

Modelado de curvas características de celdas solares p-i-n de a-Si:H con el tratamiento de "Defect Pool"

E.Klimovsky* y F.A.Rubinelli*

INTEC (Instituto de Desarrollo para la Industria Química), Universidad Nacional del Litoral
Güemes 3450 – Santa Fé – Santa Fé - Argentina
E-mail: eklimo@entrieros2000.com

Determinamos que es posible ajustar curvas corriente tensión (J-V) y la respuesta espectral (SR) de una estructura p-i-n de a-Si:H tanto suponiendo que la densidad de estado (DOS) es uniforme en cada capa de la celda solar (UDM) como utilizando el modelo de "Defect Pool" (DPM). Modificando los espesores de las capas del dispositivo para encontrar la eficiencia máxima de la celda solar hallamos que las predicciones del modelo DPM están de acuerdo con los resultados experimentales, lo que no sucede con el modelo UDM. Cuando implementamos el modelo UDM en celdas solares p-i-n de a-Si:H la eficiencia máxima es alcanzada cuando removemos completamente las capas de "gap" variable usualmente incorporadas en la interfase p/i. En cambio cuando utilizamos el modelo DPM nuestro código predice una eficiencia óptima para un espesor razonable de las capas de "gap" variable. Éstos resultados dan más sustento al modelo de "Defect Pool". Aunque resulta más difícil ajustar el factor de llenado (FF) de curvas J-V en celdas solares de a-Si:H con el modelo DPM, especialmente en aquellas celdas con capas intrínsecas de gran espesor, nos fue posible reproducir las curvas J-V de tres estructuras p-i-n de a-Si:H con propiedades eléctricas y ópticas idénticas, pero que poseen diferentes espesores de capa intrínseca: 215 nm, 500 nm y 1000 nm.

Using self-consistent computer modeling we found that the experimental light current-voltage (J-V) and the spectral response (SR) characteristic curves of a-Si:H p-i-n solar cells can be simultaneously fitted by either assuming an uniform density of dangling bonds (DB) in each device layer (UDM) or by relying on the defect pool model (DPM). However when device layer thicknesses are changed in order to obtain the highest solar cell efficiency our predictions coming from the UDM model are in contrast with experimental experience, while those of the DPM model are in agreement with experimental practice. When we implement the UDM model in our computer code the highest efficiency in a-Si:H p-i-n solar cells is achieved with the entire removal of thin band gap graded layers usually incorporated at the p/i interface. On the other hand when we move to the DPM model our code predict the best efficiency for reasonable band gap graded layer thicknesses. These results give more support to the defect pool model. Although the DPM model makes more difficult the fitting of light J-V Fill Factors (FF), specially in thick cells, we were able to match the light J-V characteristics of three a-Si:H p-i-n solar cells in the initial state having identical electrical and optical properties but different intrinsic layer thicknesses: 215 nm, 500 nm and 1000 nm.

• INTRODUCCION

El silicio amorfo hidrogenado (a-Si:H) ha recibido gran atención en las últimas décadas como material para producir celdas solares de bajo costo. Aunque muchos trabajos fueron publicados sobre celdas solares p-i-n de a-Si:H aún hay aspectos básicos del modelado de la densidad de estados (DOS) que afectan el transporte eléctrico y que todavía permanecen poco claros y necesitan de una mejor comprensión. Los análisis experimentales junto con las simulaciones numéricas son herramientas que podemos utilizar para mejorar nuestro conocimiento y comprensión de éstos dispositivos. En este trabajo mostraremos los ajustes realizados de las curvas características densidad de corriente – tensión (J-V) bajo iluminación de celdas solares p-i-n de a-Si:H en el estado inicial, que poseen diferentes espesores de la capa intrínseca. Éstos ajustes fueron realizados modelando la densidad de "dangling bonds" (DB – enlaces colgantes) utilizando el modelo de "defect pool" (DPM)^{1,2} o asumiendo una densidad uniforme (UDM) dentro de cada capa del dispositivo. Predecimos el espesor óptimo de las capas de "gap" variable, ubicadas en la interfase p/i, para ambos modelos. Al realizar los ajustes de las curvas J-V bajo luz, también analizamos la inclusión de la física del efecto "Poole-Frenkel"³.

