

MODELADO DE CURVAS CORRIENTE TENSIÓN A OSCURAS EN CELDAS SOLARES DE SILICIO AMORFO HIDROGENADO.

A. Sturiale y F. A. Rubinelli

Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química (INTEC), Universidad Nacional del Litoral

(UNL), CONICET, Güemes 3450, (3000), Santa Fe, Argentina

e-mail: pancho@intec.unl.edu.ar, astur@ceride.gov.ar

El rendimiento de las celdas solares p-i-n de silicio amorfo hidrogenado (*a*-Si:H) depende de la densidad de estados de la capa intrínseca, la cinética de recombinación y la movilidad de los portadores, como así también de las propiedades de las interfaces. La interpretación de las curvas características de una celda solar requiere del análisis computacional debido a la complejidad inherente de las estructuras. Luego de calibrar los parámetros de nuestro programa D-AMPS ajustando curvas experimentales de celdas solares de silicio amorfo hidrogenado de diferentes espesores, utilizamos el código como herramienta para intentar extraer información sobre la distribución de la densidad de enlaces colgantes (EC) presente en la capa intrínseca de los dispositivos p-i-n. La densidad de estados se puede describir en *a*-Si:H con el modelo convencional (UDM) donde la densidad de EC se supone uniforme en cada capa o utilizando el modelo de "Defect Pool" (DPM) que propone en la capa intrínseca una densidad de EC que depende con la posición del nivel de Fermi, es decir no uniforme. Estudiando con D-AMPS los curvas corriente – tensión medidas a oscuras por J. Deng y sus colaboradores, donde varían la banda prohibida de la capa intrínseca y de la interfaz p/i encontramos nuevas evidencias a favor del modelo de DPM.

I. INTRODUCCIÓN

El transporte y la recombinación de portadores foto-generados han sido extensamente estudiados en celdas solares de silicio amorfo hidrogenado (*a*-Si:H) que operan a voltajes directos comprendidos entre cero (cortocircuito) y el voltaje de circuito abierto (V_{oc}). Menos atención se la ha brindado al transporte presente en las curvas de la densidad de corriente vs. tensión medidas bajo tensión directa y en condiciones de oscuridad (J_D - V) y casi ninguna al transporte bajo iluminación para tensiones por encima de V_{oc} .

Una de las técnicas regularmente utilizadas en los laboratorios para caracterizar sus celdas solares es la medición de la curva densidad de corriente vs. tensión en condiciones de oscuridad (J_D - V). La muestra se introduce dentro de una caja metálica que garantiza el aislamiento lumínico y electromagnético. A tensiones directas bajas la curva J_D - V muestra una dependencia exponencial con la tensión aplicada que se describe con el factor de diodo "*n*" y la corriente de saturación.

$$J_D(V) = J_0 \exp\left(\frac{qV}{nKT}\right) \quad (1)$$

Hay consenso en la literatura de que la corriente a tensiones directas bajas ($V < 1V$) y sin iluminación está controlada por procesos de recombinación en la región intrínseca^{1,2}. Por lo tanto la distribución de defectos dentro de la banda prohibida que actúan como centros de recombinación y como trampas de portadores libres tiene un considerable impacto sobre la

forma final de la curva J_D - V . Era práctica común suponer que la densidad de estados profundos o enlaces colgantes (EC) es uniforme en cada capa del dispositivo^{3,4}. Sin embargo modelos más modernos conocidos con el nombre común de "Defect Pool Models" (DPM) han sido desarrollados⁵⁻⁹. Los modelos DPM utilizan consideraciones de equilibrio termodinámico y plantean reacciones químicas dentro del sistema compuesto por los enlaces débiles, ubicados en la cola de banda de valencia, los enlaces profundos o colgantes (EC) y los enlaces de Si-H. Minimizando la entropía del sistema se obtiene una expresión compleja para la densidad de EC en función de la energía y de la posición. Los modelos DPM introducen el concepto de que los EC se forman dentro de un posible rango de niveles de energía definido con una distribución Gausiana que posee una desviación estándar σ_{DP} (eV) denominada "ancho del Pool". Dentro de este "pool" la energía más probable de formación del EC E_p (eV) corresponde al valor pico de la Gausiana. El modelo DPM fue desarrollado en paralelo por diferentes investigadores⁵⁻⁹ y predice una densidad de EC altamente no uniforme dentro de la capa intrínseca de una celda solar p-i-n de *a*-Si:H. La distribución en energía de los enlaces colgantes resulta preferentemente positiva, neutra o negativa de acuerdo a la posición relativa del nivel de Fermi. Cuando el nivel de Fermi está en la parte inferior (superior) del "gap" un número alto y dominante de estados positivamente (negativamente) cargados D^+ (D^-) se forma en la

