-Si:H aufweist.

In Abb. 4.13 ist die I-U Charakteristik für Zellen gleicher Emittendicke, aber in einen Fall mit und im anderen Fall ohne intrinsische a-Si:H Pufferschicht dargestellt. Durch die geringere Defektdichte im Volumen wird dort die Rekombination gegenüber einer dotierten a-Si:H Schicht vermindert. Dies erhöht  $J_{sc}$ .  $V_{oc}$  ändert sich dabei kaum und bewegt sich in dem Bereich, der durch den erhöhten Kurzschlussstrom zu erwartenden Werte (1 mV). Die a-Si:H(i) Schicht führt also zu einer Erhöhung des Kurzschlussstromes, wenn die Gesamtemittendicke die gleiche bleibt. Reduziert



**Abbildung 4.13:** *I-U Charakteristik einer beleuchteten Zelle mit und ohne intrinsische Pufferschicht. Eine intrinsische Pufferschicht erhöht den Strom gegenüber einer gleich dicken dotierte Schicht.*

die intrinsische Pufferschicht auch die Grenzflächenzustandsdichte, so kann auch die Leerlaufspannung weiter erhöht werden. Dies kann in der Simulation durch die Untersuchung des Einflusses von Grenzflächenzuständen mit Hilfe des thermionischen Emissionsmodells nachgewiesen werden, denn in diesem können Ladungsträger vom c-Si über die Grenzflächenzustände rekombinieren und müssen nicht erst in das a-Si:H gelangen um dort über dessen Zustände zu rekombinieren.

#### 4.1.5 Zusammenfassung für die Simulation der a-Si:H(n)/c-Si(p)-Solarzelle

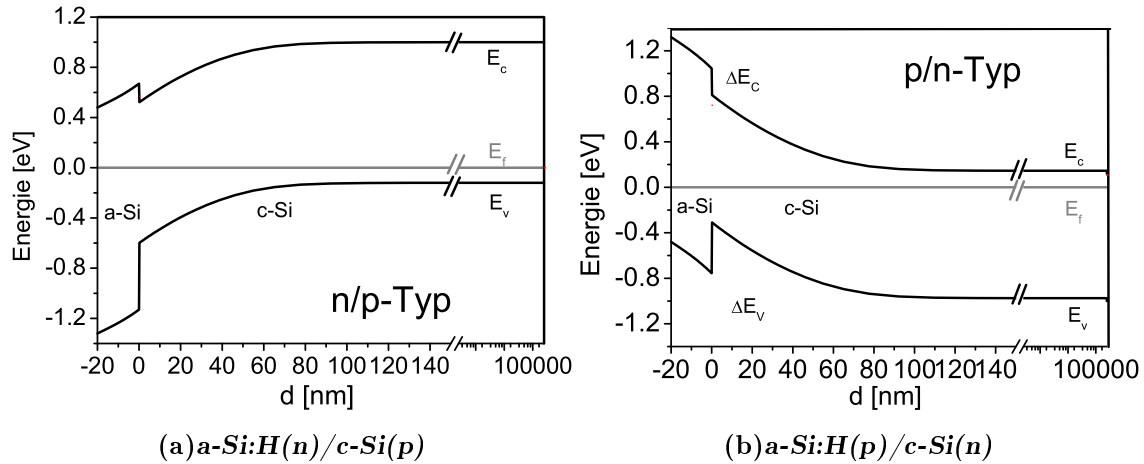
In den vorangegangenen Abschnitten wurde der Einfluss unterschiedlicher Materialparameter und Grenzflächeneigenschaften auf die Solarzellencharakteristik untersucht. Dabei ergaben sich Bedingungen für eine ideale a-Si:H(n)/c-Si(p)-Solarzelle: Der Emitter sollte eine Schichtdicke von etwa 5 nm haben. Am Frontkontakt sollte eine Diffusionsspannung  $\phi_f/q$  zwischen TCO und a-Si:H(n) von 0.2 V nicht überschritten werden.  $N_{it}$  sollte kleiner  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$  sein, um keinen merklichen Einfluss

der Rekombination auf  $V_{oc}$  und den Füllfaktor zu haben. Dies kann evtl. durch eine intrinsische Pufferschicht realisiert werden.  $E_c - E_f$  des 5 nm dicken amorphen Emitters sollte so gering wie möglich gewählt werden. Unter diesen Voraussetzungen wird  $V_{oc}$  durch die Eigenschaften des kristallinen Absorbers bestimmt.

## 4.2 a-Si:H(n)/c-Si(p) oder a-Si:H(p)/c-Si(n) Struktur ?

Die technologisch besten Heterosolarzellen aus amorph/kristallinen Heteroübergängen werden von Sanyo auf der Basis von c-Si(n) realisiert. Durch intrinsische Pufferschichten auf beiden Seiten des Absorbers und einer a-Si:H(p) Schicht als Emitter sowie einer a-Si:H(n)-Schicht als Rückkontakt werden Leerlaufspannungen über 700 mV erreicht. Durch eine Texturierung des Absorbers wird die Lichteinkopplung erhöht und die Kurzschlussströme erreichen Werte von bis zu 39 mA/cm<sup>2</sup>. Viele Gruppen arbeiten an a-Si:H/c-Si Solarzellen [3], [53], [54] [55], [56],[57],[58]. Bei den erzielten Ergebnissen fällt auf, dass die meisten Gruppen Heterokontakte durch a-Si:H(n)/c-Si(p) realisieren (n/p-Typ), während die höchsten [3] auf a-Si:H(p)/c-Si(n)-Strukturen (p/n-Typ) erzielt werden. Es stellt sich daher die Frage, ob eine der beiden Strukturen aus prinzipiellen Erwägungen zu bevorzugen ist. Zur Beantwortung erweisen sich Simulationen für die beiden Heterostrukturen als hilfreich. Für die Wahl des n/p-Typs sprechen folgende Argumente:

- Die Diffusionslänge der Minoritäten im Absorber muss so groß wie möglich sein, damit möglichst viele Ladungsträger die Raumladungszone erreichen können. Diese ist für c-Si(p)-Absorber, bei gleicher Lebensdauer, wegen der höheren Beweglichkeit der Elektronen größer als für den c-Si(n)-Absorber.
- Die Banddiskontinuität muss so klein wie möglich sein, damit sie nicht den Transport der Minoritäten über den Heterokontakt behindert:  $\Delta E_c$  ist mit ca.



**Abbildung 4.14:** Bänderdiagramm im thermodynamischen Gleichgewicht für die beiden zu vergleichenden a-Si:H/c-Si Heterostrukturen

150 meV wesentlich kleiner als  $\Delta E_v$  mit ca. 450 meV.

Diese Argumente klingen plausibel, spielen aber nicht die entscheidende Rolle, wie die Simulation der beiden Heterostrukturen zeigt. Da zur Simulation des p/n-Typs keine eigenen Messwerte vorlagen, wurde sowohl für den p/n-Typ als auch für den n/p-Typ auf einen einheitlichen Parametersatz aus der Literatur zurückgegriffen [28], der anschließend beschrieben wird. Vergleicht man die beiden Strukturen, so sind unabhängig von dem genauen Parametersatz für das amorphe Silizium folgende Eigenschaften des Heteroübergangs zu berücksichtigen:

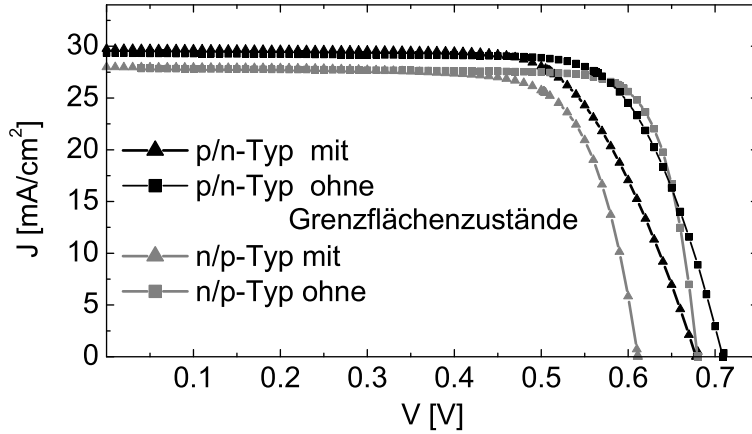
- sowohl im kristallinen Silizium, als auch im amorphen Silizium ist die Beweglichkeit der Löcher kleiner als die der Elektronen.
- $\Delta E_v > \Delta E_c$ .

Für die Simulation wurde ein ohmscher Kontakt (Flachband) sowohl als Front- als auch als Rückkontakt angenommen. Für den kristallinen Si-Absorber wurde eine Dotierung von  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  und eine konstante, energieunabhängige Defektverteilung von  $10^{12} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  gewählt. Diese bewirkt, dass sowohl für c-Si(p) als auch für c-Si(n) die Diffusionslänge wesentlich größer als die Absorberdicke ist. Für a-Si:H

wurde eine Bandlücke von 1.8 eV mit einer Dotierung von  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$  angenommen. Die charakteristische Energie  $E_{0v}$  des Valenzbandausläufers für a-Si:H(p) stimmt nach [28] mit der des Leitungsbandausläufers  $E_{0c}$  von a-Si:H(n) überein, nämlich 170 meV. Für die Simulation hat das zur Folge, dass beide Strukturen den gleichen Wert für den Abstand des Fermi-niveaus zum zugehörigen Majoritätenband haben, 0.48 eV. Damit lassen sich Effekte, die durch eine unterschiedliche Lage des Fermi-niveaus verursacht werden, eliminieren. Es wurden auch Simulationsrechnungen mit a-Si:H Parametern aus Tab. 4.2 durchgeführt, die zu  $E_{c,v} - E_f$  von 0.25 eV führen. Qualitativ stimmen die Ergebnisse überein und zeigen die gleichen Trends, was deren Unabhängigkeit von dem speziellen Parametersatz demonstriert.

Die Simulation mit den angegebenen Parametern führt zu den Bänderdiagrammen in Abb. 4.14(a) für den n/p-Typ und in Abb.4.14(b) für den p/n-Typ im thermodynamischen Gleichgewicht. Durch die geringe freie Ladungsträgerkonzentration im a-Si:H ergibt sich, dass über die ganze a-Si:H Schicht ein Potential abfällt. Dadurch dass  $\Delta E_v > \Delta E_c$  ist, ergibt sich für die a-Si:H(p)/c-Si(n) eine höhere Diffusionsspannung. Diese fällt aufgrund der unterschiedlichen Dotierungs- und Defektkonzentrationen von Emitter und Absorber hauptsächlich im Absorber ab was zur Folge hat, dass die p/n-Struktur an der Grenzfläche stärker verarmt ist als die n/p-Struktur. Die I-U Kennlinien beider Strukturen im beleuchteten Fall sind in Abb. 4.15 dargestellt. Die Defekte sind kontinuierlich mit einer Zustandsdichte von  $10^{12} \text{ cm}^{-2}\text{eV}^{-1}$  über die Bandlücke verteilt. Man sieht folgende Unterschiede zwischen der p/n- und n/p-Struktur:

- $V_{oc}$  ist für den p/n-Typ größer,
- $J_{sc}$  ist für den p/n-Typ größer,
- Defekte an der Grenzfläche verringern  $V_{oc}$  für den n/p-Typ stärker als für den p/n-Typ.
- Der Füllfaktor ist für den p/n-Typ geringer als für den n/p-Typ.



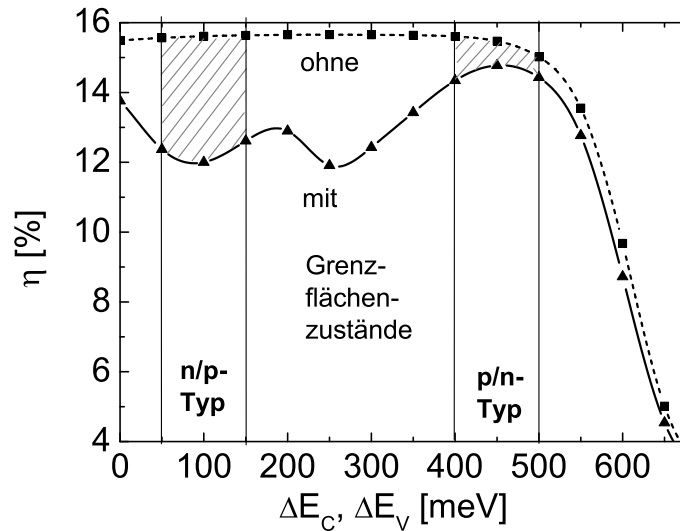
**Abbildung 4.15:**  $I$ - $U$  Charakteristik einer beleuchteten Zelle mit und ohne Grenzflächenzustände ( $N_{it} = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ) für eine n/p und eine p/n Struktur.

Diese unterschiedlichen Eigenschaften beider Zelltypen sollen im Folgenden genauer untersucht werden. Um nur den Einfluss von  $\Delta E_c$  auf die Solarzellencharakteristik zu untersuchen, wird zur Simulation zunächst eine hypothetische Struktur angenommen, bei der die Beweglichkeiten der Elektronen und Löcher sowohl im Emitter als auch im Absorber gleich groß sind:

$$\text{a-Si:H: } \mu_{n,p} = 10 \text{ cm}^2/\text{Vs} \quad (4.14)$$

$$\text{c-Si: } \mu_{n,p} = 900 \text{ cm}^2/\text{Vs} \quad (4.15)$$

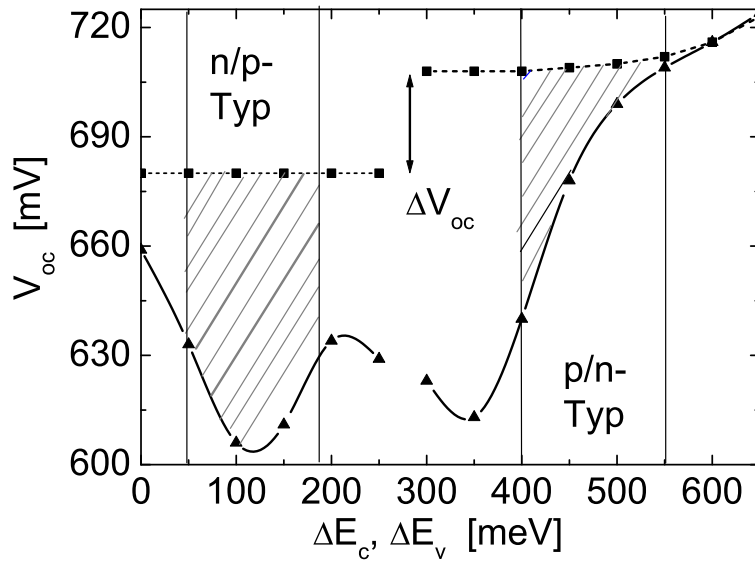
Der einzige Unterschied beider Strukturen ist dann nur noch die unterschiedliche Banddiskontinuität für die Minoritäten im c-Si. In Abb. 4.16 ist der Wirkungsgrad einer solchen Heterostruktur in Abhängigkeit der Banddiskontinuität dargestellt, die die jeweiligen Minoritäten im c-Si zu überwinden haben. Eine große Banddiskontinuität entspricht dann der p/n-Struktur und eine kleine der n/p-Struktur. Für  $N_{it} = 0$  ist der Wirkungsgrad bis zu einem Wert von 400 meV nahezu konstant bei 16 %. In diesem Bereich ändern sich  $V_{oc}$  und  $J_{sc}$  kaum.  $V_{oc}$  lässt sich aus Gl. 4.13 für Homokontakte berechnen, da keine Grenzflächenzustände berücksichtigt wurden. Der Transport über die Barriere wird nicht beeinflusst. Dieses Verhalten lässt sich in dem Modell für thermionische Emission dadurch erklären, dass bei Zunahme der Banddiskontinuität das Fermi-niveau näher an das Band für die Minoritätsla-



**Abbildung 4.16:** Wirkungsgrad einer a-Si:H/c-Si Solarzelle in Abhängigkeit der Banddiskontinuität für die Minoritäten im Absorber. Durch die Wahl des Parametersatzes ist der Unterschied zwischen p/n- und n/p-Struktur ausschließlich auf die Banddiskontinuität reduziert. In der Grafik entspricht eine kleine Banddiskontinuität dem n/p-Typ und eine große Banddiskontinuität dem p/n-Typ.

ladungsträger im c-Si rückt. Dadurch bleibt der Abstand des Fermineaus vom Majoritätenband im a-Si:H unbeeinflusst von der Größe der Banddiskontinuität. Der Ladungsträgertransport der Minoritäten im c-Si über die Grenzfläche wird also nicht beeinflusst. Wird die Banddiskontinuität weiter erhöht, so erreicht das Fermineau schließlich das Band der Minoritätsladungsträger im Absorber und der Wirkungsgrad der Solarzellen nimmt drastisch ab. Bei der Erhöhung nimmt der Abstand des Fermineaus zum Majoritätenband im a-Si:H zu und der Ladungsträgertransport über die Grenzfläche wird beeinträchtigt. Der Wert, ab welchem die Banddiskontinuität eine Rolle spielt, hängt dadurch kritisch von den Eigenschaften, insbesondere der Lage des Fermineaus im a-Si:H ab. Für die p/n-Struktur ist dies kritischer als für die n/p-Struktur, da  $\Delta E_v > \Delta E_c$ .

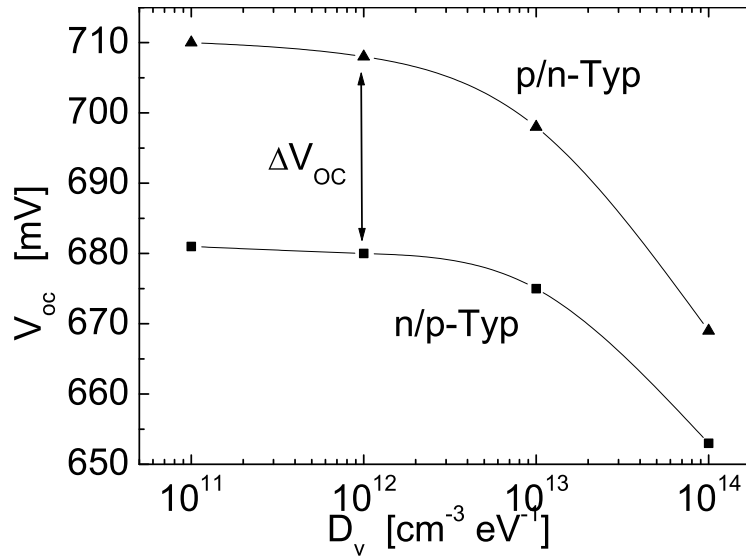
Treten Zustände an der a-Si:H/c-Si Grenzfläche auf, wird der Einfluss von  $\Delta E_c$  viel bedeutender. Abb. 4.16 und Abb. 4.17 zeigen, dass dieser Einfluss bei kleiner Banddiskontinuität stärker ausgeprägt ist. Die Verringerung des Wirkungsgrades ist



**Abbildung 4.17:**  $V_{oc}$  einer a-Si:H/c-Si-Solarzelle in Abhängigkeit der Banddiskontinuität. (Für die n/p-Struktur  $\Delta E_c$  und für die p/n-Struktur  $\Delta E_v$ .) Die Quadrate wurden ohne und die Dreiecke mit Grenzflächenzuständen ( $N_{it} = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ) berechnet.  $\Delta V_{oc}$  ist auf die unterschiedlichen Beweglichkeiten der jeweiligen Minoritäten zurückzuführen.

hauptsächlich auf eine Verringerung von  $V_{oc}$  zurückzuführen. An der p/n-Struktur wird gemäß der Shockley-Read-Hall Rekombination die Rekombination stärker unterdrückt als bei der n/p-Struktur, da weniger Majoritätsladungsträger für die Rekombination mit den Minoritäten zur Verfügung stehen. In der Simulation für Abb. 4.17 sind zusätzlich die unterschiedlichen Beweglichkeiten von Elektronen und Löchern berücksichtigt. Daraus resultiert für die p/n-Struktur als zusätzlicher Effekt ein höheres  $V_{oc}$ , das nicht durch die unterschiedlichen Banddiskontinuitäten verursacht ist, sondern durch die unterschiedlichen Beweglichkeiten der Minoritäten im Absorber.

Im Folgenden soll der Einfluss der Defekte im c-Si auf  $V_{oc}$  für beide Zelltypen diskutiert werden. Abb. 4.18 zeigt  $V_{oc}$  in Abhängigkeit von der Konzentration der Volumendefekte  $D_v$  und damit von der Diffusionslänge des Absorbers.  $V_{oc}$  ist für die p/n-Struktur unabhängig von  $D_v$  immer höher als für die inverse Struktur. Die Größe des Unterschieds hängt von den Werten von  $D_v$  und von  $N_A$  ab. Die Erhöhung von  $V_{oc}$  für die p/n-Struktur lässt sich in einem einfachen Diodenmodell durch



**Abbildung 4.18:**  $V_{oc}$  einer a-Si:H/c-Si-Solarzelle in Abhängigkeit der Defektkonzentration im c-Si. An den Kurven sind die jeweiligen Diffusionslängen der Minoritätsladungsträger angegeben.

den niedrigeren Sperrsättigungsstrom  $j_0$  für die p/n-Struktur erklären:

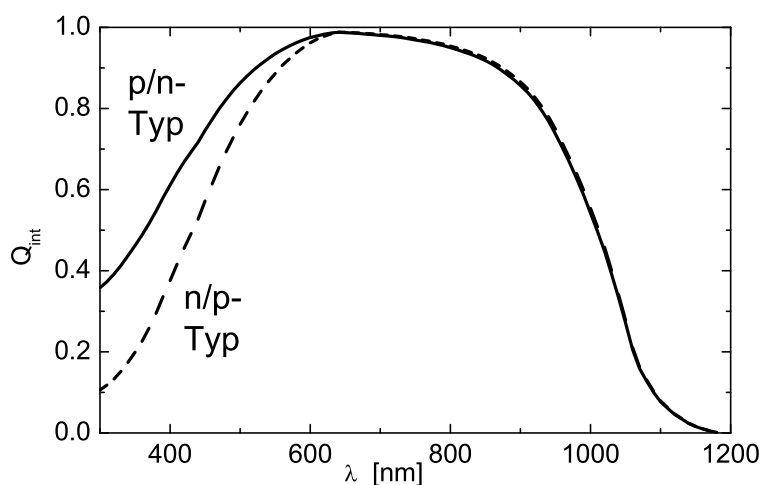
$$j_0 \propto \sqrt{\mu/\tau} \quad (4.16)$$

wobei  $\mu$  die Beweglichkeit der Minoritäten und  $\tau$  deren Lebenszeit ist. Bei gleichen  $\tau$  ist daher  $j_0$  für die p/n-Struktur kleiner, was mit dem Ausdruck für  $V_{oc}$

$$V_{oc} = \frac{kT}{q} \ln(J_{sc}/j_0) \quad (4.17)$$

zu einer Erhöhung von  $V_{oc}$  führt.  $J_{sc}$  dagegen wird durch die geringere Diffusionslänge der Löcher im c-Si bei der p/n-Struktur erniedrigt, was aber für den Fall, dass  $L_{eff}$  größer als die Absorberdicke ist, nicht die entscheidende Rolle spielt.

Nachdem die Unterschiede der beiden Strukturen im Leitungstyp des Absorber und durch die unterschiedlichen Bandediskontinuitäten untersucht wurden, wird im Folgenden der Einfluss der a-Si:H Emitter betrachtet. In der Modellierung unterscheidet sich a-Si:H(p) und a-Si:H(n) nur durch die unterschiedlichen Mobilitäten für die jeweiligen Minoritäten und die daraus resultierenden Diffusionslängen im a-Si:H. Die Lebensdauer der Minoritäten, die sich aus der Rekombinationsrate  $R$  und der Überschussladung  $\delta n$  gemäß  $\tau \simeq \delta n/R$  zu  $\tau \simeq 1.5\text{ps}$  abschätzen lässt, führt zu einer



**Abbildung 4.19:** Interne Quantenausbeute für eine n/p- und eine p/n-Struktur. Durch die größere Diffusionslänge der Elektronen im a-Si:H(p) im Vergleich zur Diffusionslänge der Löcher im a-Si:H(n) ist die interne Quantenausbeute im kurzwelligen Bereich erhöht.

Diffusionslänge von ca. 4 nm für a-Si:H(n) bzw. ca. 8 nm für a-Si:H(p). Diese Werte sind kleiner als die Emitterdicke (20 nm) und sind daher wichtig für den Transport zum ladungstrennenden Feld am a-Si:H/c-Si-Heterokontakt. Dies spiegelt sich in der internen Quantenausbeute (Abb. 4.19) wider. Durch die größere Diffusionslänge der Elektronen im a-Si:H(p) wird die Blauempfindlichkeit der p/n-Struktur erhöht. Für  $\lambda > 600$  nm ist die Absorption im a-Si:H zu vernachlässigen, und es spielt nur noch die Diffusionslänge des kristallinen Siliziums eine Rolle für die Quantenausbeute. Solange die Diffusionslänge größer als die Absorberdicke ist, führen c-Si(n) und c-Si(p) zur gleichen Quantenausbeute für diesen Wellenlängenbereich.

Als Ergebnis der Simulationen zum Vergleich von n/p- und p/n-Struktur zeigen sich intrinsische Vorteile der p/n-Struktur:

- Wesentlich ist, dass die Rekombination an der Grenzfläche durch die Unsymmetrie in der Größe der Banddiskontinuitäten für die p/n-Struktur stärker unterdrückt ist.
- Die p/n-Struktur zeigt eine höhere Leerlaufspannung aufgrund der geringeren Sperrsättigungsströme für diese Struktur.

- Für große Diffusionslängen der Minoritäten im c-Si Absorber ist die Quantenausbeute für  $\lambda > 600$  nm unabhängig von dem Dotierungstyp des Absorbers. a-Si:H(p) als Emitter zeigt wegen der höheren Beweglichkeit der Minoritäten eine höhere Blauempfindlichkeit und dadurch insgesamt einen größeren Kurzschlussstrom.