• EXPERIMENTOS

Las celdas solares p-i-n de a-Si:H fueron crecidas en un sistema de cámara múltiple a un ultra elevado vacío (PASTA, Utrecht University) por la técnica deposición de vapor por realce químico de plasma de PECVD. Las celdas son depositadas sobre vidrio revestido con SnO₂ (Asahi tipo U) en una configuración "superstrate" SnO₂/p-a-SiC:H/i-a-Si:H/n-a-Si:H/Ag. Tres capas muy delgadas, con contenido decreciente de carbón, fueron incluidas entre las capas p e intrínseca. Los coeficientes de absorción y los índices refractivos de cada capa del a-Si:H fueron determinados por mediciones transmisión/reflexión R@T. La densidad total de "dangling bond" y las colas de Urbach fueron extraídas con la técnica CPM. La energía de activación de cada capa fue obtenida de la dependencia de la conductividad a oscuras con la temperatura extraída con un electrómetro Keithley 617 (después de un recocido de una hora a 150 °C dentro de la cámara de vacío). Las celdas solares p-i-n de a-Si:H individuales fueron caracterizadas midiendo las curvas J-V bajo luz (AM1.5) y la respuesta espectral (SR). Para ser más específicos, las celdas solares que investigamos en este trabajo tienen la siguiente estructura: vidrio/SnO₂/(p)-a-SiC:H (7 nm)/tres capas de "gap" variable (0.5 nm cada una)/ (i)-a-Si:H (que tienen tres

espesores diferentes: 215 nm, 500 nm, y 1000 nm)/(n)-a-Si:H (20 nm)/Ag.

• AJUSTES

A) Consideraciones generales y parámetros de entrada

Las simulaciones fueron realizadas con el código de computación D-AMPS que contiene como núcleo a AMPS (Analysis of Microelectronic and Photonic Devices en Penn State University, USA) más algunos Desarrollos (Developments) realizados en INTEC. Éstos desarrollos se refieren a la inclusión en AMPS del efecto "Poole-Frenkel", el modelo de "Defect Pool" y el "scattering" de luz en superficies rugosas. En este trabajo cuando asumimos densidad uniforme de "dangling bonds" (UDM), la densidad de DB es descripta por tres distribuciones Gaussianas que notamos con las siglas D^- , D^0 y D^+ . Los picos de energía de éstas Gaussianas están separados 0.3 eV a lo largo de todo el dispositivo y están localizados debajo del medio del "gap" (D^-), cerca del nivel de Fermi del material intrínseco (D^0), y arriba del medio del "gap" (D^+), respectivamente. La proporción de los defectos cargados sobre los neutros es adoptada 4:1¹. Suponemos que la energía de correlación U es igual a 0.2 eV en todas las capas. La separación entre los picos de las distribución Gaussianas D^+ no ocupada y la D^- doblemente ocupadas, usualmente conocido como Δ , fue adoptado igual a 0.4 eV e independiente del "gap". En el modelo DPM la concentración total de hidrógeno H fue asumida igual a $5 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$, la energía de correlación también fue fijada en 0.2 eV y la temperatura de "freezing" fue adoptada igual a 500 °K. La energía más probable E_p en la distribución de los estados disponibles fue utilizada como parámetro de entrada de ajuste y el ancho del "pool" fue seleccionado apropiadamente para reproducir el valor de $\Delta=0.4$ eV en cada capa. Entre las tres diferentes reacciones químicas microscópicas propuestas por Powell y Deane, seleccionamos aquella donde un hidrógeno participa en la reacción enlace débil (Weak Bond) \rightarrow enlace colgante (Dangling Bond)¹. Las otras dos alternativas (cero o dos hidrógenos) dan lugar a una densidad de DB demasiado baja, o excesivamente alta en los materiales en estudio. Cuando incluimos el efecto de "Poole-Frenkel" asumimos que está activo solamente en los estados cargados del "gap", que son capaces de atraer portadores libres de carga opuesta.