parte superior (inferior) de la banda prohibida “gap”. Los estados neutros adquieren importancia cuando el nivel de Fermi se encuentra cerca del valor correspondiente al material intrínseco E_{Fi} . La densidad de defectos muestra una dependencia exponencial con el alejamiento del nivel de Fermi de E_{Fi} , resultando altamente no uniforme y más elevada cerca de las interfaces con las capas dopadas que en el seno de la capa intrínseca. Como la no uniformidad de la densidad de EC complica la interpretación de los resultados existe una resistencia al uso de modelos DPM. En este contexto presentamos nuevas evidencias a favor del modelo de “Defect Pool” que resultan de interpretar con nuestro código D-AMPS ¹⁰ los resultados experimentales de curvas J_D -V de dispositivos p-i-n de α -Si:H publicados por J. Deng y por sus colaboradores ¹¹. Es importante destacar que J. Deng y sus colaboradores concluyeron que sus resultados eran evidencias a favor del modelo UDM lo que probamos ser incorrecto en este trabajo.

II. METODOLOGÍA:

Se calibraron los parámetros eléctricos de D-AMPS ¹⁰ ajustando las curvas J_D -V a oscuras y bajo iluminación y la respuesta espectral SR en condiciones de cortocircuito en celdas solares p-i-n de α -Si:H crecidas con la técnica “Photo Enhanced Chemical Vapor Deposition” (PECVD) en Utrecht University, Países Bajos ¹². Los parámetros eléctricos resultantes y que resultan relevantes para este trabajo se muestran en la Tabla 1.

UDM
$E_G (eV) = 1.72$ (i)- α -Si:H
$D (cm^3) = 2 \times 10^{15}$, $D^0 (cm^3) = 1 \times 10^{15}$, $D^+ (cm^3) = 2 \times 10^{15}$
$E_D^-(eV) = 0.626$, $E_D^0(eV) = 0.926$, $E_D^+(eV) = 1.226$
σ_N^+ , $\sigma_p^-(cm^2) = 5 \times 10^{-15}$, σ_N^0 , $\sigma_p^0 (cm^2) = 5 \times 10^{-16}$
DPM
$E_D (meV) = 45$
$[H] = 3.5 \times 10^{21} cm^{-3}$
$\Delta (eV) = 0.4$, $T_{FR} = 440 K$
$E_p (eV) = 1.27$
$\sigma_{DP} (cm^2) = 0.1805$
σ_N^+ , $\sigma_p^-(cm^2) = 5 \times 10^{-15}$, σ_N^0 , $\sigma_p^0 (cm^2) = 5 \times 10^{-16}$

Tabla 1. Tabla de parámetros utilizados en las simulaciones realizadas con D-AMPS. Aquí $D^{(+0)}$ denota la distribución de defectos en la capa intrínseca, $E_D^{(+0)}$ es la energía del pico de las gaussianas en el modelo de Densidad de Defectos Uniforme (UDM). $\sigma_N^{(+0)}$ y $\sigma_p^{(-0)}$ son las secciones eficaces de captura de las trampas usadas para ambos modelos Densidad de Defectos Uniforme (UDM) y Defect Pool Model (DPM). E_D es la pendiente de la cola donora, T_{FR} es la temperatura de freezing, E_p es la energía del pico del modelo Defect Pool y σ_{DP} es el ancho del Pool.