### 4.3 Ist a-Si:H der beste Emitter?

Amorphes Silizium hat eine Reihe von nachteiligen Eigenschaften:

- Hohe Defektdichte: Dadurch lässt sich  $(E_c - E_f)$  nicht beliebig nahe an das Leitungsbandniveau bringen  $(E_c - E_f) > 0.25$  eV.
- Absorption: Durch die amorphe Struktur ist der Absorptionskoeffizient im kurzwelligen Bereich sehr hoch, was zu einer großen Absorption im Emitter führt.

Andere Niedertemperaturemitter, wie  $\mu$ c-Si:H- und epitaktische c-Si (epi-Si)-Schichten bieten sich als Alternativen zum amorphen Silizium an [59, 60]. Sie haben eine geringere Defektdichte und eine deutlich höhere Leitfähigkeit. Für diese drei n/p-Strukturen wurden der Einfluss von Defekten an der Emitter/c-Si-Grenzfläche, die Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit am Frontkontakt, sowie der Einfluss einer Barriere am Frontkontakt untersucht.

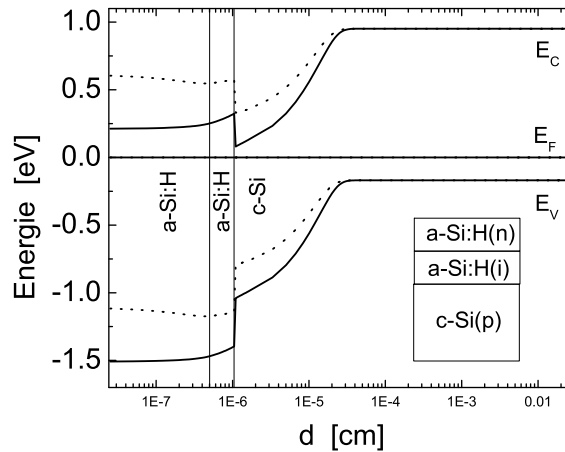
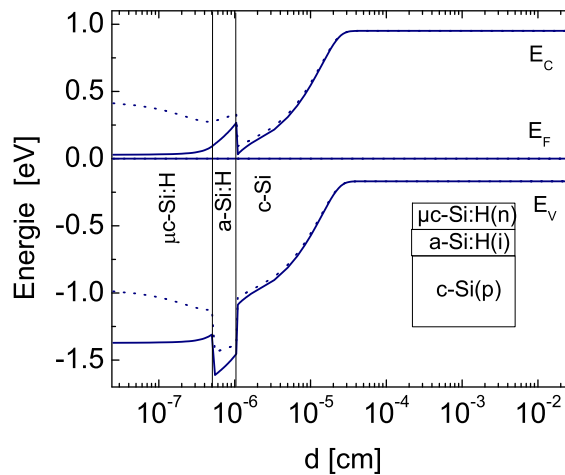
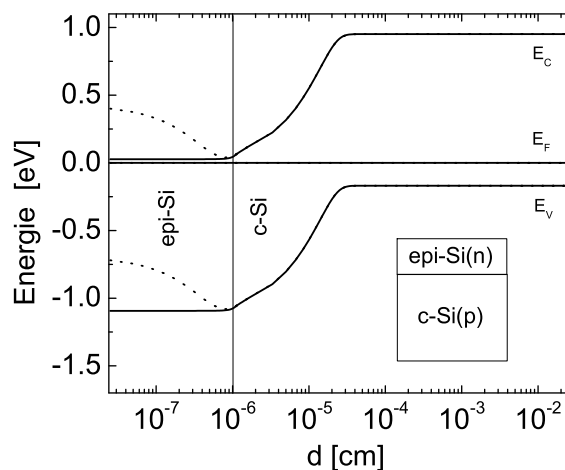
Die wesentlichen Unterschiede der Emitter sind:

- Bandlücke:  $E_g$ (eV): 1.12 (epi-Si), 1.72 (a-Si:H), 1.3 ( $\mu$ c-Si:H).
- Diffusionslänge(nm):  $\approx 4000$  (epi-Si),  $\approx 5$  (a-Si:H),  $\approx 20$  ( $\mu$ c-Si:H).
- $E_c - E_f$  (eV): 0.03 (epi-Si), 0.25 (a-Si:H), 0.03 ( $\mu$ c-Si:H).

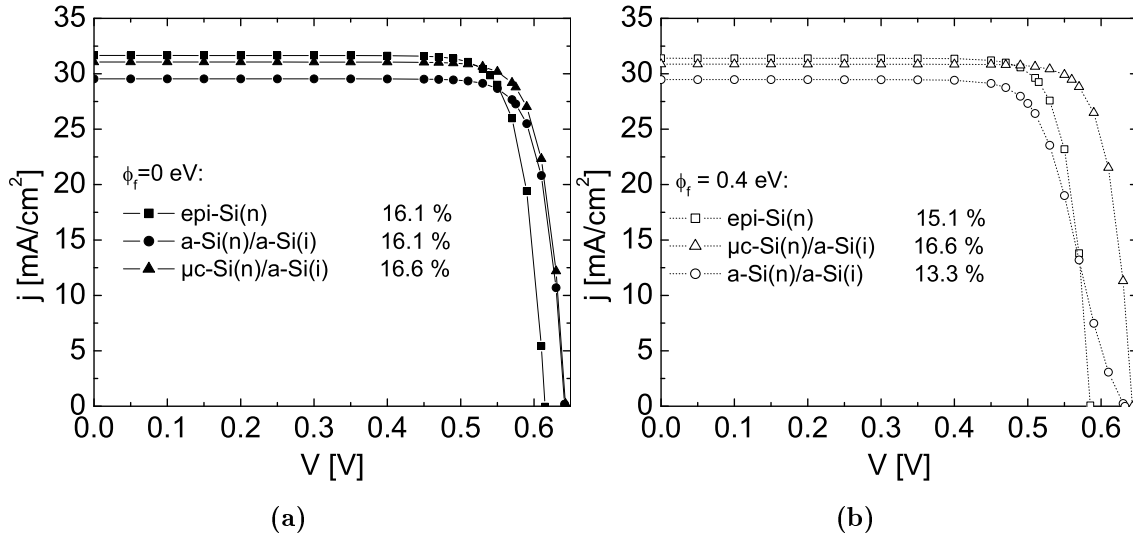
Die verschiedenen Werte von  $E_g$  und  $\chi$  bewirken unterschiedliche  $\Delta E_c$ . Darüber hinaus haben die Materialien unterschiedliche Absorptionskoeffizienten. Die Diffusionslänge hat einen Einfluss auf den Beitrag des Emitters zum Gesamtstrom.  $E_c - E_f$  bestimmt zusammen mit  $\Delta E_c$  die Diffusionsspannung und damit die Lage des Fermi-niveaus am Heteroübergang. Experimentell wurde der positive Einfluss einer intrinsischen a-Si:H(i)-Pufferschicht für  $\mu c$ -Si:H demonstriert [61, 62]. Deshalb wird für die Modellierung der  $\mu c$ -Si:H Zelle eine 5 nm dicke a-Si:H(i) Pufferschicht zwischen Absorber und Emitter eingefügt. Der amorphe Emitter wird zur Vergleichbarkeit ebenfalls durch die Kombination einer dotierten a-Si:H(n) (5 nm) und einer undotierten a-Si:H(i) (5 nm) Schicht simuliert. Der epi-Emitter wächst direkt auf dem Wafer auf und wird wegen der Vergleichbarkeit ebenfalls durch eine 10 nm dicke Schicht simuliert. Die Simulationsparameter für a-Si:H entsprechen denen von Tab. 4.2. Die Elektronenaffinität von  $\mu c$ -Si:H wurde mit  $q\chi = 3.9eV$  [63] angenommen und die Defektdichte in der Bandlücke wurde durch eine homogene Verteilung von  $10^{15}cm^{-3}eV^{-1}$  sowie Valenz- und Leitungsbandtailstates simuliert [28]. Diese Defektverteilung führt mit einer Dotierkonzentration von  $10^{19}cm^{-3}$  zu  $E_c - E_f$  von 0.03 eV. Der epi-Emitter wurde wie kristallines Silizium mit einer Defektkonzentration von  $10^{13}cm^{-3}$  behandelt. Die sich aus diesen Annahmen ergebenden Bandprofile sind für einen ohmschen Kontakt und einen Frontkontakt mit einer Diffusionsspannung  $\phi_f/q$  von 0.4 V über dem TCO/a-Si:H Übergang (Schottky-Kontakt) in Abb.4.20 dargestellt und werden für die Diskussion der Ergebnisse benötigt. Defekte an der Grenzfläche wurden in dieser Modellierung nicht berücksichtigt.

In Abb. 4.21 sind die Hell-Kennlinien der drei Zelltypen dargestellt. Der Wirkungsgrad liegt bei 16% und kann durch Verringerung der Reflexion und Rückseitenanhebung auf einen Wirkungsgrad von 21% gebracht werden. Die folgenden Eigenschaften sind den I-U Kennlinien für die verschiedenen Emitter zu entnehmen:

- $J_{sc}$  nimmt von epi- über  $\mu c$ -Si:H zur a-Si:H-Zelle ab.
- $\eta$  ist für die  $\mu c$ -Si:H Struktur am höchsten.

(a)  $a\text{-Si:H}(n)/a\text{-Si:H}(i)/c\text{-Si}(p)$ (b)  $\mu c\text{-Si:H}(n)/a\text{-Si:H}(i)/c\text{-Si}(p)$ (c)  $\text{epi-Si}(n)/c\text{-Si}(p)$ 

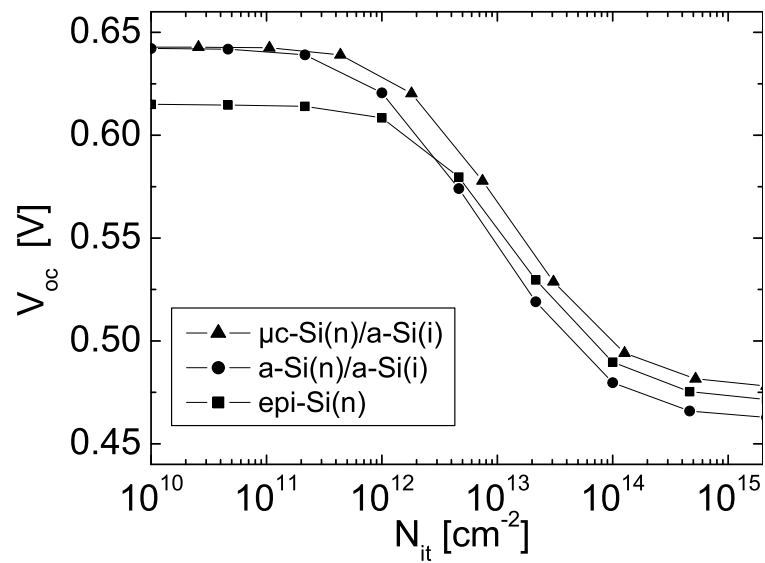
**Abbildung 4.20:** Bänderdiagramm im thermodynamischen Gleichgewicht für die zu vergleichenden Emittter/ $c\text{-Si}(p)$  Heterostrukturen. Die gepunkteten Linien entsprechen dem Bänderdiagramm für einen Frontkontakt mit Schottky Eigenschaften ( $0.4\text{ V}$  Diffusionsspannung  $\phi_f/q$  über dem TCO/Emittter Frontkontakt), während die durchgezogenen Linien dem Bänderdiagramm für einen ohmschen Kontakt entsprechen.



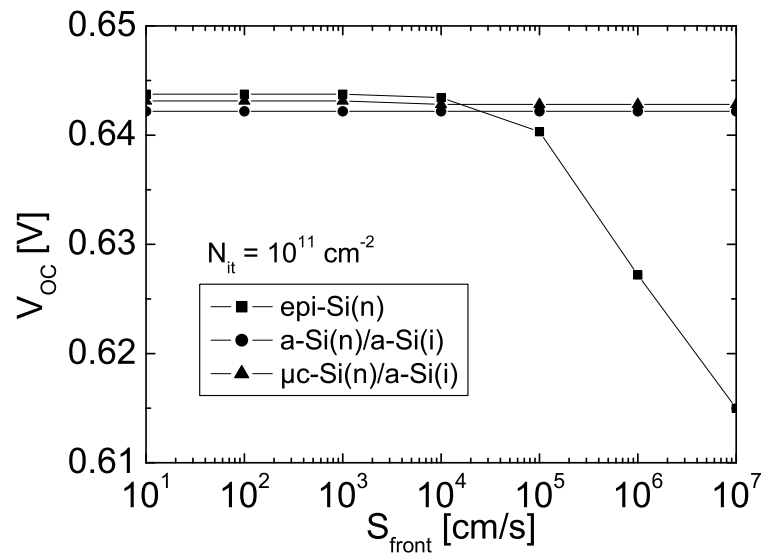
**Abbildung 4.21:**  $I$ - $U$  Kennlinie von Heterosolarzellen mit folgenden Emittern: epi, a-Si:H,  $\mu$ c-Si:H bei (a) ohmschen Frontkontakt und (b) bei Schottky-Frontkontakt mit einer Diffusionsspannung  $\phi_f/q$  von 0.4 V zwischen Frontkontakt und Emitter.

- Eine Barriere am Frontkontakt beeinflusst die  $\mu$ c-Si:H Zelle kaum, wohingegen sowohl bei der epi- als auch bei der a-Si:H Zelle  $V_{oc}$  und FF abnehmen.
- $V_{oc}$  ist für die epi-Struktur kleiner als für die beiden anderen Strukturen.

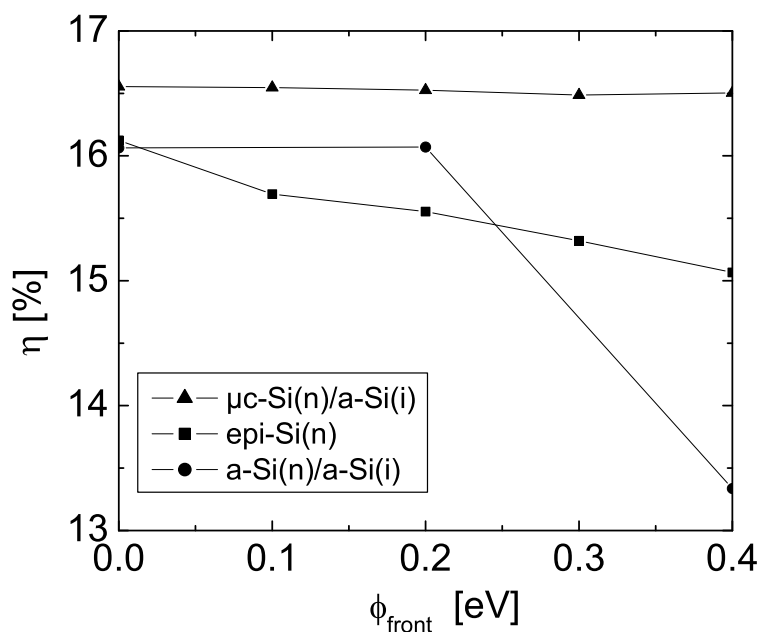
Diese Unterschiede bleiben auch qualitativ bei Einführung von Grenzflächenzuständen bestehen. Die Abnahmen von  $J_{sc}$  lässt sich durch das unterschiedliche Absorptionsverhalten, sowie die unterschiedlichen Diffusionslängen erklären. Wegen der großen Diffusionslängen der Minoritäten im epi-Si tragen viele der im Emitter erzeugten Ladungsträger zum Strom bei. Die geringere Diffusionslänge im  $\mu$ c-Si:H und a-Si:H führen zu kleineren Beiträgen der Emitter. Der Beitrag der a-Si:H(i) Schicht zum Kurzschlussstrom in der  $\mu$ c-Si:H-Struktur ist wegen des größeren Feldes in dieser Schicht, bedingt durch die größere Diffusionsspannung, höher als in der Zelle mit a-Si:H-Emitter. Grenzflächenzustände an der Emitter/c-Si Grenzfläche verringern vor allem  $V_{oc}$ , da eine erhöhte Rekombination eine geringere Aufspaltung der Quasiferminiveaus zur Folge hat. In Abb. 4.22 ist der Einfluss von Grenzflächenzuständen auf  $V_{oc}$  dargestellt. In allen Fällen nimmt  $V_{oc}$  für  $N_{it} > 10^{12}$  cm<sup>-2</sup> stark ab. Die Abhängigkeit der Leerlaufspannung von  $S^f$  am Frontkontakt zwischen TCO und



**Abbildung 4.22:**  $V_{oc}$  in Abhängigkeit von der Defektkonzentration  $N_{it}$  an der Heterokontaktgrenzfläche für die Emittter: epi, a-Si:H,  $\mu\text{c-Si:H}$ .



**Abbildung 4.23:**  $V_{oc}$  in Abhängigkeit von  $S^f$  am Frontkontakt für die Emittter: epi, a-Si:H,  $\mu\text{c-Si:H}$ .



**Abbildung 4.24:** Wirkungsgrad in Abhängigkeit der Bandverbiegung am Frontkontakt  $\phi_f$ , für die Emittter: epi-, a-Si:H,  $\mu\text{c-Si:H}$ .

Emittter ist in Abb. 4.23 dargestellt. Hier ist der Einfluss auf die a-Si:H und  $\mu\text{c-Si:H}$  Zelle vernachlässigbar. Bei diesen beiden Zelltypen ist die Volumenrekombination im Emittter so groß, dass ein hoher Wert von  $S^f$  die Verluste nicht signifikant erhöht (siehe Kapitel 4.1.2). Beim epi-Emittter mit der geringen Volumenrekombination ist für  $S > 10^4$  die Rekombination am Frontkontakt nicht zu vernachlässigen. Für  $S < 10^4$  erreicht  $V_{oc}$  etwas höhere Werte als für die beiden anderen Zelltypen. Kurzschlussstrom und Füllfaktor werden kaum von  $S_f$  beeinflusst.

In Abb. 4.24 ist der Einfluss der Diffusionsspannung  $\phi_f$  zwischen TCO und a-Si:H auf den Wirkungsgrad dargestellt. Der  $\mu\text{c-Si:H}$  Emittter zeigt sich am unempfindlichsten gegenüber Variationen der Austrittsarbeit des Frontkontaktes. Die Zelle mit dem a-Si:H Emittter wird ab einer Diffusionsspannung von 0.2 eV beeinflusst. Hier ist hauptsächlich der Füllfaktor, aber auch eine Abnahme von  $V_{oc}$  für den verringerten Wirkungsgrad verantwortlich (siehe Abb. 4.21). Im Falle der epi-Si-Struktur nimmt hauptsächlich  $V_{oc}$  ab. Aus den Bänderdiagrammen 4.20 ist zu entnehmen, dass die Diffusionsspannung über Emittter und Frontkontakt für den epi-Si- und

$\mu\text{c-Si:H}$ -Emitter durch freien Ladungsträger im Emitter aufgebracht werden kann. Dies gilt auch für den  $\text{a-Si:H}$  Emitter bis zu einer Diffusionsspannung von 0.2 V über dem TCO/ $\text{a-Si:H}$ -Frontkontakt. Im Gegensatz zum  $\mu\text{c-Si:H}$ - und epi-Emitter tragen beim  $\text{a-Si:H}$ -Emitter die Defektzustände einen Großteil der Ladung. Dadurch wird das Fermi-niveau bei einer Umladung auch stärker verschoben als bei den beiden anderen Emittertypen. Bei größeren  $\phi_f$  werden beim  $\text{a-Si:H}$ -Emittertyp auch noch Ladungsträger aus dem Absorber benötigt, um Ladungsneutralität des Bauelements zu erreichen. Dies führt zu einer Veränderung des Bandprofils auch im  $\text{c-Si}$  Absorber und wie in Kap. 4.1.3 zu einer S-förmigen Kennlinie.

## 4.4 Schlussfolgerungen

Durch die Simulationsrechnungen zur  $\text{a-Si:H(n)/c-Si(p)}$  Struktur konnten Designkriterien für eine optimierte Solarzellenstruktur angegeben werden:

- Die Defektkonzentration an der  $\text{a-Si:H/c-Si}$  Grenzfläche hat einen wesentlichen Einfluss auf die Strom-Spannungscharakteristik. Nur für  $N_{it} < 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  wird der Einfluss auf  $V_{oc}$  und FF vernachlässigbar.
- Die Emitterdicke ist so dünn wie möglich zu wählen um die Absorption im rekombinationsaktiven amorphen Emitter zu minimieren. Eine untere Grenze bildet die Dicke, ab der der Emitter durch den Frontkontakt an Ladungsträgern verarmt (ca. 5nm).
- $E_c - E_f$  im  $\text{a-Si:H}$  muss ausreichen um eine Verarmung des Emitters zu vermeiden. Eine Verarmung führt zu einer Verringerung von  $V_{oc}$  und des Füllfaktors.
- Die Diffusionsspannung  $\phi_f/q$  zwischen TCO und  $\text{a-Si:H}$  muss kleiner 0.2 V sein.
- Die I-U-Charakteristik kann durch eine Diodengleichung beschrieben werden, falls der Einfluss von Grenzflächendefekten zu vernachlässigen ist. Der Sperr-

sättigungsstrom ist dabei durch die Eigenschaften des Absorbers und des Rückkontaktes bestimmt.

- Das Auftreten einer S-förmigen I-U-Charakteristik konnte auf mehrere Ursachen zurückgeführt werden: Defekte an der a-Si:H/c-Si-Grenzfläche, auf  $\phi_f$  des TCO/a-Si:H Frontkontaktes oder durch große  $E_c - E_f$  Werte im a-Si:H.

Bei dem Vergleich der a-Si:H(n)/c-Si(p) Struktur mit der inversen Struktur zeigten sich Vorteile der a-Si:H(p)/c-Si(n) Solarzelle:

- Eine große Banddiskontinuität für die Minoritäten im c-Si sorgt für eine Abnahme der Rekombination an der Heterogrenzfläche.
- $\mu_p < \mu_n$  im a-Si:H führt zu einer größeren Blauempfindlichkeit der Zelle.
- $\mu_p < \mu_n$  im c-Si führt zu einer höheren Leerlaufspannung.

Ein Vergleich verschiedener Emmitterstrukturen ergab Vorteile für einen  $\mu c$ -Si:H Emmitter:

- $\mu c$ -Si:H Emmitter sind unempfindlich gegenüber der Austrittsarbeit des Frontkontaktes.
- $\mu c$ -Si:H Emmitter sind unempfindlich gegenüber der Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit des Frontkontaktes.

# Kapitel 5

## Methoden

### 5.1 Messverfahren

Der zweite Teil dieser Arbeit befasst sich mit der experimentellen Realisierung der a-Si:H(n)/c-Si(p)-Heterosolarzelle. Die zur Charakterisierung dieser Struktur und der Einzelschichten verwendeten Messmethoden werden im folgenden Kapitel vorgestellt.

Zur Auswertung der Messergebnisse der Oberflächenphotospannungs-Methode, der Methode zur Messung der internen Quantenausbeute sowie der photomodulierten Kontaktstrom-Methode wird die Lösung der Diffusionsgleichung für den Minoritätenstrom herangezogen. Die Diffusionsgleichung lautet für Elektronen als Minoritäten im Kleinsignalfall:

$$-D_n \frac{\partial^2 \tilde{n}(x)}{\partial x^2} + \frac{\tilde{n}(x)}{\tau} + i\omega \tilde{n}(x) = \tilde{I} \alpha \exp(-\alpha x) \quad (5.1)$$

Dabei wird die Ladungsträgerkonzentration sinusförmig mit der Frequenz  $\omega$  moduliert. Die Lichtanregung erfolgt mit der Intensität  $\tilde{I}$  bei  $x=0$ .  $D_n$  ist die Diffusionskonstante der Elektronen,  $\tau$  deren Volumenlebensdauer,  $\tilde{n}$  die Überschussladungsträgerkonzentration und  $\alpha$  der Absorptionskoeffizient. Die Voraussetzungen für die Gültigkeit der obigen Gleichung sind:

- Die Raumladungszone (Dicke  $w_r$ ) darf keine Rolle für den Ladungstransport (Diffusion) spielen. Mit  $L_D$  als Diffusionslänge der Minoritäten muss gelten:  $L_D/w_r \gg 1$ .
- Die Ladungsträgerabsorption in der Raumladungszone muss vernachlässigbar sein ( $\alpha w_r \ll 1$ ).
- Die Messung muss für niedrige Injektionsbedingungen durchgeführt werden. Mit  $p_0$  als Majoritätenkonzentration muss gelten:  $\tilde{n}/p_0 \ll 1$ .

Mit den Randbedingungen für die Vorder- und Rückseite der Probe

$$D_n \frac{\partial \tilde{n}(x)}{\partial x} \Big|_{x=0} = S_n^f \tilde{n}(x) \Big|_{x=0} \quad (5.2)$$

$$\tilde{n}(x) \Big|_{x=W} = 0. \quad (5.3)$$

Dabei ist  $S_n^f$  die Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit für die Elektronen bei  $x=0$ . Damit erhält man dann als Lösung von Gl. 5.1 für die Ladungsträgerkonzentration:

$$\tilde{n}(x) = \frac{\alpha\tau}{1 - \alpha^2 D_n \tau + i\omega\tau} \tilde{I} \cdot \left[ \exp(-\alpha x) - \exp(-\alpha W) \cosh\left(\frac{x-W}{\tilde{L}_D}\right) + \right. \quad (5.4)$$

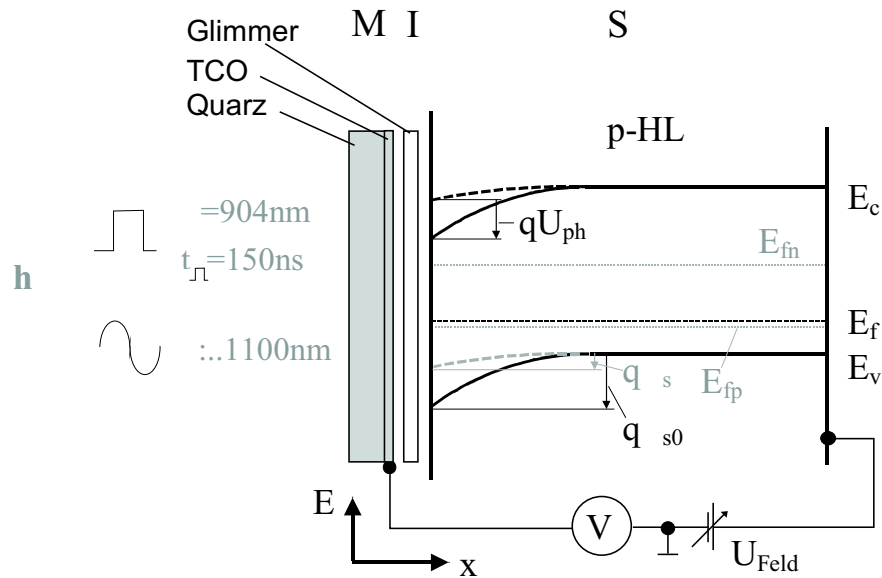
$$\left. \frac{\frac{S_n^f \tilde{L}_D}{D_n} + \tilde{L}_D \alpha - \exp(-\alpha W) \left( \sinh\left(\frac{W}{\tilde{L}_D}\right) + \frac{S_n^f \tilde{L}_D}{D_n} \cosh\left(\frac{W}{\tilde{L}_D}\right) \right)}{\cosh\left(\frac{W}{\tilde{L}_D}\right) + \frac{S_n^f \tilde{L}_D}{D_n} \sinh\left(\frac{W}{\tilde{L}_D}\right)} \sinh\left(\frac{x-W}{\tilde{L}_D}\right) \right]$$

$$\text{mit } \tilde{L}_D = \sqrt{\frac{D_n \tau}{1 + i\omega\tau}}$$

Dieser komplexe Ausdruck wird für die Interpolation der folgenden Messmethoden verwendet und kann unter den in den Messverfahren angegebenen Bedingungen im Einzelnen stark vereinfacht werden.