Las energías de activación en ambas capas dopadas fueron derivadas de mediciones de la conductividad a oscuras, tomando en cuenta que el nivel de Fermi cambia cuando nos movemos desde 0 °K hacia la temperatura ambiente. Los valores resultantes son de 0.47 eV y 0.24 eV para las capas p-a-SiC:H y n-a-Si:H respectivamente. Los parámetros ópticos fueron determinados en forma experimental. Los parámetros eléctricos no fueron medidos directamente y se adoptaron iguales a los valores estándares encontrados en la literatura. Dado que no hay una clara descripción para la distribución de los offsets de energía en cada interfase, dividimos los "offsets" del "gap" en forma igual entre las bandas de conducción y de valencia. En el a-Si:H la pendiente de la cola de la banda de valencia fue medida

como igual a 48 meV, y la densidad total de DB fue hallada igual a $6 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

B) Resultados

Las figuras 1, 2 y 3 muestran nuestros ajustes de las curvas experimentales densidad de corriente-tensión (J-V) bajo iluminación correspondientes a tres espesores diferentes de la capa intrínseca.

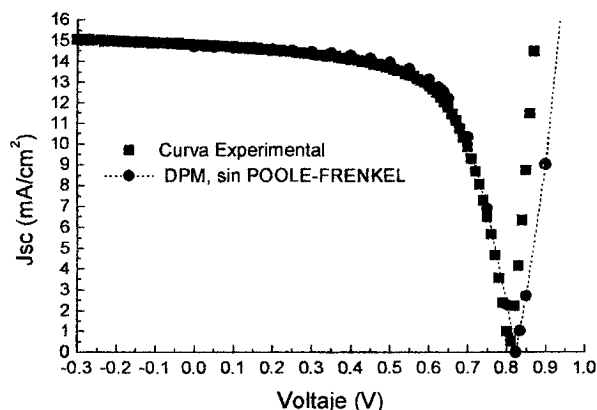


Figura 1: Ajuste de la curva J-V bajo luz de una p-i-n de a-Si:H. El espesor de la capa intrínseca es de 215 nm.

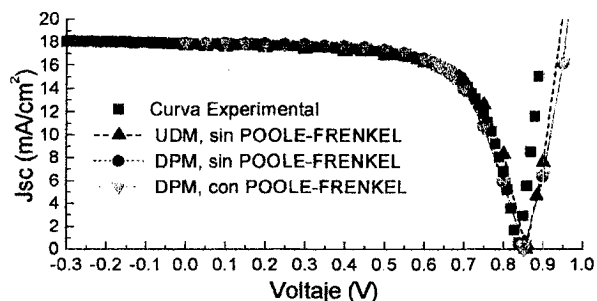


Figura 2: Ajustes de la curva J-V bajo luz de una p-i-n de a-Si:H. El espesor de la capa intrínseca es de 500 nm.

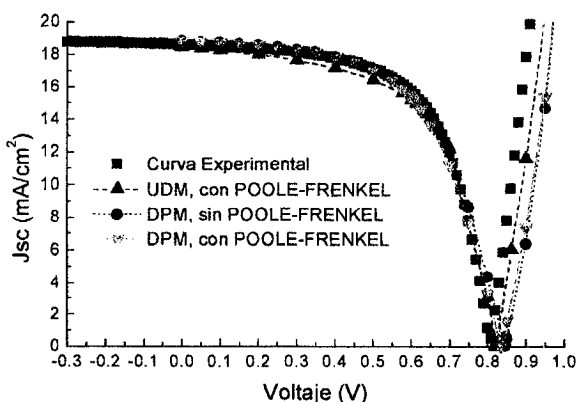


Figura 3: Ajustes de la curva J-V bajo luz de una p-i-n de a-Si:H. El espesor de la capa intrínseca es de 1000 nm.

Éstas figuras indican que aún para elevados espesores de la capa intrínseca es posible ajustar el "Fill Factor" (FF) experimental de curvas J-V bajo luz de celdas solares p-i-n de a-Si:H utilizando el modelo de "Defect Pool". Éste modelo genera una elevada densidad de DB no uniforme dentro de la capa intrínseca (ver figura 4), donde la posición de energía del nivel de Fermi varía con respecto a los bordes de banda sobre toda la capa.