Utilizando los parámetros eléctricos calibrados se simularon las curvas J_D -V de los dispositivos propuestos por J. Deng et al ¹¹ a los efectos de contrastar sus resultados experimentales con nuestras predicciones. J. Deng estudia dos tipos de estructuras p-i-n de α -Si:H que se ilustran en la Fig. 1: (a) estructuras (IBV) con capas intrínsecas de espesor variable (400, 800 y 1500 nm) y con un “gap” de 1.72eV. En la interfaz p/i se incluye una capa extra de 20nm con un “gap” más elevado de 1.87eV utilizando una mayor dilución de hidrógeno; (b) estructuras (INV) con un espesor fijo de capa intrínseca igual a 400nm y un “gap” de 1.77eV. En la interfaz p/i se modifica el “gap” de la capa de 20nm desde 1.72 a 1.87eV. En el resto del trabajo nos referiremos a la interfaz y a la capa intrínseca como a las capas de 20nm de espesor y a la capa de mayor espesor (400 a 1500nm). En los primeros dispositivos denotados con las siglas IBV se hace un monitoreo de la dependencia de la curva J_D -V con respecto al espesor de la capa intrínseca evitando posibles contribuciones de la interfaz a la recombinación total (a J_D) mediante la adopción de un “gap” más elevado. En los otros dispositivos denotados con las siglas INV se estudia la dependencia de la curva J_D -V con respecto al “gap” de la interfaz, es decir con respecto a la contribución de la interfaz a la recombinación total. Los parámetros eléctricos fueron calibrados para un “gap” de 1.72eV. Para los otros valores de “gap” se desplazan proporcionalmente en energía las distribuciones de EC y se supone que la densidad total de EC se mantiene constante.

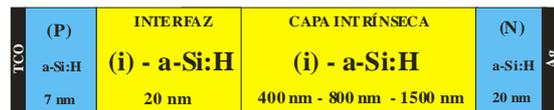


Figura 1 Diagrama del dispositivo analizado

III. RESULTADOS:

En primera instancia las simulaciones fueron realizadas utilizando el modelo de Densidad de Defectos Uniforme (UDM). Los resultados se muestran en las Figs. 2 y 4. En la Fig. 2 puede observarse la falta de dependencia de la curva característica J_D -V con el “gap” de la interfaz en los dispositivos INV. Cuando se disminuye el “gap” de la interfaz se magnifica la recombinación en esa zona pero nuestras simulaciones realizadas con UDM no son capaces de detectar los cambios introducidos contradiciendo los resultados experimentales publicados por J. Deng que muestran cierta dependencia de la curva J_D -V con el “gap” de la interfaz. La corriente a oscuras a bajas

tensiones resulta de integrar la tasa de recombinación sobre todo el dispositivo. En la Fig. 3 se comparan las tasas de recombinación predichas por los modelos UDM y DPM para una tensión directa baja. Se observa que para el modelo UDM la recombinación de los portadores ocurre mayoritariamente (o es máxima) en el seno del dispositivo donde los electrones y los huecos inyectados desde los contactos posterior y frontal respectivamente, se encuentran para recombinarse a través de estados del “gap”. En las interfaces p/i e i/n la tasa de recombinación resulta varios órdenes de magnitud inferior a la del seno.

En la Fig. 4 se muestra la dependencia de las curvas J_D -V con el espesor de la capa intrínseca en los dispositivos IBV. La dependencia medida por J.Deng es bastante inferior a la predicha con el modelo UDM lo que arroja más dudas sobre su validez.

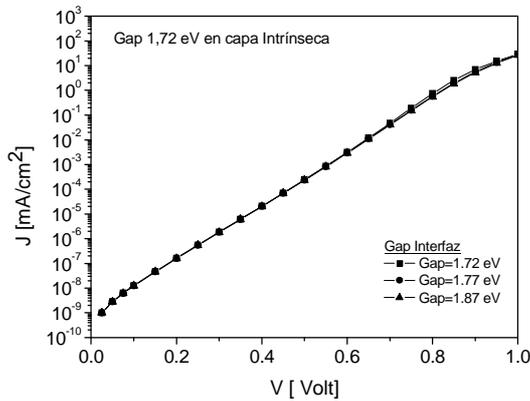


Fig. 2 Dependencia de la curva característica J_D -V para una celda pin con 400 nm de capa intrínseca y un “gap” $E_G=1.77$ eV a -Si:H. El “gap” de la interfaz p/i se incrementa de 1.72 eV, 1.77 eV y 1.87 eV. (UDM)