### 5.1.1 Oberflächenphotospannung (SPV)

Die Oberflächenphotospannung (SPV) wird in dieser Arbeit benutzt, um die Diffusionslänge ( $L_D$ , statische SPV), sowie die Oberflächenzustandsdichte eines Halbleiters



**Abbildung 5.1:** Prinzipskizze zur Oberflächenphotospannungsmethode. Das Bänderdiagramm ist für den Halbleiter für den unbeleuchteten (durchgezogene Linie) und den beleuchteten (gestrichelte Linie) dargestellt. Je nach Messmodus wird die Probe mit einem Lichtpuls oder mit sinusförmig moduliertem Licht beleuchtet (siehe Text).

( $D_{it}$ , dynamische SPV) zu bestimmen. Das zugrunde liegende Modell ist für beide Methoden identisch und durch Abb. 5.1 dargestellt. In der Regel weist eine Halbleiteroberfläche eine Bandverbiegung auf. Durch Beleuchtung des Halbleiters werden Überschussladungsträger generiert, was zu einer Verringerung der Bandverbiegung führt. Der Unterschied der Bandverbiegung zwischen beleuchteter und unbeleuchteter Halbleiteroberfläche ist die Photospannung  $U_{Ph}$  [64], die von der Überschussladungsträgerkonzentration an der Oberfläche des Halbleiters ( $\tilde{n}(0)$ ) abhängt und kapazitiv über eine MIS-Struktur gemessen wird. Das Metall M wird dabei durch ein transparentes leitendes Oxid (TCO) und der Isolator I durch optisch klaren Glimmer realisiert. Die Rückseite des Halbleiters wird durch einen Metallteller sowie zwei Stahlnadeln kontaktiert. Durch die Verwendung dieser MIS-Struktur lässt sich die Probe ohne aufwändige Präparation von Messkontakten analysieren. Die Bestimmung der Oberflächenphotospannung wird in zwei verschiedenen Messmodi benutzt, die in den folgenden Unterkapiteln beschrieben werden.

## Statische Oberflächenphotospannung

Die statische SPV-Methode dient zur Bestimmung der Diffusionslänge  $L_D$  [65] in dem Si-Wafer. Der Halbleiter wird von einer Seite mit einer Halogen-Lampe über einen Monochromator mit monochromatischem Licht beleuchtet (700-1100 nm). Dabei wird die Photospannung und damit  $n(0)$  bei Änderung der Anregungswellenlänge des Lichtes konstant gehalten, indem die Lichtintensität nachgeregelt wird. Unter noch zu benennenden Voraussetzungen ergibt sich dann ein linearer Zusammenhang zwischen der Lichtintensität und dem reziproken Absorptionskoeffizienten ( $1/\alpha$ ) des Materials:

$$\tilde{I} = \text{const} \cdot (1 + 1/(L_D\alpha)) \quad (5.5)$$

Aus dem Kehrwert der Steigung der Geraden ergibt sich daraus bei bekanntem  $\alpha$  die Diffusionslänge.

Die Voraussetzungen für die Gültigkeit der Methode findet man aus der allgemeinen Lösung der Diffusionsgleichung 5.1. Sie hat für den stationären Fall ( $\omega = 0$ ) bei  $x=0$  die Form

$$\tilde{n}(0) = \frac{\alpha\tau}{1 - \alpha^2 L_D^2} \tilde{I} \cdot \left[ 1 - \exp(-\alpha W) \cosh\left(-\frac{W}{L_D}\right) + \sinh\left(-\frac{W}{L_D}\right) \cdot \frac{\frac{S_n^f L_D}{D_n} + L_D \alpha - \exp(-\alpha W) \left( \sinh\left(\frac{W}{L_D}\right) + \frac{S_n^f L_D}{D_n} \cosh\left(\frac{W}{L_D}\right) \right)}{\cosh\left(\frac{W}{L_D}\right) + \frac{S_n^f L_D}{D_n} \sinh\left(\frac{W}{L_D}\right)} \right]. \quad (5.6)$$

Mit den Annahmen, dass

- alles Licht absorbiert wird,  $\alpha W \gg 1$  und
- dass  $L_D$  kleiner als die Dicke des Absorbers ist,  $W/L_D \gg 1$

ergibt sich daraus der für die Auswertemethode wichtige Zusammenhang:

$$\tilde{n}(0) = \frac{(1 - R)L_D}{S_n^f + D/L_D} \cdot \frac{\tilde{I}}{L_D + 1/\alpha} \quad (5.7)$$

Aus Gl. 5.7 ist ersichtlich, dass zusätzlich  $S_n^f$  unabhängig von der Anregungsintensität und das Reflexionsvermögen  $R$  unabhängig von der Wellenlänge sein müssen.

## Dynamische Oberflächenphotospannung

Die dynamische SPV-Messung wird benutzt, um die Bandverbiegung und die Verteilung der Oberflächenzustände  $D_{it}$  in der Bandlücke des kristallinen Wafers vor der Deposition des amorphen Emitters zu ermitteln. Die Berechnung der Zustandsdichteverteilung aus dem gemessenen SPV-Signal geht auf [66, 67] zurück und entspricht der Auswertung von Grenzflächenzustandsdichten mit der Kapazitäts-Spannungs (C-V) Methode an MIS Kontakten. Im Unterschied zur C-V Methode braucht bei der SPV-Methode der MIS-Kontakt nicht präpariert zu werden, sondern ist in dem Messaufbau integriert (vgl. Abb. 5.1.1), so dass an beliebig vorbehandelten Wafern die Grenzflächenzustandsdichte bestimmt werden kann. Die optische Anregung erfolgt über einen 150 ns langen Laserpuls der Wellenlänge 904 nm mit einer Leistung von 100W/cm<sup>2</sup>. Bei der Methode wird durch Anlegen einer Vorspannung die Bandverbiegung an der Vorderseite gezielt verändert. Dadurch lässt sich der Zusammenhang zwischen Bandverbiegung und angelegter Spannung bestimmen, aus dem sich dann die Grenzflächenzustandsdichte  $D_{it}(E)$  ergibt.

Im unbeleuchteten Fall wird die Bandverbiegung an der Oberfläche durch die Ladung in den Grenzflächenzuständen sowie der Dotierung des Wafers bestimmt. Über die Poissongleichung besteht ein eindeutiger Zusammenhang zwischen der Raumladung  $Q_{sc}$  und der Bandverbiegung an der Oberfläche  $\varphi_{s0}$ , der durch die sogenannte Dotierfunktion  $F$  beschrieben wird (Gl. 5.11 und [64]). Wegen der Ladungsneutralität des Gesamtsystems muss die Ladung auf der Elektrode und die Ladung in den Grenzflächenzuständen durch die Raumladung im Halbleiter kompensiert werden. Durch den eingestrahnten Laserpuls werden die Ladungsverhältnisse in der Raumladungszone und damit die Bandverbiegung verändert, was zu der messbaren Photospannung  $\tilde{U}_{Ph}$  führt. Diese ergibt sich aus der Differenz der Bandverbiegung mit und ohne Beleuchtung,  $\varphi_s - \varphi_{s0}$  und der Demberspannung  $U_D$ , die sich durch die unterschiedlichen Beweglichkeiten von Elektronen und Löchern ergibt:

$$\tilde{U}_{Ph} = \varphi_s - \varphi_{s0} + U_D \quad (5.8)$$

$$U_D = \frac{kT}{q} \frac{b-1}{b+1} \ln \left( 1 + \frac{\Delta n}{n_i} \frac{b+1}{\lambda_{HL} + b/\lambda_{HL}} \right) \quad (5.9)$$

Dabei ist  $\Delta n$  die Überschussladungsträgerkonzentration in der Raumladungszone,  $b = \mu_n/\mu_p$  und  $\lambda_{HL}$  das Verhältnis von Majoritätenkonzentration zur intrinsischen Ladungsträgerkonzentration  $n_i$ . Unter der Annahme, dass sich in der kurzen Beleuchtungszeit (150 ns) keine Grenzflächenzustände umladen, muss auch nach der Beleuchtung die Raumladung  $Q_{sc}$  gleich der Raumladung vor der Beleuchtung sein. Umladungen an der Frontelektrode können während dieser Zeit infolge der hohen Eingangsimpedanz des nachfolgenden Verstärkers ( $R > 10^{10}\Omega$ ) und der Isolatorkapazität von etwa 100 pF vernachlässigt werden. Aus der Annahme der Gleichheit der Ladungen in den Grenzflächenzuständen vor und nach der Belichtung ergibt sich die Gleichheit der Dotierfunktionen  $F$ :

$$F(\varphi_{s0}, \lambda_{HL}, \Delta n = 0) = F(\varphi_s, \lambda_{HL}, \Delta n \neq 0) \quad (5.10)$$

$$F(\varphi, \lambda_{HL}, \Delta n)^2 = \lambda_{HL}(e^{-q\varphi/kT} - 1) + \lambda_{HL}^{-1}(e^{q\varphi/kT} - 1) + \quad (5.11)$$

$$(\lambda_{HL} + \lambda_{HL}^{-1})\varphi + \lambda_{HL} \frac{\Delta n}{p_{eq}}(e^{-q\varphi/kT} + e^{q\varphi/kT} - 2)$$

Bei Kenntnis von  $\Delta n$ , die man aus einer Kalibrierungsmessung bestimmt, lässt sich aus dem gemessenen Photospannungssignal nach Subtraktion der Demberspannung die tatsächlich anfallende Photospannung  $\varphi_s - \varphi_{s0}$  berechnen. Unter Verwendung von Gl. 5.10 lässt sich dann die Ausgangsbandverbiegung  $\varphi_{s0}$  durch Lösen einer quadratischen Gleichung bestimmen. Wird die Bandverbiegung in Abhängigkeit von der Vorspannung gemessen, so erhält man die „band-bending-bias-relation“, aus der man wie bei C-V Messungen die Grenzflächenzustandsdichte bestimmt [66]: Durch Ändern der angelegten Spannung  $dV_g$  ändert sich der Spannungsabfall über dem Halbleiter  $d\varphi_{s0}$  sowie dem Isolator  $dV_{Ox}$  und ebenso die Ladungen in dem Frontkontakt  $Q_g$ , in der Raumladungszone des Halbleiters  $Q_{sc}$  und in den Grenzflächenzuständen  $Q_{it}$

$$-dV_g + dV_{Ox} + d\varphi_{s0} = 0 \quad (5.12)$$

$$dQ_g + dQ_{it} + dQ_{sc} = 0 \quad (5.13)$$

Mit der Definition der Isolatorkapazität  $C_{Ox} = dQ_g/dV_{Ox}$  und der Definition der Grenzflächenzustandsdichte  $D_{it} = -1/q^2 \cdot dQ_{it}/d\varphi_{s0}$  erhält man mit der „bandbending-bias-relation“ die Grenzflächenzustandsdichte in Abhängigkeit ihrer energetischen Lage zu

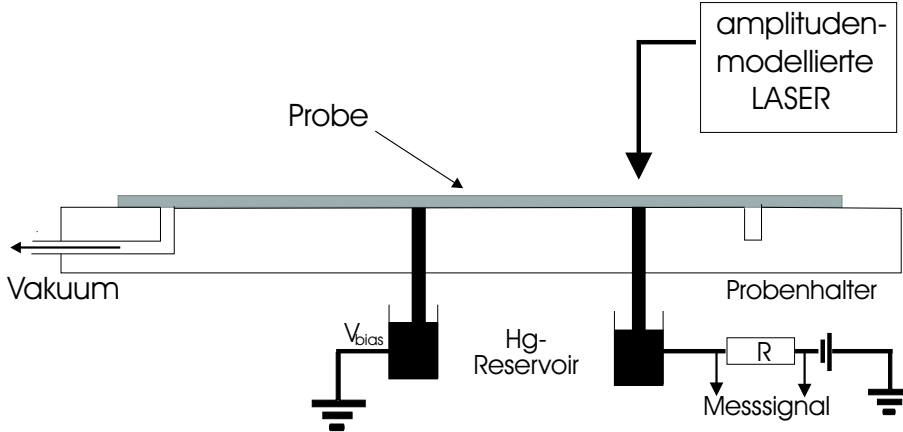
$$D_{it}(E) = \frac{C_{Ox}}{q^2} \left( \frac{dV_g}{d\varphi_{s0}} - 1 \right) + \frac{1}{q^2} \frac{dQ_{sc}}{d\varphi_{s0}}. \quad (5.14)$$

Den zweiten Term in Gl. 5.14 bestimmt man mit Hilfe der Dotierungsfunktion  $F$  analytisch, die Oxidkapazität wird gemessen. Damit lässt sich mit der dynamischen SPV-Methode durch Messung der Oberflächenbandverbiegung in Abhängigkeit der angelegten Spannung die energetische Verteilung der Grenzflächenzustände bestimmen.

### 5.1.2 Photomodulierte Kontaktstrommessung, PMCC

Die Methode wurde zur Bestimmung der Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit  $S_n^f$  eingesetzt. Sie wurde in [68] entwickelt, um ohne spezielle Kontaktpräparation die Grenzfläche von MIS-Kontakten zu charakterisieren. Neben  $S_n^f$  lässt sich mit ihr die Diffusionskonstante  $D$  der Minoritäten und deren Volumenlebensdauer  $\tau$  bestimmen. Der Messaufbau ist in Abb. 5.2 dargestellt. Der Rückkontakt der Probe ist über zwei Quecksilberkontakte, die in der Regel eine Schottky Charakteristik aufweisen, mit einer Spannungsquelle verbunden. Die Lichtanregung der Probe erfolgt gegenüber dem Messkontakt, der in Sperrrichtung gepolt ist, mit einer Laserdiode (685 nm, 800 nm), die in ihrer Intensität sinusförmig moduliert wird. Die Modulationsfrequenz  $\omega$  variiert zwischen 100 Hz und 500 kHz.

Der durch das Laserlicht erzeugte Minoritätenstrom über den Rückkontakt wird phasenempfindlich gemessen. Aus der Frequenzabhängigkeit des gemessenen Stromes bestimmt man die Diffusionskonstante  $D$ , die Lebensdauer  $\tau$  und die Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit  $S$  der Minoritäten. Man erhält den funktionalen Zusammenhang des Minoritätenstroms von der Frequenz durch Lösen der Kontinui-



**Abbildung 5.2:** Messaufbau der PMCC-Methode zur Bestimmung der Diffusionskonstanten  $D$ , der Volumenlebensdauer  $\tau$  und der Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit  $S_n^f$  der Minoritäten.

tätsgleichung für die Minoritäten (Gl. 5.1). Dieser ergibt sich aus Gl. 5.5 zu

$$j_n(W) = D_n \frac{\partial n}{\partial x} \Big|_{x=W} = \frac{\alpha \tilde{L}_D}{1 - \alpha^2 \tilde{L}_D^2} \tilde{I} \cdot \left[ -\alpha \tilde{L}_D \exp(-\alpha W) + \frac{\alpha \tilde{L}_D + \frac{S_n^f \tilde{L}_D}{D_n} - \exp(-\alpha W) \left( \sinh\left(\frac{W}{L_D}\right) + \frac{S_n^f \tilde{L}_D}{D_n} \cosh\left(\frac{W}{L_D}\right) \right)}{\cosh\left(\frac{W}{L_D}\right) + \frac{S_n^f \tilde{L}_D}{D_n} \sinh\left(\frac{W}{L_D}\right)} \right]. \quad (5.15)$$

wobei für  $\omega = 0$  die frequenzabhängige Diffusionslänge  $\tilde{L}_D$  durch die Diffusionslänge  $L_D$  gegeben ist. Der gemessene Strom wird auf den Strom bei 0 Hz normiert, wodurch eine Absolutmessung des einfallenden Photonennflusses entfällt. Unter der Bedingung, dass der inverse Absorptionskoeffizient wesentlich kleiner als die Waferdicke ist ( $\alpha W \gg 1$ ), ergibt sich für die Frequenzabhängigkeit des normierten Stroms  $j_n^N$ :

$$j_n^N = \frac{j_n(\omega)}{j_n(\omega = 0)} = \frac{\cosh(W/L_D) + S_n^f L_D / D \sinh(W/L_D)}{\cosh(W/\tilde{L}_D) + S_n^f \tilde{L}_D / D \sinh(W/\tilde{L}_D)} \quad (5.16)$$

Durch eine Anpassung der gemessenen Frequenzabhängigkeit von Phase und Amplitude des Stromes mit Gl. 5.16 lassen sich  $S_n^f$ ,  $L_D$  und  $D$  bestimmen.

### 5.1.3 I-U-Messung

Strom Spannungs-Messungen wurden bei Raumtemperatur für beleuchtete Proben unter einem Sonnensimulator, der das Sonnenspektrum für AM1.5 simuliert, gemessen. Messungen der Temperaturabhängigkeit wurden mit Hilfe eines Stickstoff-Kryostaten im Bereich zwischen 100 und 400 K durchgeführt. Die Beleuchtung erfolgte hierbei durch eine Halogenlampe.

### 5.1.4 Quantenausbeute

Die Messung der Quantenausbeute einer Solarzelle ist eine wichtige Methode zur Analyse von Stomverlustmechanismen innerhalb der Zelle. Dabei werden Solarzellen mit monochromatischem Licht beleuchtet und der dadurch entstehende Kurzschlussstrom gemessen. Erfolgt die Anregung im kurzwelligen Bereich (hier etwa bis 600 nm), so wird ein Großteil der Ladungsträger im Emitter der Solarzelle erzeugt und man erhält Informationen über die Verlustmechanismen im Emitter und am Frontkontakt. Eine ausführliche Analyse bei kurzwelliger Anregung ist in Kapitel 4.1.2 aufgeführt. Für Lichtanregung im langwelligen Bereich werden hauptsächlich im kristallinen Absorber Ladungsträger erzeugt, und man erhält Information über die Rekombination im kristallinen Silizium und am Rückkontakt.

Die Beleuchtung der Probe mit monochromatischem Licht im Kleinsignalfall erfolgt im Wellenlängenbereich  $\lambda = 250\text{-}1200$  nm. Gemessen wird der durch den Photonenfluss  $\tilde{I}$  erzeugte Kurzschlussstrom  $J_{sc}(\lambda)$  der Zelle. Die externe Quantenausbeute ( $Q_{ext}$ ) ist durch

$$Q_{ext}(\lambda) = \frac{J_{sc}(\lambda)}{q\tilde{I}(\lambda)} \quad (5.17)$$

definiert. Korrigiert man  $Q_{ext}$  mit den externen Verlusten durch die Reflexion  $R$ , so ergibt sich die interne Quantenausbeute  $Q_{int}$  zu:

$$Q_{int}(\lambda) = \frac{Q_{ext}(\lambda)}{1 - R(\lambda)} \quad (5.18)$$

Zur Auswertung wird wieder die Lösung der Diffusionsgleichung (Gl. 5.1) herangezogen. Da hier die Beleuchtung und die Sammlung der Ladungsträger über den p/n-Übergang erfolgt, hat für  $\lambda > 800$  nm die Rekombinationsgeschwindigkeit am Rückkontakt Einfluss auf das Messsignal. Um die Lösung der Diffusionsgleichung (Gl. 5.1) an die Messgegebenheiten anzupassen müssen folgende Symmetrietransformationen durchgeführt werden: (i)  $\alpha \Rightarrow -\alpha$ , (ii)  $I \Rightarrow I \exp(-\alpha W)$  und (iii)  $x \Rightarrow W - x$ . Man erhält damit die Lösung für die Absorption von Licht im Absorber der Solarzelle, deren Rückseite durch die Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit  $S^b$  gegeben ist. Für starke Absorption ( $\alpha W \gg 1$ ) ergibt sich der Diffusionsstrom zu:

$$\begin{aligned} J_{sc} &= -D_n \frac{dn}{dx} \Big|_{x=0} \\ J_{sc} &= -\frac{\alpha L_D}{\alpha^2 L_D^2 - 1} \tilde{I} \left( \alpha L_D - \frac{L_D}{L_{eff}} \right) \end{aligned} \quad (5.19)$$

$$\text{mit} \quad L_{eff} = L_D \frac{S^b L_D \sinh(W'/L_D) + D_n \cosh(W'/L_D)}{S^b L_D \cosh(W'/L_D) + D_n \sinh(W'/L_D)} \quad (5.20)$$

Bei  $x=0$  beginnt das Volumen des Absorbers und  $W'$  ist die um die Raumladungszone verringerte Dicke des Absorbers. Ist die Diffusionslänge kleiner als die Waferdicke  $W$ , so erhält man für  $Q_{int}$

$$Q_{int}^{-1} = 1 + 1/(\alpha L_D) \quad (5.21)$$

woraus sich dann leicht die Diffusionslänge des Wafers bestimmen lässt. Ist  $L_D \gg W$ , kann die Messung in der gleichen Weise ausgewertet werden, jedoch wird nicht  $L_D$  sondern  $L_{eff}$  bestimmt [48]:

$$Q_{int}^{-1} = 1 + 1/(\alpha L_{eff}) \quad (5.22)$$

### 5.1.5 Photolumineszenz

Die Methode der gepulsten Photolumineszenz-Messung (PL) dient in dieser Arbeit der Bestimmung der Eigenschaften der Hetero-Grenzfläche und wird in [69] detailliert beschrieben. Die Probe wird durch Anregung mit einem Laserpuls von ca. 10

ns Pulslänge bei einer Wellenlänge von 500 nm bzw. 800 nm im kristallinem Silizium angeregt. Gemessen wird das über die Zeit integrierte Photolumineszenzsignal der Probe im Wellenlängenbereich von 800 bis 1700 nm.

$$I_{PL}(\lambda) = \int_{t=0}^{\infty} I_{PL}(t) dt \quad (5.23)$$

Für Silizium hat das Spektrum sein Maximum bei etwa 1130 nm, was auf Band-Band-Rekombination zurückzuführen ist.

Bei dieser Methode wird bei Hochinjektion gemessen. Die Überschussladungsträgerkonzentration liegt nach dem Anregungspuls bei ca.  $10^{17}$  bis  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  und ist damit deutlich über der Dotierungskonzentration der verwendeten Wafer von etwa  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Die Ladungsträger rekombinieren strahlend und strahlungslos über Augerrekombination, Volumendefekte und Grenzflächendefekte. Die strahlende Rekombination (Photolumineszenz) hängt insbesondere bei einem indirekten Halbleiter wie Silizium stark von den Raten der nichtstrahlenden Übergänge ab. Die Intensität des PL-Signals ist bei gleichem Wafermaterial ein direktes Maß für die strahlungslose Rekombination über Zustände an der Waferoberfläche: Eine hohe Zustandsdichte an der Waferoberfläche führt zu einer niedrigen PL-Intensität.

### 5.1.6 Lebensdauer

Die effektive Lebensdauer der Minoritätsladungsträger  $\tau_{eff}$  wird gemessen, um eine Aussage über die Rekombinationsverluste der a-Si:H/c-Si Grenzfläche zu erhalten. Mit Hilfe der Reflexion einer Mikrowellenstrahlung (10 GHz) wird der zeitliche Verlauf der durch einen Laser-Puls (Leistung: 50-500 mW, Impulsdauer: 0.5-20  $\mu\text{s}$ ,  $\lambda$ : 940 nm) generierten Überschussladungsträgerkonzentration detektiert. Der exponentielle Abfall der Ladungsträgerkonzentration wird durch die effektive Lebenszeit  $\tau_{eff}$  charakterisiert. Sie hängt von der Oberflächen- ( $\tau_s$ ) und Volumenlebensdauer ( $\tau_b$ ) gemäß

$$\frac{1}{\tau_{eff}} = \frac{1}{\tau_s} + \frac{1}{\tau_b} \quad (5.24)$$

ab. Bei gleicher Volumenlebensdauer ist  $\tau_{eff}$  ein qualitatives Maß für die Passivierung der Si-Oberfläche.

## 5.2 Präparation der a-Si:H(n)/c-Si(p) Heterokontakt Solarzelle

Aus dem Kapitel 4 stellt sich die Aufgabe für die Herstellung einer effizienten a-Si:H(n)/c-Si(p)-Heterosolarzelle mit einer dünnen amorphen Siliziumschicht auf kristallinem Material. Das folgende Kapitel beschreibt die einzelnen technologischen Abläufe zur Herstellung der a-Si:H/c-Si-Heterosolarzelle.

Die Solarzellen wurden am Hahn-Meitner-Institut (HMI), sowie in Zusammenarbeit mit der Fernuniversität Hagen (FUH) präpariert. Im HMI wurden die amorphen Schichten in einer Einkammer-PECVD-Anlage abgeschieden. Die FUH verfügt über eine Dreikammer-PECVD-Anlage zur Abscheidung unterschiedlich dotierter amorpher Siliziumschichten. Die Prozessschritte zur Präparation der Solarzellen sind in einem Verbundprojekt zusammengeführt worden und daher in den beiden Instituten weitgehend identisch. Im folgenden werden die Schritte für die Prozessierung einer Solarzelle am HMI beschrieben. Dort, wo die Prozesse wesentlich voneinander abweichen, wird mit (HMI) bzw. (FUH) darauf hingewiesen.