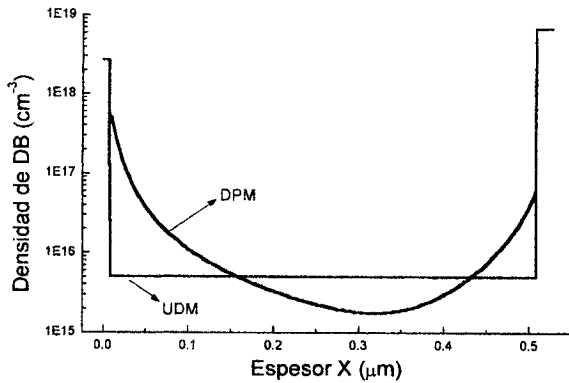


Figura 4: Comparación de la densidad de DB utilizados para ajustar las curvas J-V bajo luz cuando los modelos UDM y DPM son utilizados.

El modelo de "Defect Pool" da origen a una densidad de DB mayor cerca de las interfases p/i e i/n que en el centro de la capa intrínseca, reforzando el campo eléctrico en los bordes de la misma y debilitándolo en su centro. En nuestros ajustes, la densidad de DB predichas por el modelo de "defect pool" cerca de las interfases p/i e i/n son considerablemente mayores que la densidad de DB usada en el modelo UDM. Estos DB extra introducidos por el modelo de "defect pool" no hace fácil la tarea de reproducir el FF experimental de las celdas solares p-i-n de diferentes espesores. Con el objeto de reducir el impacto del deterioro del campo eléctrico en el centro de la capa intrínseca y del aumento en la densidad de DB, encontramos conveniente incrementar ligeramente la movilidad de los electrones (de 20 a 30 cm²/V/seg) y la densidad efectiva de estados N_c y N_v (de 2x10²⁰ cm⁻³ a 3x10²⁰ cm⁻³). También encontramos muy beneficioso disminuir la pendiente de la cola Urbach de 48 meV a 45 meV, rango que puede ser aceptado dentro de la incertidumbre experimental, y disminuimos las secciones eficaces de los estados cargados en las colas usada en el modelo UDM por un factor de 2 ó 4. Finalmente, introducimos una densidad uniforme de estados aceptores completamente ionizados de alrededor de 2x10¹⁵ cm⁻³ en las capas de "gap" variable e intrínseca, que mejora ligeramente el FF. Por consiguiente, hay dispersión en los valores de algunos parámetros de entrada. En el modelo de "defect pool", la pendiente de la cola Urbach y la densidad de estados en el borde de movilidad influyen significativamente en la densidad total de DB generados en la capa intrínseca.

La inclusión del efecto "Poole-Frenkel" conduce a una disminución de la energía de ionización de los

portadores atrapados en los estados del "gap" que se torna dependiente del valor absoluto del campo eléctrico. Las expresiones para la función ocupación de los electrones y la recombinación permanecen sin cambios, pero las secciones eficaces de los estados cargados ahora dependen del campo eléctrico. La inclusión del efecto "Poole-Frenkel" en la estructura p-i-n da origen a una corriente en la curva J-V a oscuras que no satura a voltajes inversos altos. A voltajes directos este efecto introduce mayor recombinación y menor atrapamiento de cargas.

En el modelado de las celdas solares cuando incluimos el efecto "Poole-Frenkel", observamos una disminución de la densidad de corriente bajo corto circuito (J_{sc}), menor FF pero un pequeño cambio del voltaje a circuito abierto (V_{oc}) ya que el valor absoluto del campo eléctrico está cerca de su mínimo. Con el objeto de ajustar la curva J-V bajo luz con el efecto de "Poole-Frenkel" encontramos útil disminuir aún más las secciones eficaces de los "dangling bond" cargados.

Usando los parámetros obtenidos en nuestros ajustes, estudiamos la dependencia de la eficiencia de la celda solar con respecto al espesor de las capas de "gap" variable presentes en la interfase p/i. En nuestras simulaciones todos los espesores de las capas de "gap" variable fueron cambiados simultáneamente y adoptados iguales. Encontramos que dentro del modelo UDM la inclusión de éstas capas realza el V_{oc} de la celda solar pero deteriora la eficiencia final de la misma. Nuestro código predice que la eficiencia máxima es alcanzada cuando las capas de "gap" variable son extraídas (ver figura 5).