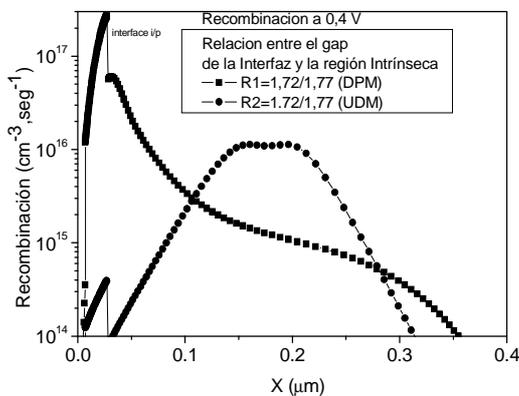


Fig. 3 Perfil de recombinación a 0.4 V obtenido por los modelos de Defect Pool (DPM) y Densidad de Defectos Uniforme (UDM).

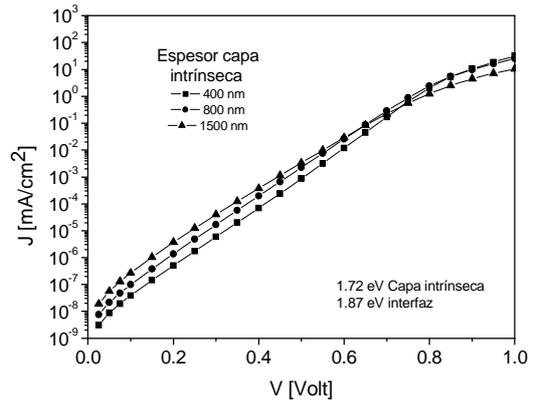


Fig. 4 Dependencia de la curva J_D -V con el espesor (400 800 1500 nm) de la capa intrínseca a -Si:H. La interfaz es de 20 nm y tiene un “gap” de 1.87 eV. (UDM)

Las mismas estructuras fueron modeladas utilizando el Modelo de “Defect Pool” (DPM).

Los resultados obtenidos se muestran en las Figs. 5 y 6. En el caso de las estructuras INV podemos observar que la curva J_D -V resulta ahora sensible al “gap” de la interfaz siendo más elevada para valores menores del “gap”. En concordancia con las curvas experimentales publicadas por J.Deng. Simulaciones detalladas muestran que la presencia de una considerable densidad de EC cerca de las interfaces predicha por el modelo DPM desplaza el máximo de la tasa de recombinación desde el seno de la capa intrínseca (UDM) hacia la interfaz p/i como se aprecia en la figura 3, resultando la recombinación global sensible a la estructura de DB presente en la interfaz p/i y en particular al “gap”. En Fig. 6 se muestra la dependencia obtenida con respecto al espesor de la capa intrínseca de las estructuras IBV que resultan menos pronunciadas que las obtenidas con UDM y más similares a las curvas experimentales publicadas por J.Deng. La menor dependencia con el espesor se debe a que la tasa de recombinación es máxima cerca de la interfaz p/i como se puede apreciar en Fig. 3. Con el código D-AMPS obtenemos que las curvas J_D -V crecen con el espesor de la capa intrínseca para tensiones directas bajas cuando utilizamos el modelo de DPM en contradicción con el argumento de J.Deng que postula la inexistencia de tal dependencia dentro del formalismo de DPM.

La correspondencia entre nuestros resultados y las curvas experimentales es de carácter cualitativa. Más trabajo es necesario para alcanzar una perfecta coincidencia cuantitativa. Sin embargo nuestras simulaciones muestran que una densidad uniforme de EC no permite reproducir las tendencias experimentales observadas en las curvas J_D -V de estructuras p-i-n de a -Si:H.

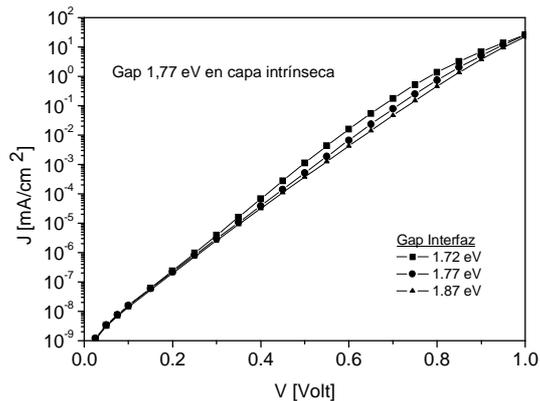


Fig. 5 Dependencia de la curva característica J_D - V para una celda pin con 400 nm de capa intrínseca y "gap" $E_G=1.77$ eV a -Si:H. El "gap" de la interfaz p/i se incrementa de 1.72 eV, 1.77 eV y 1.87 eV. (DPM)