### 5.2.1 Kristalliner Silizium Wafer

Als Ausgangsmaterial zur Präparation der a-Si:H/c-Si-Solarzellen wurde Czochralski-Silizium (Cz-Si) oder zonengezogenes Silizium (Fz-Si) verwendet, welches sich im wesentlichen durch eine größere Volumenlebensdauer im Vergleich zu Cz-Si unterscheidet. Die Diffusionslänge der Wafer wurde mit Hilfe der statischen SPV-Methode bestimmt (siehe Kapitel 5.1.1). Sie liegt bei den verwendeten Cz-Si-Wafern zwischen 50-100  $\mu\text{m}$  und bei den Fz-Si Wafern bei 200-600  $\mu\text{m}$ . Die Orientierung der Wafer ist (111) oder (100). Sie sind mit Bor dotiert und haben einen spezifischen Widerstand von 0.5-2  $\Omega\text{cm}$ . Die Dicke der Wafer liegt zwischen 300-400  $\mu\text{m}$ . Um die Rekombination der Ladungsträger an der Rückseite zu verringern, wurde ein Teil der Proben mit einem Back Surface Field (BSF) präpariert. Dabei wurden die

Rückseiten der Wafer mit Bor dotierten Quellscheiben in Kontakt gebracht und für 20 min bei 1000 °C getempert. Die Rückseitenkonzentration der Dotierung liegt dadurch bei ca.  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , ist vom gleichen Ladungstyp wie der Wafer und hat eine Tiefe von ca.  $1 \mu\text{m}$ .

Die Wafer wurden dann mit den aus der Wafertechnologie bekannten Methoden [70] gereinigt: Als erstes erfolgt die Piranha-Reinigung, die zur Entfernung organischer Stoffe auf der Waferoberfläche führt:

- 20 min Ätzen bei 80°C in einer Lösung aus  $H_2SO_4 + H_2O_2$  (1:1)
- Spülen mit deionisiertem Wasser(DI- $H_2O$ )
- Oxid entfernen mit 2%  $HF$  (30s)
- Spülen mit DI- $H_2O$
- Trockenblasen mit  $N_2$

Danach wurden mit der RCA I-Reinigung, die Metalle, wie z.B.  $Cu$  und  $Ni$  als Komplexe entfernt.

- 15 min Ätzen in einer Lösung aus  $H_2O + H_2O_2(31\%) + NH_4OH(100\%);5:1:1$
- Oxid entfernen mit 2%  $HF$  (30s)
- Spülen in DI- $H_2O$

In einem dritten Reinigungsschritt (RCA II) werden vorwiegend Edelmetalle, wie etwa  $Au$  aber auch  $Fe$ , von der Oberfläche beseitigt.

- Oxid entfernen mit  $NH_4F$
- Spülen in DI- $H_2O$
- Trockenblasen mit  $N_2$

Die Waferbehandlung vor der Deposition des amorphen Siliziums hat großen Einfluss auf die Grenzflächeneigenschaften. Daher wurde der Einfluss unterschiedlicher Wafervorbehandlungen auf die Solarzellencharakteristik untersucht. Im folgenden werden verschiedene Wafervorbehandlungen beschrieben. Zur Erzeugung extrem glatter und defektarmer Waferoberflächen wurden die Proben nach der RCA II Reinigung mehrmals durch einen Oxidations- und Ätzyklus geführt [71]:

- Entfernen des Oxids mit HF
- 10 min Piranha-Reinigung
- Entfernen des Oxids mit  $NH_4F$  bzw.  $HF$ .
- Wachsen eines Tunneloxids in  $H_2O$  bei  $80^\circ C$  (30min)

Bricht man die Prozedur nach Entfernen des Oxids mittels  $NH_4F$  bzw.  $HF$  ab, so erhält man eine H-terminierte Oberfläche, bei der die Zustandsdichte unter  $10^{11} cm^{-2} eV^{-1}$  im Bereich der Bandmitte liegen kann. Diese Art der Wafervorbehandlung wird in dieser Arbeit, zur Unterscheidung von einem einfachen HF-Dip, mit H-Terminierung bezeichnet. Die H-terminierte (111)-Oberfläche ist etwa 30 min an Luft stabil. Die H-Terminierung von (100) ist weit weniger stabil. Die Dichte der Grenzflächenzustände beginnt an Luft bereits nach wenigen Minuten anzusteigen [72, 73]. Beendet man die Prozedur nach dem Wachsen des Tunneloxids, so ist die Oberfläche mit einem dünnen Oxid belegt, dessen Zustandsdichte ebenfalls unter  $10^{11} cm^{-2} eV^{-1}$  in der Bandmitte liegen kann. Für die Präparation der meisten Zellen wurde ein einfacher HF-Dip als Vorbehandlung unmittelbar vor der Deposition des a-Si:H(n) benutzt und es wurde auf die aufwändigere H-Terminierung durch Wachsen und Rückätzen des Oxides verzichtet. Bei den Proben, für die die Wafervorbehandlung von dem HF-Dip abweicht, wird dies explizit angegeben. Es sei darauf hingewiesen, dass die Wafervorbehandlung unmittelbar vor der Deposition des amorphen Siliziums durchgeführt werden muss, da sich sonst ein natürliches Oxid auf der Waferoberfläche bildet. Dieses hat eine höhere Zustandsdichte als die hier vorgestellten Oxide und führt zu einer niedrigen Leerlaufspannung.

### 5.2.2 Abscheidung von amorphen Silizium

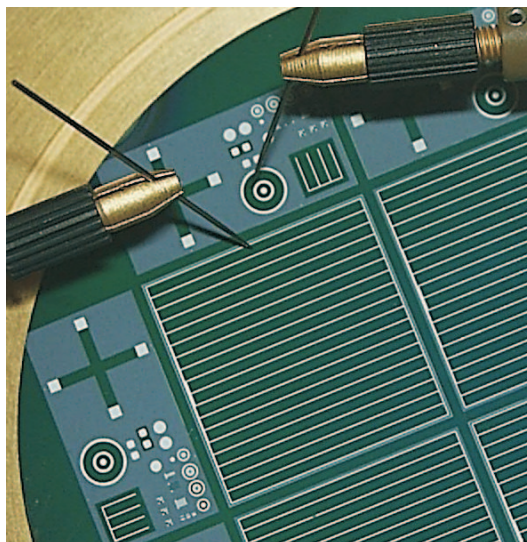
Nach der Wafervorbehandlung erfolgt die Abscheidung des amorphen Siliziums in einer PECVD-Anlage. Die Prozess-Parameter für die Abscheidung des amorphen Siliziums wurden durch einen Optimierungsprozess ermittelt. In Anhang A sind die für die Heterostruktur-Solarzelle wichtigen Eigenschaften des a-Si:H(n) beschrieben. Die Standardbedingungen zur Abscheidung n-dotierter a-Si Schichten sind (HMI):

- Substrattemperatur  $T_S$ : 210°C
- Basisdruck  $p_B$ :  $< 10^{-6}$  mbar
- Kammerdruck  $p_K$ : ca. 0.5 mbar
- RF-Leistung: 15W (45 mW/cm<sup>2</sup>)
- RF-Frequenz: 13.56 MHz
- SiH<sub>4</sub>-Fluss: 5 sccm
- PH<sub>3</sub>(0.5% in H<sub>2</sub>)-Fluss: 10sccm

Das Verhältniss von den PH<sub>3</sub>- zu SiH<sub>4</sub>-Flüssen entspricht einer Konzentration von 10000 ppm Phosphin in Silan. Die Schichtdicken für den amorphen Emitter wurden bei den präparierten Solarzellen zwischen 5 und 30 nm variiert.

### 5.2.3 Kontaktierung

Nach der Deposition des amorphen Siliziums wurde auf dem a-Si:H/c-Si-Schichtstapel ein transparentes leitendes Oxid (TCO) abgeschieden. Dieses hat einerseits die Aufgabe, die Querleitfähigkeit des amorphen Emitters zu erhöhen und dient andererseits als Antireflexschicht für die Solarzellen. Die für diese Forderung optimierte Schichtdicke des TCO's liegt bei 80 nm. Als TCO wurde Aluminium-dotiertes Zinkoxid (HMI) sowie Indium Zinn Oxid (FUH) verwendet. Die Leitfähigkeit und



**Abbildung 5.3:** Foto einer  $2 \times 2 \text{ cm}^2$   $a\text{-Si:H}(n)/c\text{-Si}(p)$  Solarzelle.

Transparenz der am HMI präparierten  $\text{ZnO:Al}$  Schichten wurden für diese Schichtdicke optimiert. Indium-Zinn-Oxid (ITO) wurde von einem keramischen Target bei Raumtemperatur in einer Ar-Atmosphäre gesputtert.  $\text{ZnO:Al}$  wurde bei Raumtemperatur sowie bei  $160^\circ\text{C}$  von einem metallischen aluminiumhaltigen Zinktarget unter Zugabe von Sauerstoff ebenfalls mit Argonionen gesputtert. Das ITO hatte einen spezifischen Widerstand von  $3 - 6 \times 10^{-4} \Omega\text{cm}$  während bei dem  $\text{ZnO:Al}$  dieser bei ungeheizter Abscheidung einen Wert von  $1 \times 10^{-3} \Omega\text{cm}$  und bei einer Substrattemperatur von  $160^\circ\text{C}$  einen Wert von  $2 \times 10^{-4} \Omega\text{cm}$  aufwies.

Der metallische Frontkontakt wurde über einen Lift-off Prozess präpariert. Dabei wird das Kontaktmetall auf die mit Photolack beschichtete und strukturierte Probe aufgedampft. Durch Ablösen des Lacks bleibt dann das Gitter auf dem TCO stehen. Als Kontaktmetall wurde  $\text{Al(HMI)}$  ( $1 \mu\text{m}$ ) bzw.  $\text{Cr/Ag (FUH)}$  aufgedampft. Bei dem  $\text{Cr/Ag}$ -Kontakt dient  $\text{Cr}$  ( $30 \text{ nm}$ ) als Haftvermittler zwischen ITO und  $\text{Ag}$  ( $3 \mu\text{m}$ ).  $\text{Ag}$  führt auf Grund der höheren Leitfähigkeit im Vergleich zu  $\text{Al}$  zu einem geringeren Serienwiderstand. Die metallische Kontaktfläche zum TCO ist deshalb bei den Zellen mit  $\text{Cr/Ag}$  Kontakten mit etwa 5% der Emitterfläche halb so groß wie bei den Solarzellen mit  $\text{Al}$  Kontakten (10%). Nach der frontseitigen Kontaktierung wurde auf der Rückseite eine  $500 \text{ nm}$  dicke  $\text{Al}$ -Schicht abgeschieden. Zur

elektrischen Entkopplung der einzelnen Solarzellen auf dem Wafer wurden die Solarzellen auf der Vorderseite über einen zweiten photolithografischen Prozess durch eine Mesastrukturierung vereinzelt. Die fertigen Solarzellen haben eine Emitterfläche von  $4 \times 4 \text{ mm}^2$ ,  $1 \times 1 \text{ cm}^2$  oder  $2 \times 2 \text{ cm}^2$ . In Abb. 5.3 ist eine fertige Al/TCO/a-Si:H(n)/c-Si(p) Solarzelle abgebildet. Die Solarzelle mit dem bisher höchsten Wirkungsgrad wurde zusammen mit der Fernuniversität Hagen prozessiert und erreicht auf  $1 \text{ cm}^2$  einen Wirkungsgrad von 16.2%.

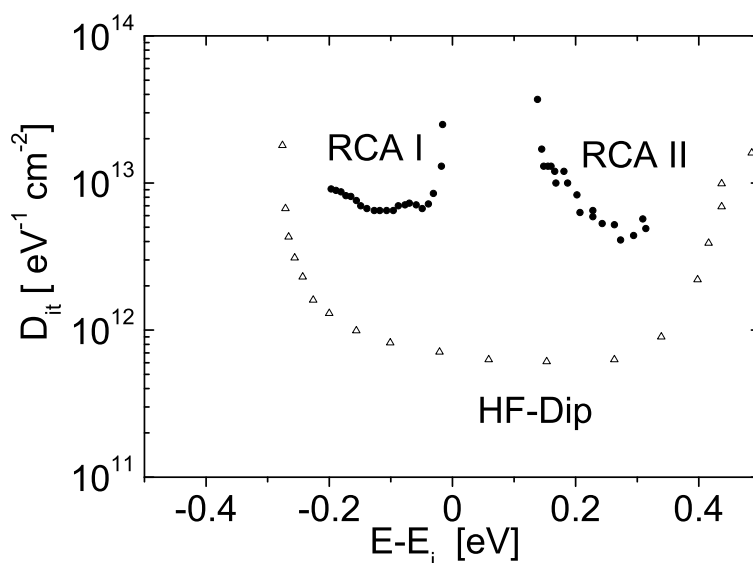
# Kapitel 6

## Analyse der a-Si:H(n)/c-Si(p)

### Solarzellen

Im Kapitel 4 wurde das Verhalten von Heterosolarzellen aus amorphem und kristallinem Silizium modelliert und numerisch simuliert. Die daraus resultierenden Erkenntnisse sollen im folgendem Kapitel an a-Si:H(n)/c-Si(p)-Heterosolarzellen experimentell überprüft werden.

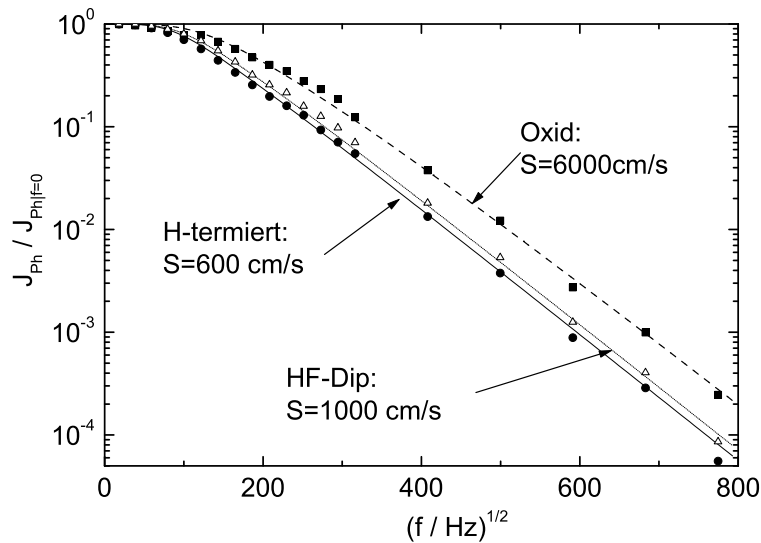
Ein wichtiges Ergebnis ist, dass sich die Abhängigkeit der Kennlinien von der Vorbehandlung des Si-Wafers, der Temperatur und der Intensität der Beleuchtung, sich mit dem in der Simulation untersuchten Rekombinationsmodell an der Grenzfläche erklären lassen. Durch Variation der Emitterdicke und durch Kombination von undotierten mit dotierten a-Si:H Schichten wurde der Einfluss des Emitters auf die Solarzelleneigenschaften untersucht. Die Analyse des TCO/a-Si:H-Kontaktsystems zeigt das Vorhandensein eines nichtohmschen Frontkontaktes. Die bisher erreichten Wirkungsgrade von über 16 % sind unseres Wissens nach die höchsten Wirkungsgrade, die für diesen Typ von Solarzelle erreicht wurden. Die Analyse einer solchen Zelle zeigt, dass der Einfluss von Grenzflächenzuständen auf die I-U-Charakteristik für diese Solarzelle zu vernachlässigen ist.



**Abbildung 6.1:** Oberflächenzustandsdichte unterschiedlich vorbehandelter Wafer. Wafermaterial ist:  $Fz, (111), \rho = 0.5 - 2 \Omega\text{cm}$ . Die beiden RCA-Oxide haben eine deutlich höhere Grenzflächenzustandsdichte als die HF vorbehandelte Oberfläche.

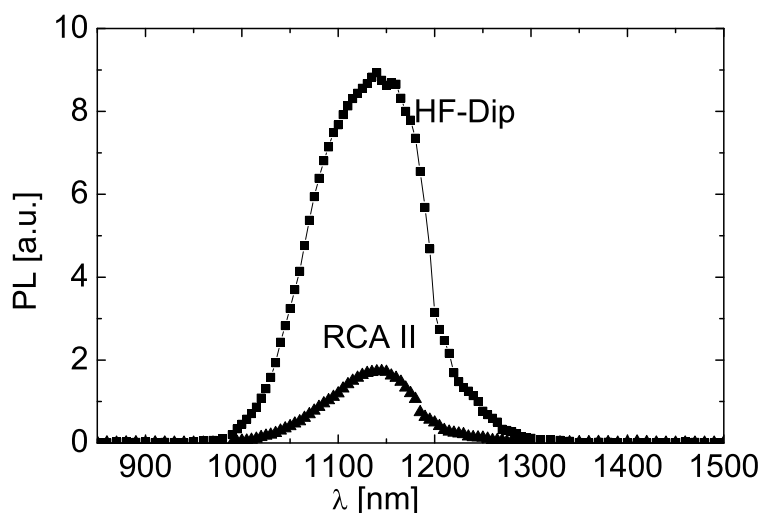
## 6.1 Einfluss der Grenzfläche auf die Eigenschaften des Heterokontaktes

Die Simulation zeigte, dass Zustandsdichten an der a-Si:H/c-Si-Grenzfläche größer  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$  die Zelleigenschaften negativ beeinflussen (siehe Kap. 4.1.4 u. Abb. 4.22). Durch eine erhöhte Grenzflächenzustandsdichte verringert sich der Füllfaktor und  $V_{oc}$ . Neben der Zustandsdichte im amorphen Emitter bestimmt vor allem die Vorbehandlung der Oberfläche des kristallinen Si-Absorbers die Rekombinationseigenschaften der a-Si:H/c-Si-Grenzfläche. Die Ergebnisse der unterschiedlichen Behandlungen der Si-Oberfläche vor der a-Si:H-Deposition sollen im Folgenden diskutiert werden. Wie in Kapitel 5.2.1 beschrieben, erhielt die Silizium-Oberfläche eine H-Terminierung, eine HF-Vorbehandlung, ein nasschemisches Tunneloxid oder ein RCA II-Oxid. Bei den hier verwendeten Wafern lagen die minimalen Zustandsdichten bei  $7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}\text{eV}^{-1}$  für eine HF vorbehandelte Oberfläche und bei  $5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}\text{eV}^{-1}$  für die RCA-Oxide (Abb. 6.1). Diese Werte liegen im Bereich, der in der



**Abbildung 6.2:** Photomodulierte Kontaktstrommessungen an unterschiedlich vorbehandelten Wafern. Die Proben mit der H-Terminierung und der HF-Vorbehandlung zeigen eine deutlich geringere Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit als die Probe mit dem nasschemischen Tunneloxid.

Simulation erfasst wurde (Abb. 4.9). Um Aussagen über Defektkonzentrationen an der a-Si:H/c-Si Grenzfläche machen zu können und um zu überprüfen, ob diese mit denen der Wafervorbehandlung korrelieren, wurden an den Proben mit unterschiedlicher Wafervorbehandlung nach der Deposition des a-Si:H PMCC-Messungen vorgenommen (Abb. 6.2). Zur Messung muss an der Waferrückseite ein Schottky-Kontakt realisiert werden (siehe Kap. 5.1.2). Dazu wurde der BSF-Kontakt der Solarzellen durch Ätzen der Rückseite entfernt. Die Auswertung der PMCC-Messung ergibt eine Grenzflächenrekombinationsgeschwindigkeit von  $600 \text{ cm/s}$  für die H-terminierte, von  $1000 \text{ cm/s}$  für die HF vorbehandelte Probe und  $6000 \text{ cm/s}$  für die Probe mit dem nasschemischen Tunneloxid. Eine andere Methode zur Charakterisierung der a-Si:H/c-Si Grenzfläche ist die Messung der Photolumineszenz wie sie in Kap. 5.1.5. beschrieben wurde. In Abb. 6.3 sind die Photolumineszenzspektren im Bereich zwischen  $900$  und  $1500 \text{ nm}$  von zwei Solarzellen dargestellt, die sich lediglich in der Wafervorbehandlung unterscheiden. Das PL-Signal des kristallinen Siliziums ist bei der Probe mit dem RCA II-Oxid deutlich niedriger als bei der Probe mit dem HF-Dip. Auch diese Messung zeigt, dass ein Oxid an der Grenzfläche die Zustandsdichte

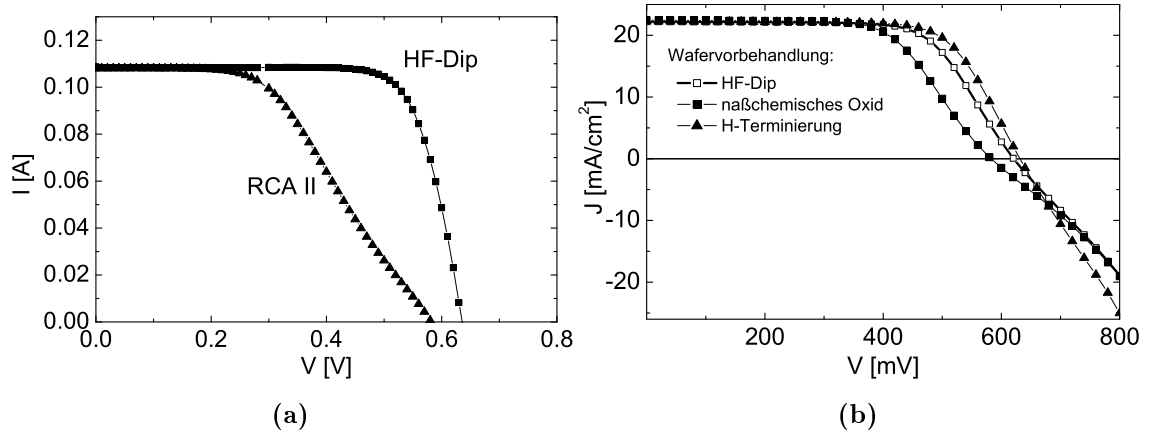


**Abbildung 6.3:** Photolumineszenz an Solarzellen mit unterschiedlicher Wafervorbehandlung. Die Probe mit dem RCA-Oxid zeigt ein etwa fünf mal kleineres Photolumineszenz-Signal.

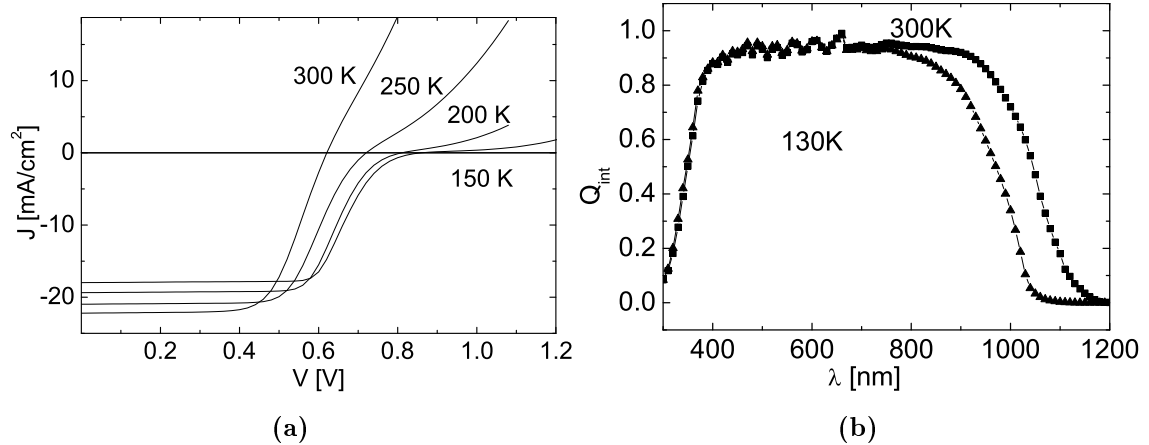
im Vergleich zu einer HF-behandelten Oberfläche deutlich erhöht.

In Abb. 6.4(a) sind die Hellkennlinien für eine Solarzelle mit einem RCA II-Oxid und einem HF-Dip dargestellt. Die Probe mit der RCA II-Oxid zeigt einen deutlich geringeren Füllfaktor als die Probe mit dem HF-Dip als Wafervorbehandlung. Zellen mit geringem Füllfaktor zeigen die aus den Ergebnissen der Simulation zu erwartende S-Form der Hellkennlinie. Des Weiteren ist  $V_{oc}$  der Probe mit dem RCA II-Oxid um ca. 20 mV geringer als die der Probe mit der HF vorbehandelten Si-Oberfläche.  $J_{sc}$  ist dagegen von der Oxidschicht nicht beeinflusst. Abb. 6.4(b) zeigt ein ähnliches Verhalten für Solarzellen mit einer H-terminierten Oberfläche, einer HF vorbehandelten Oberfläche und mit einem nasschemischen Tunneloxid. Die Solarzelle mit der H-terminierten Oberfläche zeigt die höchste Leerlaufspannung und den größten Füllfaktor. Die Solarzelle mit dem HF-behandelten Wafer hat ähnliche Eigenschaften wie die Solarzelle mit der H-Terminierung. Die Probe mit dem nasschemischen Tunneloxid zeigt wie die Probe mit dem RCA II Oxid einen deutlich kleineren Füllfaktor als die Proben ohne Oxid. Der Verlust im Füllfaktor und die Ausbildung der S-Form ist aber nicht so deutlich wie bei der Probe mit dem RCA II Oxid.