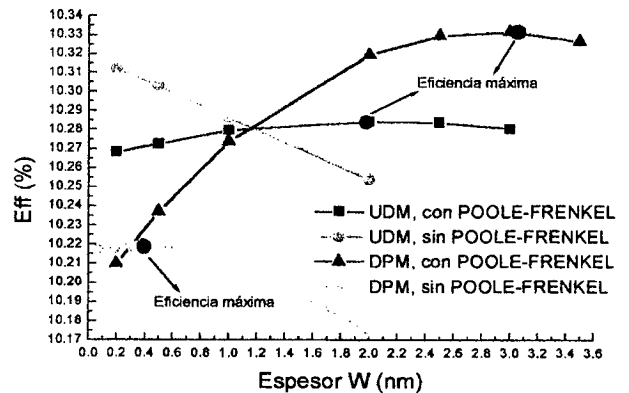


Figura 5: Eficiencias de la celda solar p-i-n de a-Si:H en función del espesor de las capas de "gap" variable ubicadas en la interfase p/i. El espesor de la capa intrínseca es de 500 nm.

Por otra parte, cuando usamos el modelo DPM obtenemos un espesor óptimo de las mismas de alrededor de 0.4 nm para cada una de ellas. También alcanzamos resultados similares cuando estudiamos celdas solares p-i-n de a-SiGe:H⁴, donde el modelo UDM aconseja remover todas las capas de "gap" variable cerca de la interfase p/i. Solamente el modelo DPM es capaz de predecir tendencias en concordancia con la práctica experimental. Es dable observar que cuando incluimos el efecto "Poole-Frenkel" en los modelos UDM o DPM, nuestro código

también es capaz de predecir el espesor óptimo de cada capa de "gap" variable pero ellos son considerablemente mayores que los valores regularmente usados en nuestras muestras (2 nm y 3 nm respectivamente).

• CONCLUSIONES

Es posible el ajuste de curvas características experimentales densidad de corriente - voltaje bajo iluminación de celdas solares p-i-n de a-Si:H tanto con el modelo de densidad uniforme de "dangling bonds" en cada capa del dispositivo como con el modelo de "defect pool". No obstante, cuando el espesor de las capas de "gap" variable ubicadas en la interfase p/i son cambiados con el objeto de encontrar la eficiencia máxima del mismo, encontramos que sólo el modelo de "defect pool" es capaz de reproducir la tendencia experimental. Aunque el modelo de "defect pool" hace más difícil el ajuste del "Fill Factor", pudimos reproducir las curvas densidad de corriente - voltaje bajo iluminación de celdas solares p-i-n de a-Si:H en el estado inicial con espesores de capas intrínsecas de 215 nm, 500 nm y 1000 nm. Por el momento no encontramos que la inclusión del efecto "Poole-Frenkel" sea muy útil para el modelado de la celdas solares de a-Si:H. Sin embargo, si incorporamos el efecto "Poole-Frenkel" nuestro código es capaz de predecir un espesor óptimo de las capas de "gap" variable ubicadas en la interfase p/i cuando asumimos una densidad de "dangling bonds" uniforme dentro de la estructura de la celda solar.

• AGRADECIMIENTOS

Los autores desean agradecer al CONICET por los fondos otorgados por el PIP Nro. 624/98.

También queremos expresar nuestros agradecimientos a los Dres. J. Rath y R. Schropp, de Utrecht University, por facilitarnos los datos experimentales.

• REFERENCIAS

- [1] - M.J.Powel, S.C.Deane, "Improved defect-pool model for charged defects in amorphous silicon", *Physical Review B*, 48, 10815 (1993).
- [2] - M.J.Powel, S.C.Deane, "Defect-pool model and the hydrogen density of states in hydrogenated amorphous silicon", *Physical Review B*, 53, 10121 (1996).
- [3] - G.Vincent, A.Chantre, and D.Bois, Electric Field Effect on the Thermal Emission of Traps in Semiconductor Junctions, *Journal of Applied Physics*, 50, 5484, (1979).
- [4] - F.A.Rubinelli, R.J.Jiménez, J.K.Rath, R.E.I.Schropp, "Using computer modeling analysis in single a-SiGe:H p-i-n solar cells", submitted for publication.