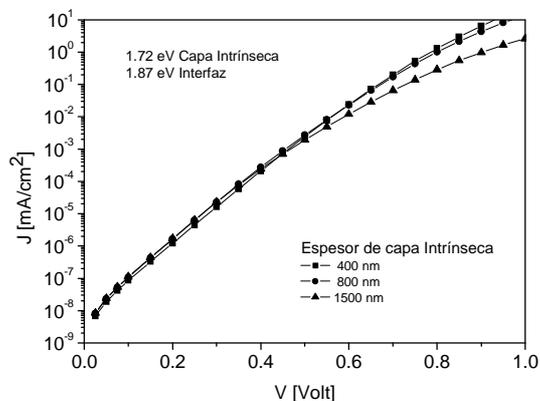


Fig. 6 Dependencia de la curva J_D - V con el espesor (400 800 1500 nm) de la capa intrínseca a -Si:H. La interfaz es de 20 nm y tiene un "gap" de 1.87 eV. (DPM)

No es posible reproducir la dependencia de las curvas J_D - V experimentales con el espesor de la capa intrínseca (resulta mayor a la esperada) y con el "gap" de la interfaz publicadas por J.Deng cuando se asume una densidad de EC uniforme en cada capa de una estructura p-i-n de a -Si:H.

Contrariamente al adoptar el modelo de "Defect Pool" (DPM) vemos que podemos reproducir las curvas experimentales, la recombinación ahora es controlada por la interfaz p/i donde se encuentra la mayor cantidad de defectos, esto conduce a una menor sensibilidad a la variación del espesor de la capa intrínseca y a una dependencia con el "gap" de la interfaz.

En particular con el código D-AMPS obtenemos para el modelo de DPM que las curvas J_D - V crecen con el espesor de la capa intrínseca para tensiones directas bajas contradiciendo el argumento de J.Deng que propone la inexistencia de tal dependencia.

Las predicciones realizadas con el modelo de "Defect Pool" están de acuerdo con los resultados experimentales publicados por J. Deng. En cambio, una densidad de estados uniforme en todas las capas de la celda nos lleva a realizar predicciones que contradicen las evidencias experimentales. Más trabajo es necesario para obtener una correspondencia cuantitativa con los resultados experimentales.

Agradecimientos: Este trabajo fue financiado por los proyectos PIP 5286 de CONICET, y PIP 2002 11-12523 de la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica.

IV. CONCLUSIONES:

Referencias:

- 1-C.van Berkel, M.J.Powell, A. R. Franklin, and I. D. French, J Appl. Phys. 73, 5264 (1994).
- 2-M. Hack and M. Shur, J. Appl.Phys. 54, 5858 (1993).
- 3-F. Lemmi, J. Non-Cryst. Solids 266-269, 1198 (2000).
- 4-L. Jiang, J. H. Lyou, S. Rane, E.A.Schiff, Q. Wang, and Q. Yuan, Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 609, A18.3.1(2000)
- 5-H. M. Branz and R. S. Crandall, Sol. Cell 27, 159 (1989).
- 6-K. Winer, Phys. Rev. B 41, 12150 (1990)
- 7-G. Schuman and G. H. Bauer, J. Non-Cryst. Solid 137&138, 315 (1991)
- 8-M. J. Powell and S. C. Deane, Phys. Rev. B 48, 10815 (1993)
- 9-G. Schumm, Phys Rev. B 49, 2427 (1994)
- 10-P.J.McElheny, J.K.Arch, H.S.Lin, y S.J.Fonash, *Journal of Applied Physics*, 64, 1254 (1988)
- 11-J.Deng, J.M. Pearce, R. J. Koval, V. Vlahos, R. W. Collins, and C.R. Wronski, Applied Physics Letter, **82**, 3023 (2003)
- 12-E. Klimovsky, J. K. Rath, R. E. I. Schropp, F.A. Rubinelli, J. Non-Cryst. Solid 338-340(2004) 686-689.