Bei tiefen Temperaturen ist die S-Form stärker ausgeprägt. In Abb. 6.5(a) sind die



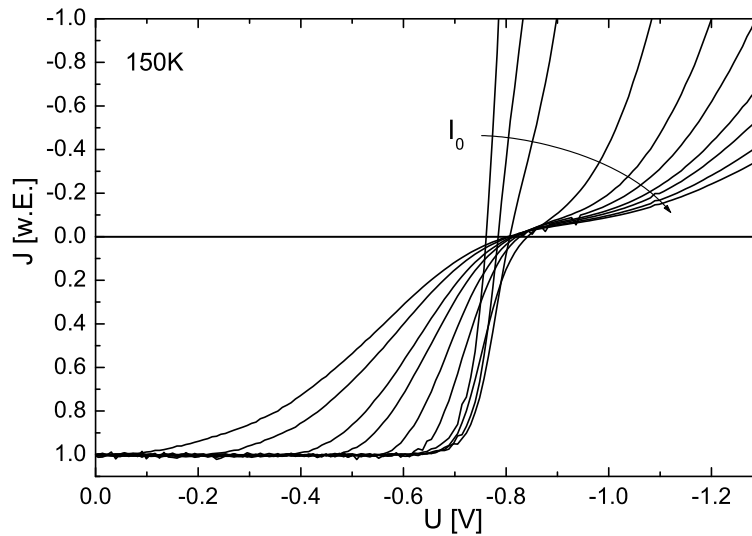
**Abbildung 6.4:** *Hellkennlinien von  $a\text{-Si:H}/c\text{-Si}(p)$  Solarzellen unterschiedlichen Wafervorbehandlung: (a) mit RCA II- und HF-Wafervorbehandlungen. (b) nasschemische Oxid, HF-Dip und H-Terminierung als Wafervorbehandlung.*



**Abbildung 6.5:** *(a)  $I$ - $U$  Kennlinien einer beleuchteten  $a\text{-Si:H}/c\text{-Si}$  Probe mit einer HF-Vorbehandlung bei verschiedenen Temperaturen. (b) Interne Quantenausbeute bei 130 und 300 K für eine Probe mit HF-Wafervorbehandlung. Die effektive Diffusionslänge ist stark temperaturabhängig.*

Hellkennlinien einer HF-vorbehandelten Probe für Temperaturen zwischen 150 und 300 K dargestellt. Auch diese Probe zeigt bei tieferen Temperaturen eine S-förmige Kennlinie. Ab welcher Temperatur die S-Form auftritt, ist sehr unterschiedlich und hängt nicht nur von der Wafervorbehandlung ab, sondern auch von den Eigenschaften des verwendeten TCO's und des a-Si:H(n)-Emitters. So tritt bei der besten mit 16.2% zertifizierten Solarzelle die S-förmige Kennlinie erst bei 150 K auf. Wie in Kap. 4.1.4 gezeigt wurde, lässt sich die S-Form durch die spannungsabhängige Rekombination an der Grenzfläche erklären. Solange die Vorwärtsspannung kleiner als  $V_{oc}$  ist, wird der Photostrom durch den zusätzlichen Rekombinationsstrom an der Grenzfläche verringert, so dass der Füllfaktor abnimmt. Für  $V > V_{oc}$  hat der Rekombinationsstrom das gleiche Vorzeichen wie der Gesamtstrom. Dieser steigt dadurch stärker an, was zur Ausprägung der S-Form führt. Neben den elektronischen Eigenschaften der Grenzfläche hat auch der amorphe Emitter und der Frontkontakt Einfluss auf die S-Form, wie in Kap. 4.1.3 gezeigt wurde. Das a-Si:H verarmt ab einer durch die Dotierung des a-Si:H und die Austrittsarbeit des Frontkontaktes bestimmten Spannung, und es bildet sich eine Art MIS-Struktur aus, die durch den Frontkontakt (M) das verarmte amorphe Silizium (I) und das kristalline Silizium (S) gegeben ist. Für kleinere Spannungen fällt die Spannung über dem n/p-Heteroübergang sowie evtl. über dem Frontkontakt/a-Si:H-Übergang ab, der in Sperrrichtung geschaltet ist. Für größere Spannungen verarmt das a-Si:H und das Bauelement wirkt als eine Art MIS-Struktur, die in Flussrichtung geschaltet ist. Dadurch ergibt sich ein Doppeldiodenverhalten.

Der Abb. 6.5(a) ist neben der Ausbildung der S-Form eine Verringerung von  $J_{sc}$  mit abnehmender Temperatur zu entnehmen. Dieses Verhalten lässt sich aus Messungen von  $Q_{int}$  für zwei Temperaturwerte erklären (Abb. 6.5(b)). Für Wellenlängen größer als 700 nm ist  $Q_{int}$  bei 130 K deutlich geringer als bei 300 K. Für Wellenlängen kleiner 700 nm ist sie temperaturunabhängig, der Transport der Ladungsträger wird also nicht durch eine Barriere am Heteroübergang behindert. Demnach ist die Abnahme von  $J_{sc}$  mit abnehmender Temperatur durch die geringere Quantenausbeute für  $\lambda > 900$  nm zu erklären.



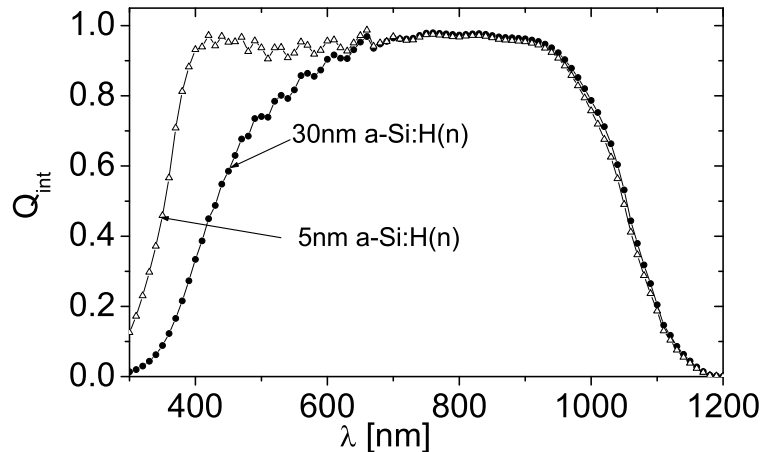
**Abbildung 6.6:** Abhängigkeit der I-U Kennlinie bei 150 K von der Intensität  $I_0$  der Lichtquelle. Die Intensität reicht von  $10^{14} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$  bis  $10^{18} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$  und wurde durch Graufilter variiert.  $J_{sc}$  ist für alle Intensitäten auf eins normiert.

Mit der Annahme von Grenzflächendefekten lässt sich auch die Abhängigkeit der I-U-Charakteristik von der Beleuchtungsintensität erklären. Mit kleiner werdender Beleuchtungsintensität verliert sich die S-Form der Kennlinie (Abb. 6.6). Dies lässt sich ähnlich wie die Temperaturabhängigkeit (Kap. 4.1.4) der S-Form erklären. Bei geringerer Lichtintensität und damit kleinerer  $V_{oc}$  sind bei  $V = V_{oc}$  weniger Löcher an der Grenzfläche vorhanden, wodurch die Rekombination an dieser reduziert ist. Zudem tragen durch die geringere Aufspaltung der Quasiferminiveaus auch weniger Defektzustände zur Rekombination bei. Diese Abhängigkeit ist ein weiterer Hinweis darauf, dass die S-Form der Hellkennlinie durch die Defekte an der Grenzfläche verursacht wird.

Die Korrelation der Photolumineszenz-, der PMCC-Messung und der I-U-Messung mit der Wafervorbehandlung lässt erkennen, dass die Wafervorbehandlung entscheidenden Einfluss auf die Defektdichte des Heteroübergangs hat. Der Vergleich mit der Simulation zeigt, dass die I-U Kennlinien, deren Temperaturabhängigkeit sowie die Abhängigkeit von der Beleuchtungsintensität für verschiedene Wafervorbehandlungen durch den Einfluss der Defekte an der Grenzfläche beschrieben werden kön-

nen. Die Wafervorbehandlung, die zu der geringsten Defektkonzentration an der Grenzfläche führt, ist eine möglichst vollständige Absättigung der Dangling Bond Zustände mit Wasserstoff. Dies kann etwas aufwändiger mit Hilfe der in Kap. 5.2.1 beschriebenen H-Terminierung erzielt werden oder, mit einem geringfügig schlechterem Ergebnis, durch eine einfachere HF-Vorbehandlung. Wegen der einfacheren Präparation wurde bei den meisten Proben der HF-Dip als Vorbehandlung verwendet.

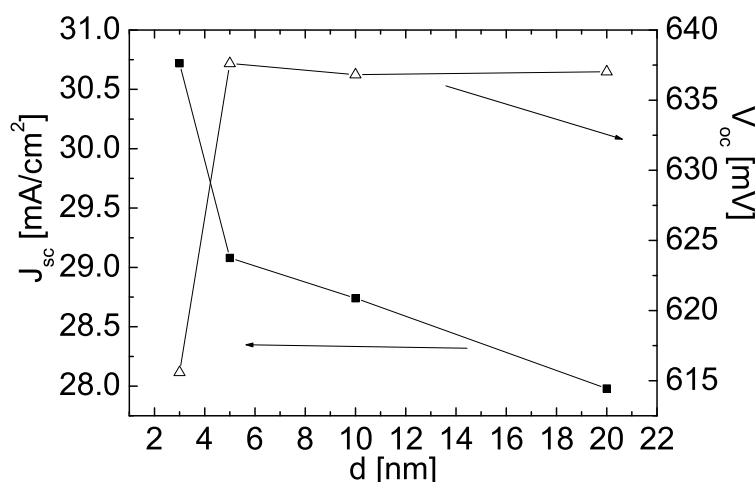
Auch in anderen Arbeitsgruppen wurde der Einfluss der Grenzflächenzustandsdichte auf die Eigenschaft der a-Si:H/c-Si-Solarzelle untersucht. In [50] wurde als Wafervorbehandlung die Siliziumoberfläche vor der a-Si:H-Deposition einem Wasserstoffplasma in der PECVD-Anlage ausgesetzt, was zu einer Absättigung der Silizium Dangling Bonds führen sollte. Durch das Plasma wurden jedoch in der Waferoberfläche Defekte erzeugt, die zu kleinen Leerlaufspannungen führten. Auch bei einer Wasserstoff-Vorbehandlung mit Hilfe einer Hot-wire-Deposition wurde der Sperr-sättigungsstrom für a-SiC:H(p)/c-Si(n)-Strukturen erhöht und damit  $V_{oc}$  [51] erniedrigt. Für die Hot-wire Wasserstoff-Vorbehandlung wurde auch bei a-Si:H(n)/c-Si(p)-Strukturen eine Reduktion der offenen Klemmenspannung beobachtet [74]. Für die Präparation von SIPOS/c-Si-Heterosolarzellen hat sich eine dünne Oxidschicht zur Passivierung von Defekten an der Grenzfläche als unerlässlich für die Prozessierung der Solarzelle erwiesen [75]. Es zeigt sich demnach allgemein, dass die Wafervorbehandlung bei der Präparation von Heterosolarzellen mit kristallinem Silizium als Absorber eine wichtige Rolle spielt. Bei der Herstellung der a-Si:H(n)/c-Si(p)-Heterosolarzellen werden die besten Ergebnisse erzielt, wenn die Si-Absorberoberfläche vor der Deposition des a-Si:H so weit wie möglich mit Wasserstoff abgesättigt wird, ohne dass dabei andere Defekte erzeugt werden.



**Abbildung 6.7:** Interne Quantenausbeute für eine a-Si:H/c-Si Heterosolarzelle mit einem 30 nm dicken und einem 5 nm dicken a-Si:H Emitter.

## 6.2 Modifikation des amorphen Silizium-Emitters

Im Folgendem soll der Einfluss der Schichtdicke des a-Si:H-Emitters und der Einfluss einer undotierten a-Si:H-Pufferschicht auf die Solarzelle diskutiert werden. Abb. 6.7 zeigt  $Q_{int}$  für a-Si:H/c-Si-Solarzellen mit zwei verschieden dicken amorphen Emittern. Der Unterschied der beiden Zellen besteht darin, dass in dem dünneren Emitter weniger Licht absorbiert wird. Da im a-Si:H die erzeugten Ladungsträger zu einem großen Teil rekombinieren, ist  $Q_{int}$  für den dicken a-Si:H-Emitter im Wellenlängenbereich bis 600 nm deutlich reduziert. Eine Analyse von  $Q_{int}$  in dem Wellenlängenbereich von 400 bis 600 nm, wie sie in Kap. 4.1.2 vorgestellt wurde (Gl. 4.10), ergibt eine Wahrscheinlichkeit für die Rekombination eines im a-Si:H generierten Elektron-Loch-Paares ( $P_a$ ) von 81%. In der dünnen Schicht ist die Rekombinationswahrscheinlichkeit niedriger als 10%. Mit geringer werdender Schichtdicke nimmt also nicht nur die Anzahl der im a-Si:H erzeugten Elektron-Loch-Paaren ab, sondern es nimmt auch  $P_a$  ab, wie es in der Simulation (vgl. Abb. 4.3) gezeigt wurde. Der steile Abfall von  $Q_{int}$  für Wellenlängen kleiner 350 nm ist durch Absorption im TCO zu erklären. Dies zeigt, dass bei dieser Zelle der Verlust an der Grenzfläche unter Kurzschlussbedingungen nicht wichtig ist. Für Wellenlängen  $> 600$  nm sind die a-Si:H Schichten transparent und  $Q_{int}$  ist durch  $L_{eff}$  des kristallinen Siliziums

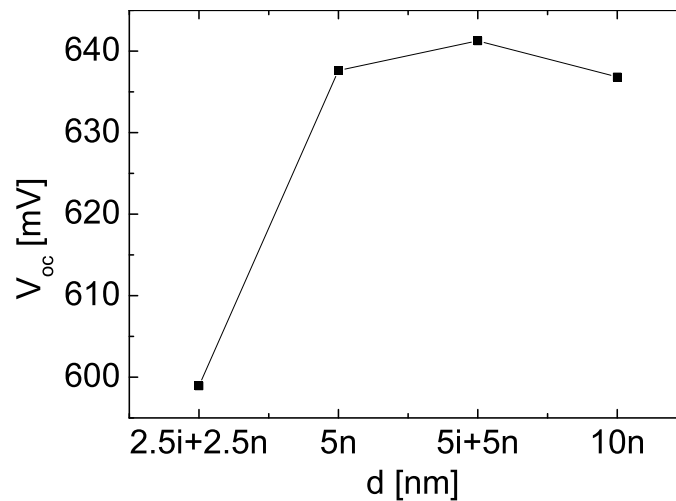


**Abbildung 6.8:**  $V_{oc}$  und  $J_{sc}$  für unterschiedliche Schichtdicken  $d$  des  $n$ -dotierten amorphen Emitters.

bestimmt. Dünne amorphe Emitterschichten erhöhen demnach  $J_{sc}$ , wie auch in der Simulation (Kap. 4) gezeigt wurde.

Abb. 6.8 zeigt  $V_{oc}$  und  $J_{sc}$  für ITO/a-Si:H(n)/c-Si(p)-Solarzellen bei Variation der Emitterdicken von  $d = 3 - 20$  nm.  $J_{sc}$  nimmt mit abnehmendem  $d$  zu. Ursache ist die durch die geringere Schichtdicke verminderte Absorption im Emmitter.  $V_{oc}$  ist für  $d \geq 5$  nm nahezu unabhängig von der Schichtdicke. Für  $d < 5$  nm nimmt sie dagegen drastisch ab. Dieses Ergebnis deutet darauf hin, dass die kritische Emitterdicke für a-Si:H(n)/c-Si(p)-Solarzellen bei ca. 5 nm liegt. Ursache für die Verringerung von  $V_{oc}$  für  $d < 5$  nm können sein:

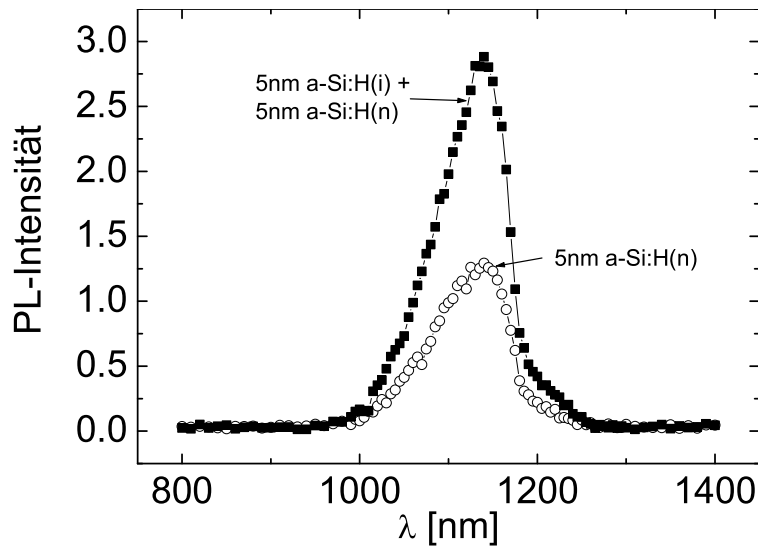
- Lokale Kurzschlüsse: Die dünne amorphe Schicht ist nicht homogen. Bei derart dünnen Filmen könnten deshalb Kurzschlüsse des TCO/a-Si:H/c-Si-Kontakts auftreten.
- Verarmung der a-Si:H(n) Schicht (siehe Simulation Kap. 4.1.3): Wird  $d$  klein, so kann der Fall eintreten, dass im a-Si:H kein Neutralgebiet mehr vorliegt. Die Diffusionspannung  $V_D$  über dem Heterokontakt wird nicht mehr nur durch den a-Si:H(n)/c-Si(p)-Kontakt allein bestimmt, sondern auch durch das über



**Abbildung 6.9:**  $V_{oc}$  für Solarzellen mit intrinsischer Zwischenschicht Die Zahl vor dem  $n$  ist die Schichtdicke der  $a\text{-Si:H}(n)$  Schicht und die Zahl vor dem  $i$  ist die Schichtdicke der  $a\text{-Si:H}(i)$  Schicht in nm.

dem  $a\text{-Si:H}(n)$  liegende TCO. Durch die Verarmung des  $a\text{-Si:H}$  verringert sich  $V_{oc}$ .

Um zu entscheiden, ob die reduzierte Leerlaufspannung, durch Kurzschlüsse oder Verarmung des  $a\text{-Si:H}$  verursacht ist, wurden Solarzellen präpariert, die eine undotierte  $a\text{-Si:H}$ -Schicht zwischen dem  $a\text{-Si:H}(n)$  und  $c\text{-Si}(p)$  aufweisen. Diese undotierte Zwischenschicht würde die Zahl der Kurzschlüsse reduzieren, hat aber nur einen geringen Einfluss auf die Verarmung des Emitters. In Abbildung 6.9 ist  $V_{oc}$  für  $a\text{-Si:H}(n)/c\text{-Si}(p)$ -Strukturen mit intrinsischen  $a\text{-Si:H}(i)$ -Pufferschichten dargestellt.  $V_{oc}$  ist für die 2.5 nm  $a\text{-Si:H}(n)$  Schicht im Vergleich zu den beiden Proben mit der 5 nm  $a\text{-Si:H}(n)$  Schicht deutlich reduziert. Dies liefert einen Hinweis, dass die Ursache bei der Reduktion von  $V_{oc}$  eine Verarmung der  $a\text{-Si:H}$  Schicht ist und nicht lokale Kurzschlüsse der Zelle. Einen weiteren Hinweis darauf bieten AFM-Messungen. Damit wurde die mittlere Rauigkeit der  $a\text{-Si}$ -Oberfläche zu Werten kleiner als 1 nm bestimmt (siehe Abb. A.3). Durch das Einbringen einer 5 nm  $a\text{-Si:H}(i)$  Schicht scheint eine zusätzliche geringfügige Erhöhung von  $V_{oc}$ , verglichen mit einem reinen  $a\text{-Si:H}(n)$  Emitter, erzielbar zu sein. In den Proben aus Abb. 6.9 beträgt der Un-

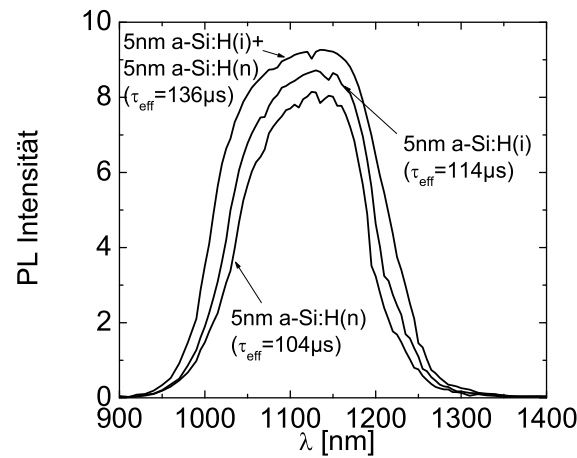


**Abbildung 6.10:** PL-Messung an beidseitig mit a-Si:H beschichteten Wafern. Die Probe mit der intrinsischen a-Si:H-Pufferschicht zeigt ein höheres PL-Signal. Dies wird auf eine niedrigere Defektdichte an der Grenzfläche zurückgeführt.

terschied ca. 5 mV. Dies deutet auf eine bessere Defektpassivierung der Grenzfläche hin. Ähnliche Ergebnisse wurden in [76, 77] für die Passivierung von n-dotierten Wafern mit einer a-Si:H(i) Schicht vorgestellt. Durch Einbringen einer undotierten a-Si:H Schicht zwischen eine a-Si:H(p) Schicht und einem c-Si(n)-Absorber konnten sie  $V_{oc}$  um ca. 4 mV erhöhen. Als Ursache dafür wären zwei Gründe vorstellbar. Zum einen könnte durch die intrinsische Zwischenschicht die Zustandsdichte an der Grenzfläche gesenkt werden. Zum anderen könnte es sein, dass die Rekombination von Ladungsträgern im c-Si über Tunnelübergänge im a-Si:H durch die niedrigere Defektkonzentration des undotierten a-Si:H geringer ist. Beides hat durch die Verringerung der Rekombination eine Erhöhung von  $V_{oc}$  zur Folge. Während der erste Fall durch Simulation gezeigt wurde, ist eine Tunnelrekombination im Simulationsprogramm nicht berücksichtigt.

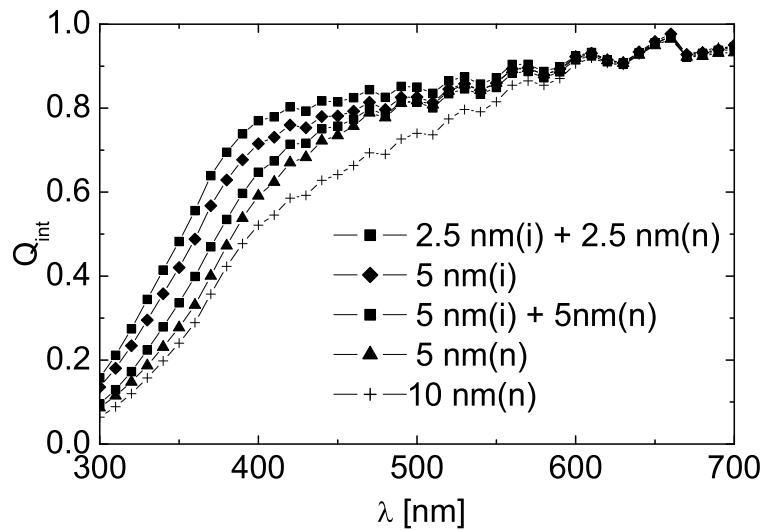
Die Passivierung der Grenzfläche durch Einfügen einer intrinsischen Pufferschicht konnte durch Photolumineszenz-Messungen und Messungen der effektiven Lebenszeit bestätigt werden: In Abb. 6.10 ist die PL-Intensität zweier beidseitig mit a-

Si:H(n) bzw. a-Si:H(n)+a-Si:H(i) beschichteten Si-Wafern dargestellt. Der Vergleich zeigt ein deutlich höheres PL-Signal für den Wafer mit der intrinschen Pufferschicht. In [78] wird von einer Verringerung der Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit für eine a-Si:H(p)/a-Si:H(i)/c-Si(p)-Struktur im Vergleich zu einer Struktur ohne intrinsische Pufferschicht berichtet, was ebenfalls für eine bessere Grenzflächenpassivierung durch eine intrinsische Zwischenschicht spricht. Abb. 6.11 zeigt Messungen an a-Si:H/c-Si(p)-Solarzellen, wobei der Emitter aus (a) einer 5 nm a-Si:H(n), (b) einer 5 nm a-Si:H(i) bzw. (c) einer Kombination von 5 nm a-Si:H(n) + 5 nm a-Si:H(i) besteht. In der Abb. sind die an den Proben bestimmten effektiven Lebenszeiten  $\tau_{eff}$  (Kap. 5.1.6) angegeben. Diese korrelieren mit den PL Messungen und belegen die Unterschiede zwischen den verschiedenen Präparationen. Die Zelle (a) zeigt das geringste, während Zelle (c) das höchste PL-Signal aufweist. Zelltyp (b) weist durch die intrinsische a-Si:H-Schicht eine bessere Defektpassivierung der Grenzfläche gegenüber dem Zelltyp (a) auf. Die Ursache dafür, dass Zelltyp (c) eine höhere PL-Intensität zeigt, könnte durch die Defektpassivierung wie von Typ (b) sowie durch das veränderte Bandprofil an der a-Si:H/c-Si-Grenzfläche erklärt werden. Die zusätzliche a-Si:H(n)-Schicht führt zu einer größeren Bandverbiegung im kristallinen Absorber. Die Grenzfläche verarmt stärker an Löchern, wodurch den Minoritäten weniger Rekombinationspartner zur Verfügung stehen. Die passivierende Wirkung einer a-Si:H(i)-Schicht wird durch das hohe PL-Signal gezeigt. In [79] werden extrem niedrige Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeiten ( $< 10$  cm/s) für n- und p- Typ Wafer vorgestellt, die durch Deposition einer 30 nm dicken a-Si:H(i)-Schicht erzielt wurden. Auch dünne a-Si:H(i)-Schichten (5 nm) in Verbindung mit 20 nm a-Si:H(n)-Schichten zeigten Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeiten von 10 cm/s [80]. Trotz der hohen effektiven Lebenszeiten und des großen PL-Signals für die Zelle mit einer 5 nm a-Si:H(i)-Schicht weist diese Zelle ein  $V_{oc}$  von nur 350 mV auf. In diesem Fall bildet im Wesentlichen das TCO (ITO) mit dem c-Si(p)  $V_D$  und nicht der a-Si:H/c-Si-Übergang. Dadurch wird  $V_D$  und damit auch  $V_{oc}$  reduziert, siehe auch Kap. 4.1.2. Die Ergebnisse des letzten Abschnitts zeigen, dass durch Einfügen einer dünnen (5 nm) undotierten a-Si:H-Pufferschicht  $V_{oc}$  erhöht werden kann.



**Abbildung 6.11:** PL-Messung an Solarzellen. Die Proben mit einer intrinsischen a-Si:H-Pufferschicht zeigen ein höheres PL-Signal. Die effektiven Lebenszeiten korrelieren mit den PL-Intensitäten. Die Unterschiede in der PL-Intensität sowie der effektiven Lebenszeiten werden auf die verschiedenen elektronischen Eigenschaften der Grenzflächen zurückgeführt.

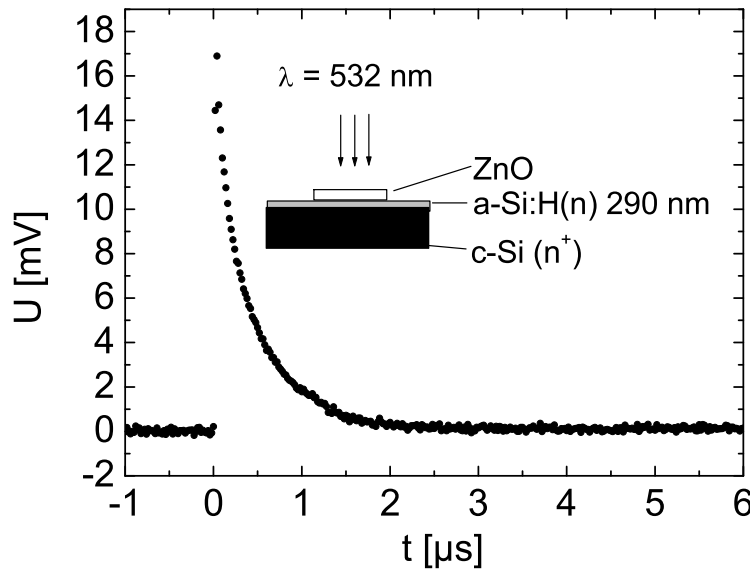
Der Einfluss einer a-Si:H(i)-Schicht auf  $J_{sc}$  wurde durch Messung von  $Q_{int}$  untersucht. In Abb. 6.12 ist  $Q_{int}$  für den Wellenlängenbereich 300-700 nm, gemessen an Solarzellen mit verschiedenen Emitttern, dargestellt. Für den Wellenlängenbereich größer als 700 nm ist  $Q_{int}$  durch die Eigenschaften des c-Si-Absorbers und des Rückkontaktes bestimmt und nicht durch die des a-Si:H Emitters.  $Q_{int}$  ist für diese Wellenlängen unabhängig von der Präparation des Emitters. Die Probe mit 10 nm a-Si:H(n) zeigt die geringste Quantenausbeute. Der a-Si:H(n)-Emitter mit einer Dicke von 5 nm weist durch die geringeren Emitterverluste ein höheres  $Q_{int}$  auf. Wird zusätzlich eine 5 nm dicke intrinsische amorphe Pufferschicht eingefügt, so wird in dieser durch das a-Si:H(n) und das c-Si(p) ein hohes elektrisches Feld aufgespannt. Ladungsträger, die in dieser Schicht generiert werden, können dadurch getrennt werden und tragen zu  $J_{sc}$  bei. Die Proben mit einem 5 nm a-Si:H(i)- und einem 2.5 nm a-Si:H(n) + 2.5 nm a-Si:H(i)-Emitter haben höhere Quantenausbeuten als die mit dem 5 nm a-Si:H(n)-Emitter. Dies ist auf eine geringere Defektkonzentration in der undotierten im Vergleich zu der dotierten Schicht zurückzuführen. Warum  $Q_{int}$  für



**Abbildung 6.12:** Interne Quantenausbeute von ITO/aSi/cSi Solarzellen für verschiedene Emmitter. *i* steht für intrinsisches und *n* für *n*-dotiertes a-Si:H.

die 5 nm a-Si:H(n)+5nm a-Si:H(i) sogar etwas über der 5 nm a-Si:H(n) und die 2.5 nm a-Si:H(n)+2.5 nm a-Si:H(i) über der 5 nm a-Si:H(i) Schicht liegt, konnte nicht eindeutig geklärt werden. Vorstellbar ist, dass durch die *n*-Schicht das Feld in der a-Si:H(i)-Schicht erhöht wird und dadurch die Rekombination vermindert wird. Die Simulation zeigte ebenfalls eine Reduktion der Rekombination bei einem a-Si:H(i)-Emitter im Vergleich zu einem a-Si:H(n)-Emitter. Jedoch ergab die Simulation mit a-Si:H(n)+a-Si:H(i) Schichten eine geringere Quantenausbeute als nur eine a-Si:H(n) Schicht und nicht wie im Experiment eine gleiche oder sogar etwas höhere Quantenausbeute. Ursachen hierfür sind darin zu suchen, dass das Rekombinationsverhalten stark von der Defektverteilung innerhalb der Bandlücke abhängt. Außerdem findet ein gradueller Übergang von der Defektstruktur des a-Si:H(n) zur Defektstruktur der a-Si:H(i)-Schicht statt, der in der Simulation nicht beschrieben wird.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass eine a-Si:H(n)-Schichtdicke von 5 nm nötig ist, um die maximale Leerlaufspannung zu erreichen. Eine intrinsische a-Si:H-Pufferschicht von 5 nm verringert die Defektkonzentration an der a-Si:H/c-Si-Grenzfläche, wodurch  $V_{oc}$  weiter erhöht werden kann, wie es auch für die inverse Struktur (a-Si:H(p)/c-Si(n), [76]) gezeigt wurde. Dünne a-Si:H(i)-Schichten verringern im

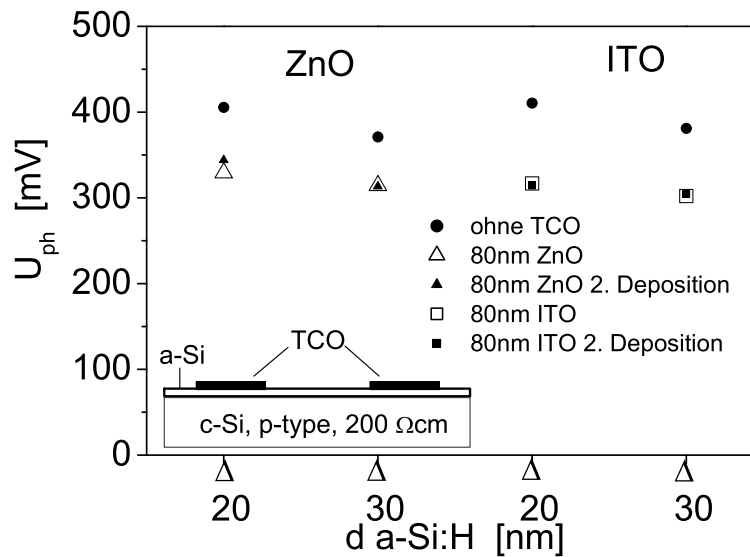


**Abbildung 6.13:** Photospannungstransient an einem ZnO/a-Si:H(n)-Kontakt mit einer a-Si:H Dicke von 290 nm. Die Anregung erfolgte bei  $\lambda = 532$  nm. Aus der Polarität von  $U_{ph}$  ergibt sich eine Verarmung des ZnO/a-Si:H(n) Kontaktes.

Gegensatz zu a-Si:H(n)-Schichten  $J_{sc}$  nicht, da die in der Schicht generierten Ladungsträger ähnlich wie in einer pin-a-Si:H-Zelle durch das starke elektrische Feld getrennt werden und so zum Strom beitragen können.

### 6.3 TCO-Kontakt

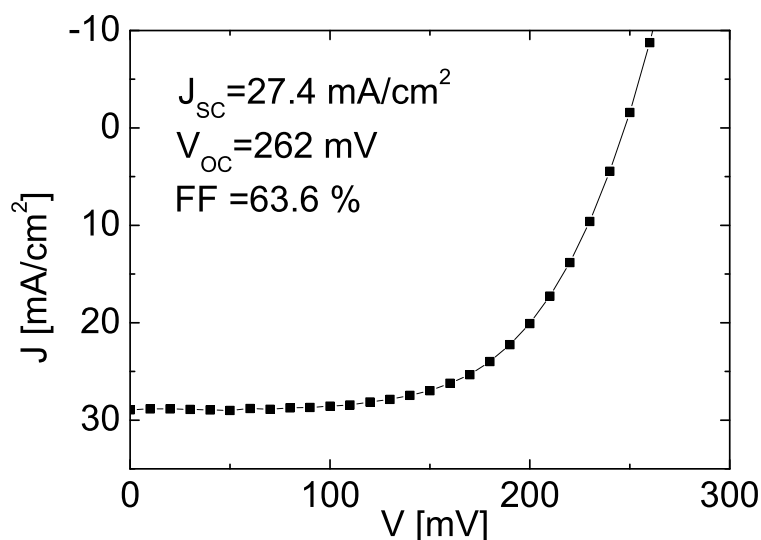
Da amorphes Silizium eine geringe Leitfähigkeit aufweist, wird der Frontkontakt durch eine TCO-Schicht und ein Metallgrid realisiert. Neben der Erhöhung der Querleitfähigkeit kann das TCO durch seinen günstigen Brechungsindex ( $n \simeq 2$ ) zusätzlich als Antireflexschicht verwendet werden. Durch die Verwendung eines TCO's entsteht neben dem a-Si:H/c-Si Übergang ein zweiter Heterokontakt, der die Solarzellencharakteristik beeinflussen kann (Kap. 4.1.3). Die Grenzflächenrekombinationsgeschwindigkeit des TCO/a-Si:H-Übergangs ist wegen des rekombinationsaktiven Emitters im Vergleich zur Bandanpassung von geringem Interesse. Damit dieser Kontakt ohmsche Eigenschaften besitzt, sollte in der Raumladungszone des Über-



**Abbildung 6.14:** Photospannung von  $a\text{-Si:H}(n)/c\text{-Si}(p)$ -Strukturen mit und ohne TCO als Frontkontakt. Das TCO wurde zur Untersuchung der Reproduzierbarkeit des Effektes abgeätzt und anschließend wieder deponiert.

gangs eine Anreicherung von Majoritätsladungsträgern auftreten. Um Aussagen über den TCO/ $a\text{-Si:H}(n)$ -Kontakt auf die Solarzellencharakteristik und insbesondere die Bandverbiegung dieses Kontaktes machen zu können, wurden an speziell dafür präparierten Strukturen SPV-Messungen durchgeführt. Abb. 6.13 zeigt den SPV-Transienten an einer  $\text{ZnO}/a\text{-Si:H}(n)$ -Struktur abgeschieden auf entartet dotiertem  $c\text{-Si}(n)$ . Die Dicke der  $a\text{-Si:H}$ -Schicht beträgt 290 nm. Die Anregung erfolgt bei 532 nm. Die positive Polarität des SPV-Signals zeigt eindeutig, dass die Raumladungszone des Kontaktes verarmt ist, also das Verhalten eines Schottky-Kontaktes vorliegt. Wegen der hohen Rekombination im  $a\text{-Si:H}(n)$  und der geringen Intensität des Nd:YAG Lasers ist die generierte Überschussladung und damit das SPV-Signal klein und gibt nicht den Wert der Bandverbiegung an diesem Kontakt wider.

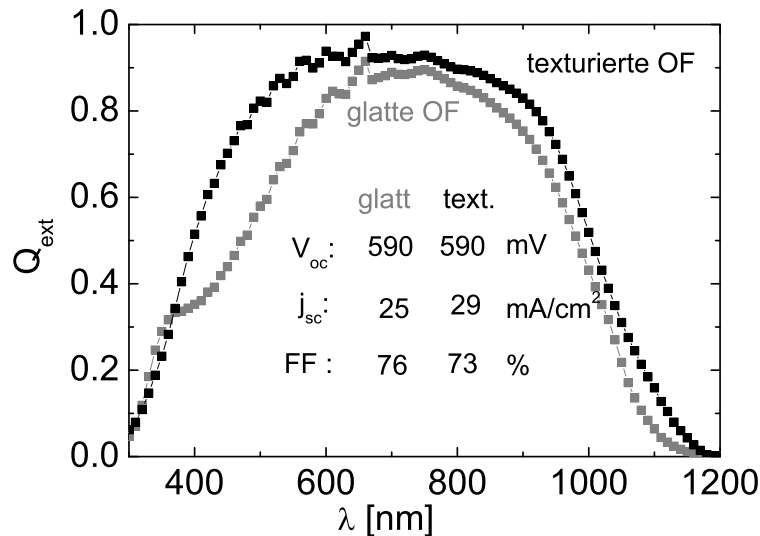
Abb. 6.14 zeigt SPV-Messungen an  $a\text{-Si:H}(n)/c\text{-Si}(p)$  Strukturen mit und ohne TCO-Beschichtung. Das SPV-Signal, ist die die Differenz der Bandverbiegungen der Raumladungszonen dieser Struktur mit und ohne Beleuchtung. Sie ist folglich gleich  $V_{oc}$  für diese Beleuchtung. Ohne TCO ist also  $V_{oc}$  deutlich größer als mit TCO-Beschichtung. Das Abätzen des TCO's und erneutes deponieren führ-



**Abbildung 6.15:** Hellkennlinie einer ZnO/a-Si:H(i)/c-Si(p)-Solarzelle mit einer amorphen Schichtdicke von 5 nm. Diese Solarzelle weist eine niedrige  $V_{oc}$  auf.

te zu vergleichbaren Ergebnissen. Üblicherweise liegen die Änderungen im 10 mV Bereich. In extremen Fällen erreichte der Unterschied der SPV-Spannung  $U_{ph}$  zwischen a-Si:H/c-Si und ZnO/a-Si:H/c-Si bis zu 100 mV, Abb. 6.14. Die Größe des Unterschieds hängt von der Qualität der a-Si:H Schicht und der Grenzflächenvorbehandlung ab. Nur, wenn der TCO/a-Si:H(n)-Kontakt verarmt ist, ist sein Beitrag zum SPV-Signal der des n/p Übergangs entgegengesetzt, so dass auch diese Messung auf ein Schottky-Verhalten hinweist. Dieses Ergebnis weist auch darauf hin, dass dem a-Si:H(n)/c-Si(p)-Übergang ein Schottky-Kontakt durch den TCO/a-Si:H(n)-Übergang in Reihe geschaltet ist.

Um Aussagen zur Größe der Austrittsarbeit des TCO's im Vergleich zum a-Si:H(n) zu machen wurden IU-Kennlinie an ZnO/a-Si:H(i)/c-Si(p) Strukturen, mit einem 5 nm a-Si:H(i)-Emitter und einer 80 nm ZnO-Schicht, durchgeführt. Die Hellkennlinie einer solchen Zelle ist in Abb. 6.15 dargestellt. Trotz der guten Passivierung des Heteroüberganges durch die a-Si:H(i)-Schicht ist  $V_{oc}$  bei dieser Solarzelle mit 262 mV deutlich geringer als bei den a-Si:H(n)/c-Si(p)-Zellen.  $V_{oc}$  liegt bei 350 mV für Strukturen, bei denen statt des ZnO ITO als TCO verwendet wurde. Daraus



**Abbildung 6.16:** Externe Quantenausbeute von *a*-Si:H/*c*-Si-Solarzellen mit texturierte Oberfläche (Quadrate, schwarz) und glatter Oberfläche (Dreiecke, grau). Die Dicke der *a*-Si:H Schicht beträgt 10 nm. In der Tabelle sind  $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$  und Füllfaktor der beiden Zellen angegeben.

folgt, dass die Austrittsarbeit des ZnO deutlich höher ist als die einer *a*-Si:H(n)-Schicht, womit an der TCO/*a*-Si:H(n) Grenzfläche eine zusätzliche Raumladungszone auftritt. Ist die *a*-Si:H-Schicht sehr dünn, dann kann das *a*-Si:H durch die frontseitige Schottky-Barriere zusätzlich verarmt werden, so dass im Emitter kein feldfreier Bereich auftritt. In diesem Fall ist  $V_D$  über der *a*-Si:H(n)/*c*-Si(p)-Schicht wieder durch den Frontkontakt ZnO bzw. ITO mitbestimmt und reduziert diese, wodurch sich dann auch die zu erreichende Leerlaufspannung verringern kann.  $V_{oc}$  von *a*-Si:H(i)/*c*-Si(p) Solarzellen ist mit ITO als TCO im Vergleich zu ZnO um bis zu 100 mV höher. Dies zeigt zum einen, dass der Frontkontakt  $V_{oc}$  von TCO/*a*-Si:H(i)/*c*-Si(p)-Solarzellen mit beeinflusst. Zum anderen deuten die Unterschiede in  $V_{oc}$  auf eine geringere Austrittsarbeit des ITO im Vergleich zum ZnO hin, was die Verwendung von ITO als TCO für *a*-Si:H(n)/*c*-Si(p)-Solarzellen favorisieren würde.

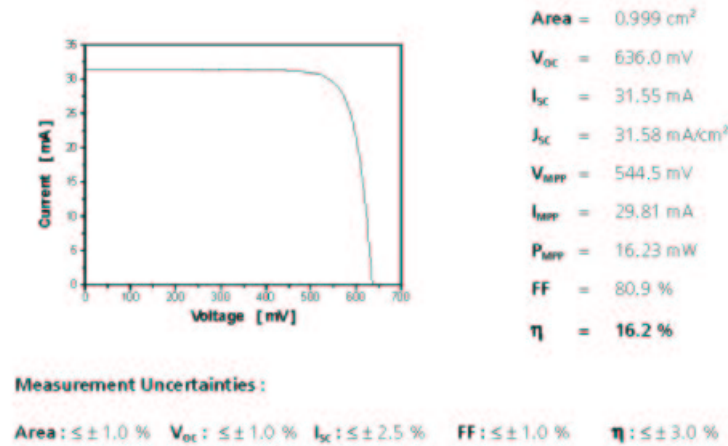
## 6.4 Oberflächentexturierung

Zur Verringerung der Reflexion der Waferoberfläche wurden mit KOH Zufallspyramiden in (100)-orientierte Wafer geätzt, deren Seiten dann (111)-orientiert sind. Die Depositionsdauer für die amorphe Schicht wurde im Vergleich zur Deposition auf flachen Wafern verdoppelt, um eine homogene Bedeckung der Kanten zu erreichen. Das TCO wurde bei einer Substrattemperatur von 160 °C abgeschieden, wodurch früher aufgetretene Verluste durch einen erhöhten Serienwiderstand vermieden wurden.

In Abb. 6.16 ist die externe Quantenausbeute für eine Solarzelle mit und ohne Texturierung dargestellt. Als Wafermaterial wurde in diesem Fall Cz-Si mit einem spezifischen Widerstand von 1.5  $\Omega\text{cm}$  verwendet, was wegen seiner geringen Diffusionslänge (ca. 80  $\mu\text{m}$ ) die niedrige Leerlaufspannung erklärt. Durch die Textur wird sowohl die Reflexion im kurzwelligen, als auch die Reflexion im langwelligen Bereich vermindert. Dadurch erhöht sich  $J_{sc}$  von 25 auf 29  $\text{mA}/\text{cm}^2$ .  $V_{oc}$  und der Füllfaktor verändern sich kaum. Durch die Texturierung der Si-Oberfläche hat sich die a-Si:H/c-Si Grenzfläche deutlich (ca. 1.7-fach) vergrößert. Da sich  $V_{oc}$  nicht ändert, kann man schließen, dass die Grenzfläche für die Beschreibung des Stromtransportes keine Rolle spielt. Die Texturierung ist also auch für a-Si:H(n)/c-Si(p)-Solarzellen eine Möglichkeit den Wirkungsgrad zu erhöhen.

## 6.5 Analyse der 16.2% Zelle

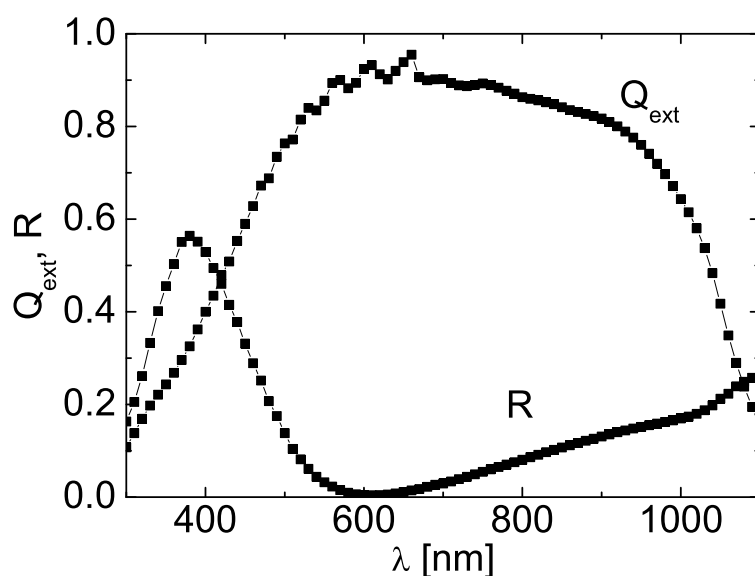
Im folgenden Abschnitt wird die Zelle mit dem bei uns bisher höchsten Wirkungsgrad von 16.2% analysiert. Die Zelle wurde in Zusammenarbeit mit der Fernuniversität Hagen präpariert und hat den nach unserer Kenntnis höchsten Wirkungsgrad für eine a-Si:H(n)/c-Si(p)-Heterostruktur. Dieser Wirkungsgrad wurde auf einem Fz-Wafer ((111), 0.5-2  $\Omega\text{cm}$ ) mit BSF und ohne Lichteinfangstrukturen erreicht. Die a-Si:H(n)-Emitterdicke beträgt 5 nm. Als TCO wurde ITO und als Frontkontakt-



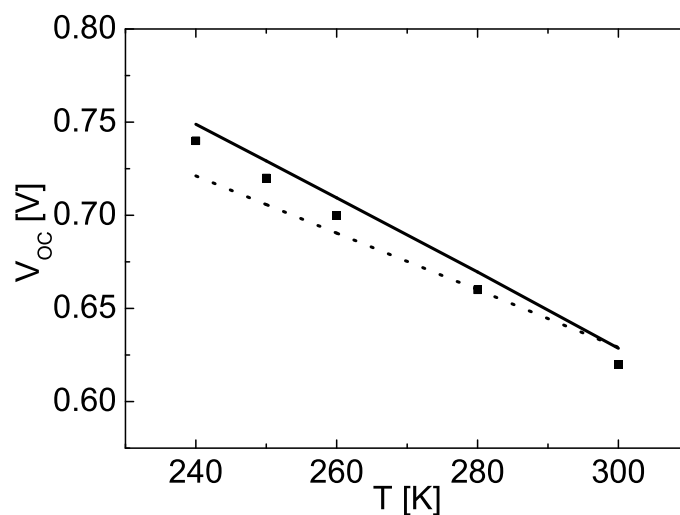
**Abbildung 6.17:** *Hellkennlinien der in Zusammenarbeit mit der Fernuniversität Hagen präparierte ITO/a-Si:H(n)/c-Si(p)-Solarzelle, gemessen am ISE Freiburg (Messprotokoll). Der Wirkungsgrad ist mit 16.2% zertifiziert.*

material Cr (30 nm) und Ag (3 μm) verwendet.

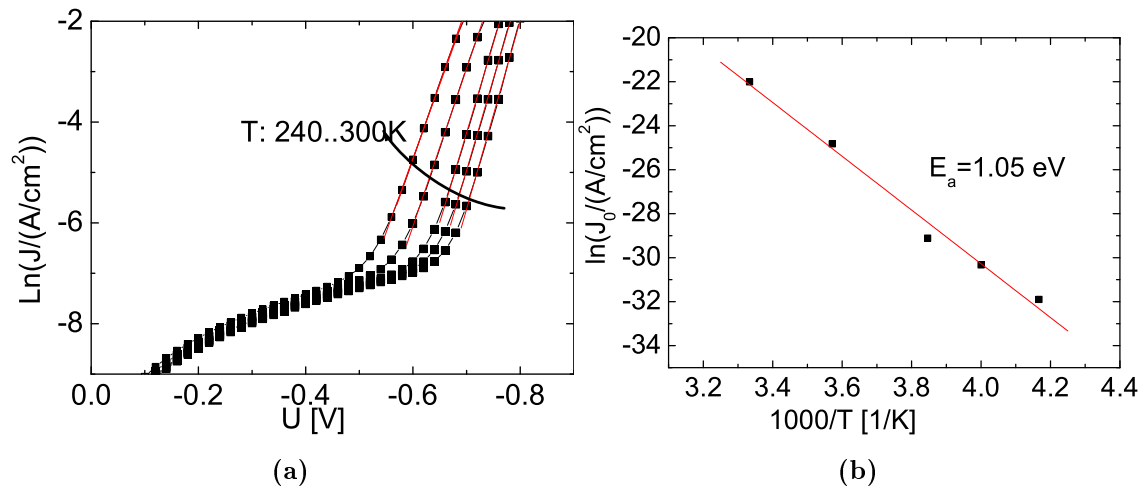
Die charakteristischen Parameter der Zelle sind:  $V_{oc} = 636$  mV,  $J_{sc} = 31.58$  mA/cm<sup>2</sup>,  $FF = 80$  %,  $\eta = 16.2$  % (FHG-ISE zertifiziert). Die externe Quantenausbeute  $Q_{ext}$  und die Reflexion (R) der Zelle sind in Abb. 6.18 dargestellt. Das Minimum der Reflexion bei 600 nm zeigt, dass die optische Dicke  $n \times d$  der ITO-Schichtdicke an das Sonnenspektrum angepasst ist. Die Abweichung von  $Q_{ext}$  von 1 im Wellenlängenbereich kleiner als 600 nm liegt hauptsächlich an Reflexionsverlusten. Die Abnahme der Reflexion für Wellenlängen kleiner als 400 nm wird durch die einsetzende Absorption im ITO verursacht. Ladungsträger, die im ITO erzeugt werden, rekombinieren und tragen nicht zum Photostrom bei. Einen weiteren Verlust liefert im Prinzip die Absorption im a-Si:H, der aber für die dünne a-Si:H-Schicht zu vernachlässigen ist (siehe Kap. 4.1.2). Eine Verringerung der Reflexionsverluste kann durch Texturierung der Waferoberfläche bzw. des ITO erreicht werden. Die inneren Verluste der Zelle im langwelligen Bereich sind auf die effektive Diffusionslänge  $L_{eff}$  des c-Si Absorbers zurückzuführen (Gl. 5.20). Für die Zelle ergibt sich  $L_{eff}$  mit der Auswertung nach Gl. 5.22 zu 460 μm. Zur weiteren Analyse der Zelle wurden die Hell- und Dunkelkennlinien für Temperaturen zwischen 150-300 K gemessen. Die



**Abbildung 6.18:** Externe Quantenausbeute  $Q_{ext}$  und Reflexion  $R$  der zertifizierten a-Si:H/c-Si Heterostruktur Solarzelle.



**Abbildung 6.19:** Temperaturabhängigkeit von  $V_{oc}$  der zertifizierten Zelle (Quadrate). Die durchgezogene Linie ergibt sich aus Gl. 4.13 mit temperaturabhängigen Parametern und die gepunktete Linie ergibt sich für temperaturunabhängige Parameter.



**Abbildung 6.20:** (a) Dunkelkennlinien der Solarzelle im Temperaturbereich 240 - 300 K. (b) Sperrsättigungsströme aus (a) in Abhängigkeit von  $1/T$  (Arrheniusauftragung) zur Bestimmung der Aktivierungsenergie.

Hellkennlinien zeigen den typischen I-U Verlauf von a-Si:H/c-Si-Zellen. Mit abnehmender Temperatur sinkt  $J_{sc}$  und  $V_{oc}$  steigt. Das Auftreten der S-Form tritt bei dieser Probe erst bei 150 K auf und führt nur zu einem kleinen Verlust im Füllfaktor. Dies zeigt, dass die Defektdichte an der a-Si:H/c-Si Grenzfläche gering ist. Zur Abschätzung von  $V_{oc}$  wird Gl. 4.13 aus Kap. 4 benutzt:

$$V_{oc} = \frac{E_g}{q} - kT \ln\left(\frac{qD_n N_c N_v}{J_{sc} N_A L_{eff}}\right).$$

Die Dotierung des Wafers wurde mit C-V-Messungen zu  $2.7 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  bestimmt. Damit ergibt sich  $V_{oc}$  zu 642 mV, was nahe an dem gemessenen Wert von 636 mV liegt. Abb. 6.19 zeigt die Abhängigkeit von  $V_{oc}$  im Temperaturbereich von 240-300 K. Die durchgezogene Linie ergibt sich durch Gl. 4.13, in die die gemessenen  $J_{sc}$ -Werte sowie die Temperaturabhängigkeit von  $E_g$ ,  $D_n$ ,  $N_c$ ,  $N_v$  aus der Literatur [23, 16] eingesetzt wurden. Für  $L_{eff}$  wurde der Wert ( $460 \mu\text{m}$ ) bei Raumtemperatur eingesetzt. Für temperaturunabhängige Materialparameter ergibt sich  $V_{oc}$  durch den gestrichelt dargestellten Verlauf. Die unterschiedliche Steigung der beiden Kurven ist im Wesentlichen auf die Temperaturabhängigkeit von  $E_g$  zurückzuführen. In Abb. 6.20(b) sind die aus den Dunkelkennlinien entnommenen Sperrsättigungsströme der zertifizierten Zelle im Temperaturbereich 240 K - 300 K über der Temperatur

aufgetragen. Man erhält aus dieser Auftragung über die Gleichung

$$j_0 = j_{00} \exp(-E_a/kT) \quad (6.1)$$

die Aktivierungsenergie  $E_a$  für den Heterokontakt. Die Temperaturabhängigkeit des Vorfaktors  $j_{00}$  hängt von dem verwendeten Modell ab. Hier wird sie vernachlässigt.  $E_a$  beträgt dann 1.05 eV, was in etwa der Energielücke von c-Si (1.12 eV) entspricht. Unter der Annahme, dass die Solarzelle durch eine Theorie für Homokontakte beschrieben werden kann, lässt sich aus der Aktivierungsenergie auf den Transport in der Solarzelle schließen. Findet die Rekombination im Volumen des Absorbers statt, so ist mit einer Aktivierungsenergie zu rechnen, die der Größe der Bandlücke des Absorbers entspricht [81]. Dieses Ergebnis zeigt, zusammen mit der gemessenen Temperaturabhängigkeit von  $V_{oc}$ , dass diese Heterosolarzelle gut durch die Theorie von Homoübergängen beschrieben werden kann. Dies heißt insbesondere, dass die Grenzfläche a-Si:H/c-Si gut passiviert ist und dadurch die Rekombination an dieser Grenzfläche nicht entscheidend  $V_{oc}$  bestimmt.

Für eine weitere Erhöhung des Wirkungsgrades der Heterosolarzelle muss die Reflexion z.B. durch Texturierung des Wafers vermindert, ein Wafer mit großen  $L_{eff}$  benutzt und ein rekombinationsärmerer Rückkontakt (z. B. Punktrückkontakt [82, 83]) präpariert werden.

# Kapitel 7

## Zusammenfassung

Es wurden Silizium Heterosolarzellen, bestehend aus einem a-Si:H/c-Si-Übergang, modelliert, simuliert, analysiert und präpariert. Durch eine Optimierung der Abscheidebedingungen und der Wafervorbehandlung konnte im Rahmen dieser Arbeit zusammen mit der Fernuniversität Hagen ein zertifizierter Solarzellenwirkungsgrad von 16.2 % erreicht werden. Dies ist unseres Wissens nach der höchste Wirkungsgrad, der für diesen Typ von Solarzelle (a-Si:H(n)/c-Si(p)) erreicht wurde. Die Ergebnisse dieser Arbeit lassen sich im Wesentlichen in drei Abschnitte gliedern:

### **I. Simulationsprogramm AFORS-HET**

Zur Modellierung der elektro-optischen Eigenschaften der a-Si:H/c-Si Solarzelle wurde ein Simulationsprogramm entwickelt: **AFORS-HET**; Automat **FOR** Simulation **HET**erostructures. Dies erlaubt die eindimensionale Simulation von Heterostrukturen, bestehend aus einer beliebigen Anzahl von Schichten, Grenzflächen und Defektverteilungen. Es basiert auf einem Lösungsalgorithmus für die Halbleitergleichungen. Der Transport über den Heterokontakt kann mit zwei verschiedenen Modellen simuliert werden: (a) Die Ströme werden wie im Volumen des Halbleiters durch verallgemeinerte Drift-Diffusionsströme beschrieben. (b) Die Ströme werden, ähnlich einem Schottky-Kontakt, durch thermionische Emission beschrieben. Die Gleichungen können sowohl für den stationären Zustand, als auch für eine periodische Kleinsi-

gnalstörung gelöst werden. Es wurden eine Vielzahl von Messverfahren nachgebildet, insbesondere: Kennlinien (IU), Quantenausbeute ( $Q_{int}$ ), Oberflächenphotospannung (SPV), Impedanz/Admittanz-Spektroskopie (IMP), Kapazitätsspektroskopie (CV, Cf) und Photolumineszenz / Elektrolumineszenz (PL/EL). Somit können die Messgrößen des jeweiligen Verfahrens für eine vorgegebene Heterostruktur simuliert und mit der realen Messung verglichen werden. Die benutzerfreundliche Oberfläche erlaubt eine einfache Bedienung.

## II. Ergebnisse aus der Modellierung von a-Si:H(n)/c-Si(p)-Strukturen

Mit AFORS-HET wurden Designkriterien für die a-Si:H(n)/c-Si(p) Heterokontaktsolarzelle entwickelt:

- Für die amorphe Schicht existiert eine kritische Schichtdicke von  $d \simeq 5$  nm. Unterhalb dieser Dicke kann der Frontkontakt  $V_{oc}$  negativ beeinflussen und oberhalb wird durch die Absorption im a-Si:H(n)  $J_{sc}$  vermindert.
- Die dünne amorphe Schicht (ca. 5 nm) muss ein möglichst niedriges ( $E_c - E_f$ ), auch im Bauelement, nicht unbedingt als Einzelschicht, aufweisen. Zu hohe Werte stellen eine Verlustquelle für FF und  $V_{oc}$  dar.
- Die Grenzflächenzustandsdichte muss unter einem Wert von  $10^{12}$  cm<sup>-2</sup> liegen. Für höhere Werte verringert sich  $V_{oc}$  und es kann eine S-förmige I-U Kennlinie auftreten.
- Ein Vergleich mit anderen Heterostrukturen, die als Absorbermaterial ebenfalls kristallines Silizium verwenden, zeigt Vorteile der a-Si:H(p)/c-Si(n)- bzw.  $\mu$ c-Si:H(n)/c-Si(p)-Struktur gegenüber der auch experimentell realisierten a-Si:H(n)/c-Si(p) Struktur.

Werden diese Kriterien erfüllt, so lässt sich mit Hilfe der Theorie für den Homokontakt und der Verwendung von Materialparametern des kristallinen Siliziums  $V_{oc}$  berechnen. Der Strom der Solarzelle ist bei dünnen a-Si:H(n)-Schichten (5 nm) im

---

Wesentlichen durch die Eigenschaften des kristallinen Siliziums und evtl. des Rückkontakts bestimmt.

### III. Präparation und Analyse der a-Si:H(n)/c-Si(p) Solarzelle

Durch eine geeignete Wafervorbehandlung und der Verwendung einer intrinsischen Pufferschicht lassen sich die Grenzflächenzustände experimentell so weit reduzieren, dass diese kaum mehr einen Einfluss auf die Solarzellencharakteristik haben. Die Präparation von a-Si:H Solarzellen und deren Charakterisierung führte zu Ergebnissen, die durch die Modellierung qualitativ beschrieben werden konnten:

- S-förmige Verlauf der I-U Hell-Kennlinie: Bei einer hohen Zustandsdichte  $D_{it}$  an der a-Si:H/c-Si Grenzfläche ist eine S-förmige I-U-Charakteristik zu beobachten. Bei einer reduzierten  $D_{it}$  tritt dies erst bei tiefen Temperaturen (150 K) auf.
- Geringe Defektkonzentrationen: Geringe  $D_{it}$  können durch eine H-Terminierung der Waferoberfläche realisiert werden. Durch die Einführung einer intrinsischen Zwischenschicht lässt sich  $V_{oc}$  weiter erhöhen. Ein Einfluss auf  $J_{sc}$  ist für dünne a-Si:H(i) Schichten nicht festzustellen.
- Analyse der 16.2 % Solarzelle:  $V_{oc}(T)$  lässt sich aus der Theorie für Homokontakte berechnen. Dies zeigt, dass für diesen Fall die Rekombination an der Grenzfläche vernachlässigt werden kann, der Wirkungsgrad der Solarzelle ist durch die Qualität des kristallinen Absorbers und des Rückkontaktes limitiert.

Zur weiteren Erhöhung des Wirkungsgrades von a-Si:H(n)/c-Si(p) Heterosolarzellen können nach diesen Ergebnissen die gleichen Konzepte wie für klassische p/n-diffundierte Si-Solarzellen verwendet werden. Als Beispiele wäre eine Oberflächentexturierung, eine Optimierung des Wafermaterials sowie die Verwendung von Punktrückkontakten zu nennen.



# Anhang A

## Charakterisierung des amorphen Siliziums

Amorphes Silizium dient in der a-Si:H/c-Si-Solarzelle als dünner Emitter. Für dünne amorphe Schichten, die auf kristallinem Silizium abgeschieden wurden, existieren keine Daten. Für das Verständnis der a-Si:H/c-Si Zellen sind aber gerade diese Daten von großer Wichtigkeit. Folgende Eigenschaften der a-Si:H-Schichten sind für die Solarzelle von Bedeutung:

- Lage des Fermi-niveaus: Sie bestimmt zum einen die Leitfähigkeit des amorphen Siliziums. Zum anderen wird damit zusammen mit  $\Delta E_c$  und der Dotierung des kristallinen Siliziums die Diffusionsspannung des Heteroüberganges festgelegt.
- Elektronenaffinität: Durch die Elektronenaffinität des a-Si:H wird zusammen mit der Elektronenaffinität des kristallinen Siliziums  $\Delta E_c$  an dem Heteroübergang festgelegt (Anderson Modell).
- Defekte im amorphen Silizium: Durch die amorphe Struktur des a-Si:H existieren sowohl an der Valenzband- als auch an der Leitungsbandkante in der Bandlücke lokalisierte Zustände, deren exponentieller Abfall durch die Urbach-

energie des Valenzbandes bzw. des Leitungsbandes bestimmt ist. Darüber hinaus sind in der Bandlücke Zustände durch offene Bindungen des Siliziums. Da die Konzentration der Defekte im Gegensatz zu kristallinem Silizium hoch ist, spielen sie - neben der über sie stattfindenden Rekombination - auch eine Rolle für die Lage des Fermi-niveaus.

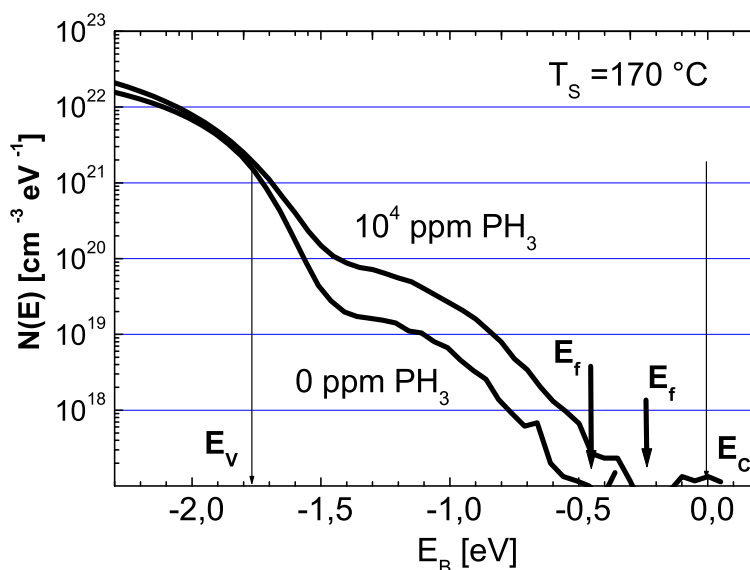
- Homogenität: Eine in der Dicke inhomogene Schicht kann in Verbindung mit dem auf dem a-Si:H deponierten TCO zu lokalen Kurzschlüssen führen. Dadurch verringert sich die Leerlaufspannung und der Parallelwiderstand der Solarzelle.

Diese Eigenschaften des amorphen Emitters wurden mit Hilfe von Leitfähigkeitsmessungen an dicken Schichten (300 nm), Photoelektronenspektroskopie, inverser Photoemission, und Atomkraftmikroskopie an dünnen Schichten bestimmt, worauf im Folgenden eingegangen werden soll.

Die Lage des Fermi-niveaus im amorphen Silizium wurde durch Leitfähigkeitsmessungen bestimmt. Dazu wurden 300 nm amorphes Silizium auf Corningglas abgeschieden. Die Leitfähigkeit bei Raumtemperatur kann mit Hilfe von Quecksilberkontakten gemessen werden, ohne dass Kontakte aufgedampft werden müssen. Aus der Leitfähigkeit lässt sich die Lage des Fermi-niveaus bzgl. der Leitungsbandkante bestimmen:

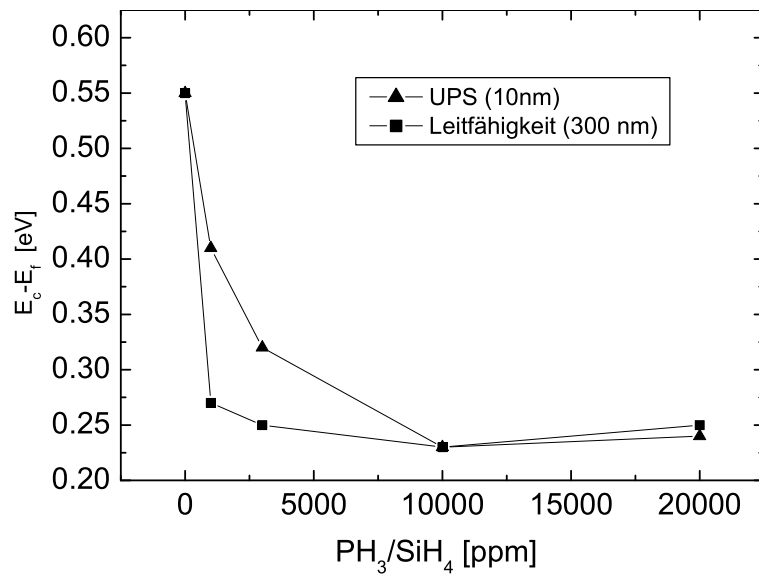
$$\sigma = \sigma_0 \exp(-(E_c - E_f)/kT) \quad (\text{A.1})$$

Dabei ist  $\sigma_0 = 150(\Omega\text{cm})^{-1}$  für amorphes Silizium. Die Lage des Fermi-niveaus zum Leitungsband wurde zu 0.23 eV bestimmt. Die Lage des Fermi-niveaus an dünnen Schichten, wie sie für die a-Si:H/c-Si-Solarzellen benötigt werden, wurde mit Hilfe der Ultraviolett-Photoelektronen-Spektroskopie (UPS) ermittelt. Die Informationstiefe von UPS liegt bei 5-10 nm und damit in der gleichen Größenordnung wie die Emitterschichtdicke. Das UPS-Spektrum einer 10 nm dicken undotierten und einer dotierten amorphen Silizium Schicht ist in Abb. A.1 dargestellt. Es liefert ein direktes Abbild der Zustandsdichte  $N(E)$  der besetzten Zustände. Da die Zustands-

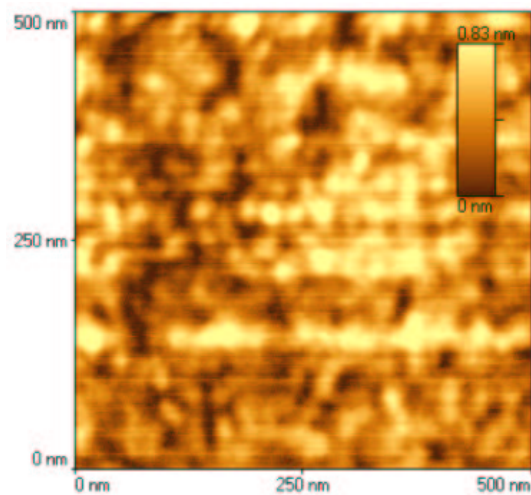


**Abbildung A.1:** UPS-Spektrum einer undotierten und einer mit 10000 ppm  $PH_3$  in  $Si:H_4$  dotierten 10 nm dicken  $a$ - $Si:H$ -Schicht, die auf kristallinem Silizium abgeschieden wurde [84].

dichte in der Umgebung des Valenzbandminimums  $E_v$  für die lokalisierten Zustände als Funktion der Energie exponentiell in Richtung Bandmitte abfällt, erhält man die Valenzbandkante des amorphen Siliziums aus einer halblogarithmischen Darstellung des UPS-Spektrums als Funktion der Energie. Die Lage des Fermi-niveaus befindet sich dort, wo das Signal der Elektronen verschwindet. Durch die Kenntnis der Lage des Valenzbandes lässt sich dann der Abstand des Fermi-niveaus von dem Valenzband berechnen. Bei Kenntnis der Bandlücke lässt sich damit der Abstand des Fermi-niveaus von der Leitungsbandkante berechnen. Die Energielücke von 1.72 eV wurde mit Hilfe von Photoleitfähigkeitsmessungen an dicken Schichten bestimmt. Damit ergibt sich die Aktivierungsenergie wie bei den dicken Schichten zu 0.23 eV bei einer Konzentration von 10000ppm  $PH_3$  in  $SiH_4$ . Abb. A.2 zeigt den Abstand des Fermi-niveaus von der Leitungsbandkante in Abhängigkeit der Phosphorkonzentration, gemessen an dünnen (UPS) und an dicken (Leitfähigkeit) Schichten. Eine Sättigung der Lage des Fermi-niveaus tritt sowohl für dünne wie für dicke Schichten ab 10000 ppm  $PH_3$  in  $SiH_4$  auf.



**Abbildung A.2:** Lage des Fermi-niveaus bestimmt aus UPS Messungen (Dreiecke) und aus Leitfähigkeitsmessungen an dicken Proben (Quadrate) für verschiedene Dotierungen von  $PH_3/SiH_4$  in der Gasphase.



**Abbildung A.3:** Atomkraftmikroskopische Aufnahme einer 20nm dicken amorphen Siliziumschicht auf kristallinem Silizium (nicht sichtbar).

Die Homogenität in der Dicke der amorphen Siliziumschichten wurde mit einem Atomkraftmikroskop (AFM) bestimmt. In Abb.A.3 ist die AFM-Aufnahme einer 20nm dicken amorphen Siliziumschicht abgebildet. Die Variation der Höhe ist auf dem untersuchten Bereich kleiner als 1 nm. Aus ellipsometrischen Messungen an einer 20 nm dicken a-Si:H-Schicht auf c-Si konnte geschlossen werden, dass der Gradient der Schichtdicke auf einer Länge von 2 cm kleiner als 1 nm ist [85].

# Anhang B

## Symbole

$c_n, c_p$	Einfangraten der Rekombinationszentren
$e_n, e_p$	Emissionskoeffizienten der Elektronen und Löcher
$E$	Elektrisches Feld bzw. Energie
$E_c, E_v$	Leitungsband- bzw. Valenzbandenergie
$E_{fn}, E_{fp}$	Quasifermienergie der Elektronen und Löcher
$E_t$	Energetische Lage der Rekombinationszentren
$f_0$	Fermiverteilung
$f_t, \tilde{f}_t$	Besetzungsfunktion für stationären- bzw. Kleinsignal-Fall Besetzung des Rekombinationszentrums
$G_n, G_p$	Generationsraten der Elektronen und Löcher
$j_n, j_p$	Teilchenströme der Elektronen und Löcher
$j_n^q, j_p^q$	Ladungsströme der Elektronen und Löcher
$j_n^{th}, j_p^{th}$	Thermischer Emissionsstrom über die Grenzfläche für Elektronen bzw. Löcher
$j_{xit\pm}^{recn}, j_{xit\pm}^{recp}$	Rekombinationsströme über Grenzflächenzustände für Elektronen und Löcher
$j_g^q$	Gesamtladungsstrom
$k$	Boltzmannkonstante
$n, \tilde{n}$	stationärer bzw. Kleinsignalanteil der freien Elektronenkonzentration
$N_{A/D}$	Akzeptorniveaus bzw. Donatorniveaus des Halbleiters

---

$N_c, N_v$	effektive Leitungs- und Valenzbandzustandsdichte
$N_t$	Konzentration der Rekombinationszentren
$p, \tilde{p}$	stationärer bzw. Kleinsignalanteil der freien Löcherkonzentration
$q$	Elementarladung $ e $ eines Elektrons
$q_{it}$	Ladung in den Grenzflächenzuständen
$R_n, R_p$	Rekombinationsrate für Elektronen und Löcher
$\tilde{R}_n, \tilde{R}_p$	Kleinsignalanteile der Rekombinationsrate für Elektronen und Löcher
$S$	Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit
$T$	Temperatur
$v_n^{th}, v_p^{th}$	thermische Geschwindigkeit der Elektronen und Löcher
$\alpha$	Absorptionskoeffizient
$\varepsilon_0, \varepsilon_r$	absolute bzw. relative Dielektrizitätskonstante
$\varphi$	elektrisches Potential
$\varphi_{fn}, \varphi_{fp}$	Quasifermpotential der Elektronen und Löcher
$\phi$	Austrittsarbeit des Frontkontakt- bzw. Rückkontaktmaterials
$\phi_f$	Bandverbiegung am Frontkontakt
$\mu_n, \mu_p$	Beweglichkeiten der Elektronen und Löcher
$\rho_t$	Konzentration der donator- und akzeptorartigen Zustände in der Bandlücke
$\sigma_n, \sigma_p$	Einfangquerschnitt der Rekombinationszentren für Elektronen und Löcher



# Literaturverzeichnis

- [1] T. Sawada, S. N. Terada, Tsuge, T. Baba, T. Takahame, K. Wakisaka, S. Tsuda, and S. Nakano, "High-efficiency a-Si/c-Si heterojunction solar cell," *Proc. of 1<sup>st</sup> World Conf. on Photovoltaic Energy Conv. (New York, 1994)*, p. 1219.
- [2] M. Taguchi, K. Kawatomo, S. Tsuge, T. Baba, H. Sakata, M. Morizane, K. Uchihashi, N. Nakamura, S. Kiyama, and O. Oota, "Hit<sup>TM</sup> cells - high-efficiency crystalline Si cells with novel structure," *Prog. Photovolt. Res. Appl.*, vol. 8(5), p. 503, 2000.
- [3] H. Sakata, T. Nakai, T. Baba, M. Taguchi, S. Tsuge, K. Uchihashi, and S. Kiyama, "20.7 % highest efficiency large area (100.5 cm<sup>2</sup>) HIT cell," *Proc. of 28<sup>th</sup> IEEE Conf. (Anchorage, 2000)*, p. 8.
- [4] P. Lengsfeld, *Successive Laser Crystallisation of Doped and Undoped a-Si:H*. PhD thesis, TU-Berlin, 2001.
- [5] P. Lengsfeld, S. Christiansen, M. Nerding, N. H. Nickel, W. Henrion, M. Rebien, and I. S. and, *Polycrystalline Semiconductors VI - Bulk Materials, Thin Films, and Devices*, ch. Excimer Laser Crystallization of Doped and Undoped a-Si:H for Solar Cells, p. 181. Scitech. Publ. Üttikon am See, Schweiz: O. Bonnaud and T. Mohamed-Brahim and H. P. Strunk and J. H. Werner, 2001.
- [6] O. Nast, *The Aluminium-Induced Layer Exchange Forming Polycrystalline Silicon on Glass for Thin-Film Solar Cells*. PhD thesis, Universität Marburg, 2000.

- [7] O. Nast, S. Brehme, S. Prtitchard, A. G. Aberle, and S. R. Wenham, "Aluminium-induced crystallisation of silicon on glass for thin-film solar cells," *Sol. Eng. Mat. and Sol. Cells*, vol. 65, p. 385, 2001.
- [8] P. Reinig, *Ionenassisierte Magnetron-Sputterdeposition Von Kristallinen Siliziumschichten Für Dünnschichtsolarzellen*. PhD thesis, Universität Marburg, 2002.
- [9] P. Reinig, B. Selle, F. Fenske, W. Fuhs, V. Alex, and M. Birkholz, "Highly  $\langle 100 \rangle$ -oriented growth of polycrystalline silicon films on glass by pulsed magnetron sputtering," *J. Vac. Sci. Technol. A*, vol. 20(6), p. 2004, 2002.
- [10] J. L. Gray, "Computer model for the simulation of thin-film silicon-hydrogen alloy solar cells," *IEEE Trans. on Elec. Dev.*, vol. 36, p. 906, 1989.
- [11] A. Niemegeers, S. Gillis, and M. Burgelman, "A user program for realistic simulation of polycrystalline heterojunction solar cell: SCAPS-1d," *Proc. of 2<sup>nd</sup> World Conf. on Photovoltaic Energy Conv. (Vienna, 1998)*, p. 672.
- [12] S. Fonash, "AMPS-1d, BETA version," 1997.
- [13] M. Burgelmann, A. D. Vos, and A. Niemegeers, "Device simulation of polycrystalline heterojunction solar cells," *Proc. of 12<sup>th</sup> EPVSEC Amsterdam*, p. 1557, 1994.
- [14] N. Jensen, *Heterostrukturen aus amorphem und kristallinem Silicium*. PhD thesis, Universität Stuttgart, 2001.
- [15] H. J. Pauwels, P. D. Visschere, and P. Reussens, "Analysis of generation in space charge regions of solar cells," *Sol. Stat. Elec.*, vol. 21, p. 775, 1978.
- [16] S. Selberherr, *Numerical Analysis of Semiconductor Devices*. Springer-Verlag Wien, 1984.
- [17] W. Shockley and W. Read, "Statistics of the recombinations of holes and electrons," *Phys. Rev.*, vol. 80, p. 4411, 1952.

- [18] R. N. Hall, "Electron-hole recombination in germanium," *Phys. Rev.*, vol. 87, p. 397, 1952.
- [19] T. Seidmann, "Steady state solutions of diffusion-reaction systems with electrostatic convection," *Nonlinear Analysis, Theory, Methods, Appl.* 4, vol. 3, p. 623, 1980.
- [20] M. S. Mock, *Analysis of Mathematical Models of Semiconductor Devices: Modeling, Materials and Device Technology*. Dublin: Boole Press, 1983.
- [21] H. Pauwels and G. Vanhoutte, "The influence of interface states and energy barriers on the efficiency of heterojunction solar cells," *J. Phys. D: Appl. Phys.*, vol. 11, p. 649, 1978.
- [22] A. Niemegeers, *Fysische Modellen Voor Polykristalijne Heterojuunctiezonnencellen*. PhD thesis, Universität Gent, 1998.
- [23] S. M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*. John Wiley a. Sons, Inc., 1981.
- [24] S. E. Laux, "Techniques for small-signal analysis of semiconductor devices," *IEEE Trans. Electron Dev.*, vol. 32, p. 2028, 1985.
- [25] D. Scharfetter and H. Gummel, "Large signal analysis of silicon read diode oscillator," *IEEE Trans. Electron. Dev.*, vol. 16, p. 64, 1969.
- [26] M. Green and M. Keevers, "Optical properties of intrinsic silicon at 300 K," *Prog. in Photovoltaics*, vol. 3, p. 189, 1995.
- [27] M. Green, "Intrinsic concentration, effective densities of state, and effective mass in silicon," *J. Appl. Phys.*, vol. 67, p. 2944, 1995.
- [28] R. Schropp and M. Zeeman, *Amorphous and Microcrystalline Silicon Solar Cells*. Massachusetts: Kluwer Academic Publishers, 1998.
- [29] P. Thomas and H. Overhof, *Electronic Transport in Hydrogenated Amorphous Semiconductors*. Springer-Verlag Berlin, 1989.

- [30] R. A. Street, *Hydrogenerated Amorphous Silicon*. Cambridge University Press, 1991.
- [31] "[Http://www.psu.edu/dept/AMPS/amps1d/examplesparameters/naSiopt.htm](http://www.psu.edu/dept/AMPS/amps1d/examplesparameters/naSiopt.htm),"
- [32] C. Longeaud and J. P. Kleider, "Trapping and recombination via dangling bonds in amorphous and glassy semiconductors under steady-state conditions: Application to the modulated photocurrent experiment," *Phys. Rev. B*, vol. 48, p. 8715, 1993.
- [33] C. Longeaud and J. P. Kleider, "General analysis of the modulated-photocurrent experiment including the contributions of holes and electrons.," *Phys. Rev. B*, vol. 45, p. 11672, 1992.
- [34] R. Anderson, "Experiments on Ge-GaAs heterojunctions," *Sol. Stat. Elec.*, vol. 5, p. 341, 1962.
- [35] W. Harrison, "Elementary theory of heterojunctions," *J. Vac. Sci. Technol.*, vol. 14, p. 1016, 1977.
- [36] W. Frensley and H. Kroemer, "Prediction of semiconductor heterojunction discontinuities from bulk band structures," *J. Vac. Sci. Technol.*, vol. 13, p. 810, 1976.
- [37] J. Tersoff, "Theory of semiconductor heterojunctions: The role of quantum dipole," *Phys. Rev. B*, vol. 30, p. 4874, 1984.
- [38] M. Cardona and N. E. Christensen, "Acoustic deformation potentials and heterostructure band offsets in semiconductors," *Phys. Rev. B*, vol. 35, p. 6182, 1987.
- [39] W. Mönch, "Empirical tight-binding calculation of the branch-point energy of the continuum of interface-induced gap states," *J. Appl. Phys.*, vol. 80, p. 5076, 1996.

- [40] H. Matsuura, T. Okuno, H. Okushi, and K. Tanaka, "Electrical properties of n-amorphous/p-crystalline silicon heterojunctions," *J. Appl. Phys.*, vol. 55, p. 1012, 1984.
- [41] H. Mimura and Y. Hatanaka, "Energy band discontinuities in an heterojunction of amorphous hydrogenated si and crystalline si measured by internal photoemission," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 50, p. 326, 1987.
- [42] J. M. Essick and D. Cohen, "Band offsets and deep defect distribution in hydrogenated amorphous silicon crystalline silicon heterostructures," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 55, p. 1232, 1989.
- [43] H. Eschrich, J. Bruns, L. Elstner, and C. Swiatkowski, "The dependence of a-Si:H/c-Si solar cell generator and spectral response characteristics on heterojunction band discontinuities," *J. Non-Cryst. Sol.*, vol. 164-166, p. 1993, 713.
- [44] S. Gall, *Admittanzspektroskopische Untersuchungen des a-Si:H/c-Si Heteroüberganges im Hinblick auf photovoltaische Anwendungen*. PhD thesis, TU-Berlin, 1997.
- [45] S. Sebastini, L. D. Gaspare, G. Capellini, C. Bittencourt, and F. Evangelisti, "Low energy yield spectroscopy as a novel technique for determining band offsets: Application to c-Si(100)/a-Si:H heterostructure," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 75, p. 3352, 1995.
- [46] J. M. Essick, N. Z. Y. M. Li, and M. S. Bennet, "Conduction- and valence-band offsets at the hydrogenated amorphous silicon-carbon/ crystalline silicon interface via capacitance technique," *Phys. Rev. B*, vol. 54, p. 4885, 1996.
- [47] N. Jensen, U. Rau, R. Hausner, S. Uppal, R. Bergmann, L. Oberbeck, and J. Werner, "Recombination mechanisms in amorphous silicon/crystalline silicon heterojunction solar cells," *J. Appl. Phys.*, vol. 87, p. 2639, 2000.
- [48] P. Basore, "Extended spectral analysis of internal quantum efficiency," *Proc. of 23<sup>rd</sup> IEEE Photovoltaic Specialist Conf.*, p. 147, 1993.

- [49] R. Brendel and U. Rau, "Effective diffusion lengths for minority carriers in solar cells as determined from internal quantum efficiency analysis," *J. Appl. Phys.*, vol. 85, p. 3634, 1999.
- [50] M. Tucci, G. Contento, N. Martucciello, F. Roca, and F. Palma, "Hydrogen treatment in a-Si:H/c-Si heterojunction for solar cell application," *Proc. PV in Europe*, p. 171, 2002.
- [51] J. Pallares and R. E. I. Schropp, "Role of the buffer layer in the active junction in amorphous-crystalline silicon heterojunction solar cells.," *J. Appl. Phys.*, vol. 88, p. 293, 2000.
- [52] T. Unold, M. Rösch, and G. Bauer, "Defects and transport in a-Si:H/c-Si heterojunctions," *J. Non-Cryst. Solids*, vol. 266, p. 1033, 2000.
- [53] M. Kolter, H. Eschrich, L. Elstner, C. Beneking, and H. Wagner, "Electrical properties of (n) a-si:h/ (p) c-si solar cells," *Proc. of 13<sup>th</sup> European Photovoltaic Solar Energy Conference (Nice)*, p. 1526, 1995.
- [54] F. Zignani, R. Galloni, R. Rizzoli, M. Ruth, C. Summonte, R. Pinghini, Q. Zini, P. Rava, A. Maud, and Y. Tsuo, "Study of a-si:H/C-si heterojunctions for PV application," *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, vol. 420, p. 45, 1996.
- [55] R. Hussein, D. Borchert, G. Grabosch, and W. Fahrner, "Dark i-v-t measurements and characteristics of (n) a-si/(p) c-si heterojunction solar cells," *Tech. Dig. of 12<sup>th</sup> Int. Phot. Sci. and Eng. Conf. 1999, Hokkaido*, pp. 351–352.
- [56] B. Jagannathan and W. Anderson, "A-si/c-si solar cells: Effect of preparation and processing techniques on the photovoltaic properties," *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, vol. 426, p. 77, 1996.
- [57] R. D. Rosa, P. Grillo, F. Roca, G. Sinno, and M. Tucci, "Photovoltaic applications for high quality ITO obtained by low temperature e-gun deposition.," *Proc. 2<sup>nd</sup> World Conf. on Photovoltaic Energy Conversion 1998, Wien*, p. 1583.

- [58] N. Jensen, R. M. Hausner, R. B. Bergmann, U. Rau, and J. H. Werner, "Optimization and characterisation of amorphous/crystalline silicon heterojunction solar cells," *Prog. in Photovoltaics*, vol. 10, p. 1, 2002.
- [59] K. Lips, J. Platen, S. Christiansen, I. Sieber, L. Elstner, and W. Fuhs, "Gas-phase deposited thin-film silicon emitters for solar cells: High quality homo-epitaxy at 325 °C," *Proc. of 28<sup>th</sup> IEEE PVSEC Anchorage*, p. 61, 2000.
- [60] M. Birkholz, E. Conrad, L. Elstner, and P. Müller, "Absorber layers for  $n^+n^-p^+$   $\mu\text{c-si}$  solar cells grown by electron cyclotron resonance (ECR) CVD," *Proc. of 28<sup>th</sup> IEEE PVSEC Anchorage*, p. 904, 2000.
- [61] J. Pla, E. Centurioni, C. Summonte, R. Rizzoli, A. Migliori, A. Desalvo, and F. Zignani, "Homojunction and heterojunction silicon solar cells deposited by low temperature-high frequency plasma enhanced chemical vapour deposition," *Thin Solid Films*, vol. 405, p. 248, 2002.
- [62] R. Rizzoli, C. Summonte, E. Centurioni, D. Iencinella, A. Migliori, and F. Zignani, "Micro/Amorphous/Crystalline silicon heterojunction solar cells," *Proc. PV in Europe Rome*, p. 256, 2002.
- [63] "[Http://www.psu.edu/dept/AMPS/amps1d/examplesparameters/nuc.htm](http://www.psu.edu/dept/AMPS/amps1d/examplesparameters/nuc.htm),"
- [64] C. G. B. Garrett and W. H. Brattain, "Physical theory of semiconductor surfaces," *Phys. Rev.*, vol. 99, p. 376, 1955.
- [65] A. M. Goodman, "A method for the measurement of short minority carrier diffusion lengths in semiconductors," *J. Appl. Phys.*, vol. 32, p. 2550, 1961.
- [66] Y. W. Lam, "Surface state density and surface potential in MIS capacitors by surface voltage measurements," *J. Phys. D*, vol. 4, p. 1370, 1971.
- [67] Y. W. Lam, "Surface state density and surface potential in MIS capacitors by surface voltage measurements II," *J. Phys. D*, vol. 4, p. 1376, 1971.

- [68] E. Suzuki and Y. Hayashi, "A method of determining the lifetime and diffusion coefficient of minority carriers in a semiconductor wafer.," *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 36, p. 1150, 1989.
- [69] V. Y. Timoshenko, A. P. Petrenko, M. N. Stolyarov, T. Dittrich, W. Füssel, and J. Rappich, "Quantitative analysis of room temperature photoluminescence of c-Si wafers excited by short laser pulses," *J. Appl. Phys.*, vol. 85, p. 4171, 1999.
- [70] W. Kern, "The evolution of silicon wafer cleaning technology," *J. Electrochem. Soc.*, vol. 137, p. 1887, 1990.
- [71] H. Angermann, W. Henrion, and A. Röseler, *Silicon-Based Materials and Devices, Vol.*, vol. 123, ch. Wet Chemical Conditioning of Silicon: Electronic Properties Correlated with the Surface Morphology, p. 268. H. S. Nalwa, 2001.
- [72] H. Angermann, W. Henrion, A. Röseler, and M. Rebien, "Wet-chemical passivation of si(100) and si(111)-substrates," *Mat. Sci. Eng. B*, vol. 73, p. 178, 2000.
- [73] A. Ulyashin, M. Scherff, A. Kozicki, R. Job, W. Fahrner, R. Bilyalov, Z. Matic, and J. Poortmans, "The influence of hydrogenation on effective lifetime of silicon wafers: Peculiarities at low-temperature treatments," *PV in Europe*, p. 103, 2002.
- [74] H. Seitz, *Untersuchungen zur Hot-wire CVD auf kristallinem Silizium und deren Anwendung in Solarzellen*. PhD thesis, Universität Kaiserslautern, 2000.
- [75] R. Henschel, *Eigenschaften von SIPOS und Optimierung damit hergestellter Silizium-solarzellen*. PhD thesis, Konstanz, 1997.
- [76] M. Tanaka, M. Taguchi, T. Matsuyama, T. Sawada, S. Tsuda, S. Nakano, H. Hanafusa, and Y. Kuwano, "Development of a new a-Si/c-Si heterojunction solar cell: ACJ-HIT (artificially constructed junction heterojunction with intrinsic thin layer)," *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 31, p. 3518, 1992.

- [77] S. Tsuda, T. Takahama, Y. Hishakawa, H. Tarui, H. Nishiwaki, K. Wakisaka, and S. Nakano, "a-Si technologies for high efficiency solar cells," *J. Non-Cryst. Sol.*, vol. 164-166, p. 679, 1993.
- [78] M. W. M. V. Cleef, F. M. Schuurmans, A. S. H. V. der Heide, A. Schönecker, and R. E. I. Schropp, "Passivation of c-Si solar cells by low temperature H-treatments and deposited a-Si:H layers," *Proc. 2<sup>nd</sup> World PVSEC Wien*, p. 1661, 1998.
- [79] S. Dauwe, J. Schmidt, and R. Hezel, "Very low surface recombination velocities on p- and n-type silicon wafers passivated with hydrogenated amorphous silicon films," *Proc. 29<sup>th</sup> IEEE PVSEC New Orleans*, p. 1246, 2002.
- [80] R. Bernini, S. Campopiano, N. Martuciello, F. Roca, L. Zeni, M. Losurdo, and G. Bruno, "Optical characterization of recombination parameters of bulk silicon and Crystalline/Amorphous silicon in solar cells," *Proc. PV in Europe Rome*, 2002.
- [81] M. Green, *Solar Cells: Operating Principles, Technology and System Applications*. The University of New South Wales, Kensington, 1992.
- [82] R. A. Sinton, Y. Kwark, J. Y. Gan, and R. M. Swanson, "27.5 -percent si concentrator solar cells," *IEEE Electron Dev. Lett.*, vol. 7, p. 567, 1986.
- [83] A. W. Blakers, A. Wang, A. M. Milne, J. Zhao, and M. A. Green, "22.8 % efficient silicon solar cell," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 55, p. 1363, 1989.
- [84] M. Schmidt, A. Schoepke, O. Milch, T. Lussky, and W. Fuhs *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, vol. 762, 2003.
- [85] W. Henrion, "Persönliche Mitteilung," 2000.



## Veröffentlichungen im Zusammenhang mit dieser Arbeit

- A. Froitzheim, H. Angermann, K. Brendel, L. Elstner, W. Füssel, K. Kliefoth, J. Knechtel, M. Schmidt, N. Sinh, H. Weiser, W. Fuhs, *Interface and transport properties of a-Si:H(n)/c-Si(p) solar cells*, 16<sup>th</sup> EPVSEC, Glasgow (2000), S. 1580.
- A. Froitzheim, K. Brendel, L. Elstner, W. Fuhs, K. Kliefoth, M. Schmidt, *Interface recombination in heterojunctions of amorphous and crystalline silicon*, J. Non-Cryst. Solids, **299-302**, (2002), 663.
- M. Schmidt, A. Froitzheim, R. Stangl, L. Elstner, K. Kliefoth, W. Füssel, W. Fuhs, *Photocurrent analysis in TCO/a-Si:H/c-Si solar cell structures*, 17<sup>th</sup> EPVSEC, Munich (2001), S. 1383.
- R. Stangl, A. Froitzheim, L. Elstner, W. Fuhs, *Amorphous/crystalline silicon heterojunction solar cells, a simulation study*, 17<sup>th</sup> EPVSEC, Munich (2001), S. 1387.
- A. Froitzheim, R. Stangl, L. Elstner, M. Schmidt, W. Fuhs, *Interface recombination in amorphous/crystalline silicon solar cells, a simulation study*, 29<sup>th</sup> IEEE PVSEC, New Orleans (2002), S. 1238.
- R. Stangl, A. Froitzheim, W. Fuhs, *Thin film silicon emitters for crystalline silicon solar cells, - epitaxial, amorphous, or microcrystalline? -, a simulation study*, PV in Europe, Rome (2002), S. 123.
- M. L. D. Scherff, A. Froitzheim, A. Ulyashin, M. Schmidt, W. R. Fahrner, W. Fuhs, *16.2% Efficiency for amorphous/crystalline heterojunction solar cells on flat p-type silicon wafers*, PV in Europe, Rome (2002), S. 216.
- A. Froitzheim, M. L. D. Scherff, A. Ulyashin, O. Milch, M. Schmidt, W. R. Fahrner, W. Fuhs, *Amorphous/Crystalline silicon Heterojunction solar cells with intrinsic buffer layer*, 3<sup>rd</sup> World Conference in Photovoltaic Energy Conversion, Osaka (2003).

- A. Froitzheim, R. Stangl, L. Elstner, M. Kriegel, W. Fuhs, *AFORS-HET: A Computer program for the simulation of heterojunction solar cells to be distributed for public use*, 3<sup>rd</sup> World Conference in Photovoltaic Energy Conversion, Osaka (2003).
- R. Stangl, A. Froitzheim, L. Elstner, M. Schmidt, W. Fuhs, *Design criteria for amorphous/crystalline silicon heterojunction solar cells, - a simulation study*, 3<sup>rd</sup> World Conference in Photovoltaic Energy Conversion, Osaka (2003).

## Danksagung

Zuallererst möchte ich mich bei meiner Freundin Christine Richtsteiger, meiner Tochter Lea sowie meinen Eltern bedanken. Sie haben mich immer wieder in meinem Tun bestärkt. Sie mussten insbesondere während der Promotionszeit oft auf mich verzichten, da ich noch ganz schnell ein wenig programmieren oder messen wollte. Vielen Dank für Euer Verständnis.

Herrn Prof. Dr. W. Fuhs gilt mein besonderer Dank. Er hat mir großes Vertrauen bei der Überlassung des Promotionsthemas und bei der Übergabe des a-Si/c-Si Projektes entgegengebracht. Ihm habe ich dadurch viele neue und interessante Kontakte zu verdanken, ohne die diese Arbeit nicht so zustande gekommen wäre. Seine Anregung, Kritik und Interesse waren stets Quelle neuer Motivation.

Herrn Prof. Dr. G. Weiser möchte ich für die Bereitschaft danken, das Zweitgutachten dieser Arbeit zu übernehmen.

Für die so wichtige tägliche Betreuung und Unterstützung möchte ich mich ganz herzlich bei Herrn Dr. K. Kliefoth bedanken. Nicht nur, dass er mir immer wieder bei der Reparatur der Messplätze und Interpretation von Messdaten geholfen hat, er war auch der wichtigste Korrekturleser meiner Arbeit, und ihm ist es zu verdanken, dass sich in der Arbeit die Zahl der Bandwurmsätze dramatisch verringert hat (bis auf diesen hier).

Bei meinen Gruppenleitern, zunächst Herrn Dr. W. Füssel und später Herrn Dr. M. Schmidt, möchte ich für die angenehme Atmosphäre, die in ihrer Arbeitsgruppe herrschte, bedanken. Herr Schmidt hat mir darüber hinaus viel bei der Organisation der a-Si/c-Si Gruppe geholfen.

Herr Dr. L. Elstner war immer ein interessierter Gesprächspartner bei der Analyse der Zellen und ich habe ihm viel bei der Erstellung des Simulationsprogrammes zu verdanken. Sein Simulationsprogramm bildete die Grundlage des von mir entwickelten Programms für Heterostrukturen. Bei Herrn Dr. R. Stangl möchte ich mich für die vielen Diskussionen über die Simulationsergebnisse bedanken.

Was wäre die schönste Simulation, wenn nicht auch am Ende des Tages wirkliche Solarzellen gefertigt würden? Ich schätze, dass im Rahmen dieser Arbeit und im Rahmen des Verbundprojektes ca. 200 Wafer in Heterosolarzellen verwandelt wurden. Für das Engagement der vielen Beteiligten möchte ich mich bei allen ganz herzlich bedanken: Frau G.

Keiler für die Vorbereitung der Wafer und die Photolithographie der Solarzellen, Herrn Herrn E. Conrad, Herrn A. Laades und Frau J. Krause für die Präparation der a-Si:H Schichten. Dr. F. Fenske und Frau C. Klimm danke ich für die Präparation und Optimierung der transparenten leitenden Oxide. Frau Dr. H. Angermann für die Bereitstellung der H-terminierten Wafer.

Bei Herrn Dr. J. Rappich möchte ich mich in die Einführung in die PL-Methode bedanken und sein stetes Interesse an neuen Methoden zur Passivierung von Si-Grenzflächen. Herrn Dr. W. Henrion möchte ich für die Ellipsometrie und Reflexions-Messungen danken.

Für die unkomplizierte technische und organisatorische Unterstützung bedanke ich mich bei Frau D. Patzek, Frau B. Rabe, Herrn H. Mai, Herrn G. Winkler sowie bei Frau M. Krusche.

Viel Freude hat mir die Zusammenarbeit innerhalb des a-Si/c-Si Vernetzungsprojektes bereitet. Hier gilt Herrn Dr. U. Rau (Universität Stuttgart), Dr. T. Brammer (Forschungszentrum Jülich), Dr. D. Borchert (FhG-ISE Gelsenkirchen), Dr. O. Voigt (RWTH Aachen), S. Tardon und Herrn Prof. G. H. Bauer (CvO-Universität Oldenburg) mein besonderer Dank. Außergewöhnlich war die Zusammenarbeit mit der Fernuniversität Hagen. Ich möchte mich bei Herrn Prof. Dr. W. Fahrner dafür bedanken, dass ich in seinen Labors mitarbeiten durfte. Dr. A. Ulyashin und M. L. D. Scherff möchte ich für die reibungslose Kooperation bei der Probenpräparation und dem Probenaustausch danken. Insbesondere ist die Prozessierung unserer Top-Solarzelle eine besonders wertvolle Frucht der engen Wechselwirkung mit M. L. D. Scherff. Vielen Dank Max.

Bei Dennis Schaffarzik möchte ich mich für die ungezählte Zahl an Zigaretten bedanken, die er mir als Nichtraucher, gerne zur Verfügung gestellt hat. Die daraus resultierenden Raucherpausen waren eine notwendige Abwechslung und haben mir viele neue Erkenntnisse verschafft.

Zum Schluss möchte ich mich noch bei meinen Wegbegleitern und Zimmergenossen Peter Reinig und Ralf Cebulla sehr herzlich bedanken, die mir weit über die Arbeitszeit hinaus zu Freunden geworden sind.

# Lebenslauf

Name: Armin Michael Froitzheim  
Geburtsdatum: 11. August 1970  
Geburtsort: Mühldorf am Inn

## Wissenschaftlicher Werdegang

seit 1999                      Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Hahn-Meitner Institut  
Berlin, Abteilung Silizium-Photovoltaik: Koordination des  
a-Si/c-Si Verbundprojektes und Promotion.

1997-1998                     Wissenschaftlicher Mitarbeiter und Gastwissenschaftler am  
Lehrstuhl für Theoretische Festkörperphysik, Universität Tübingen,  
Prof. Schopohl: Berechnung von Zustandsdichten in  
schwach gekoppelten Supraleitern.

## Studium

1998                            Abschluss des Physikstudiums mit dem Gesamturteil:  
Mit Auszeichnung

1997-1998                     Diplomarbeit bei Prof. Nils Schopohl, Thema:  
Zustandsdichten und Strom-Phasenbeziehung schwach  
gekoppelter Supraleiter

1997                            Praktikum bei Bosch Reutlingen, Thema:  
Silizium-Oberflächenmikromechanik für Airbagsensoren

1991-1998                     Studium der Physik an der Universität Tübingen

## Wehrpflicht

1991                            Sigmaringen

## Schule

1990                            Erlangung der Allgemeinen Hochschulreife

1981-1990                     Hohenzollern-Gymnasium Sigmaringen

1977-1981                     Grundschule Stetten am kalten Markt

