

ANALIZA OSVETLJENE p-i-n STRUKTURE a-Si:H SONČNE CELICE

F.Smole, J.Furlan, S.Amon, D.Senčar,

IZVLEČEK

Izdelan je bil računalniški program za analizo osvetljene p-i-n strukture amorfne silicijeve sončne celice. Osnovna značilnost programa je, da model dovoljenih energijskih stanj v mobilnostni reži opisuje poteke, koncentracije in vrste stanj čim bolj skladno z eksperimentalnimi rezultati. Model vsebuje repe donorskih stanj nad valenčnim pasom, repe akceptorskih stanj pod prevodnim pasom, kot tudi stanja defektov s pozitivno in negativno korelacijsko energijo.

V Poissonovi enačbi so poleg koncentracij prostih elektronov in vrzeli ter dodanih primesi upoštevane tudi koncentracije ujetih elektronov in vrzeli v stanja mobilnostne reže.

Podani so nekateri rezultati izdelane analize.

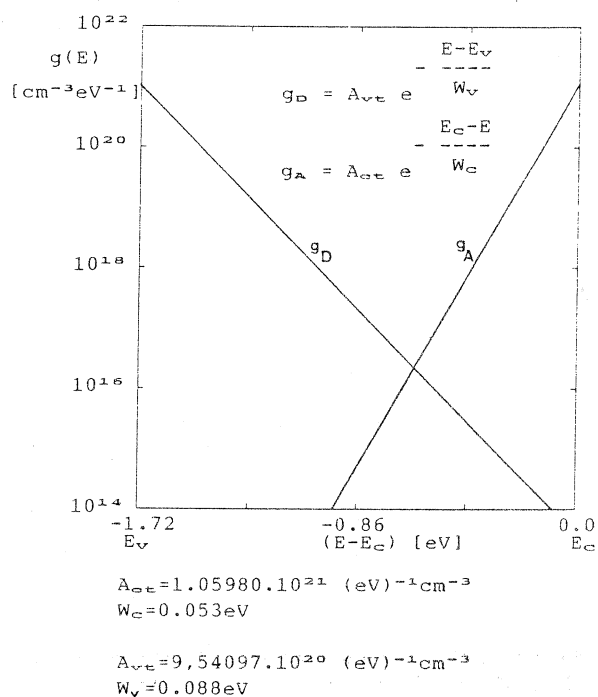
ABSTRACT

A computer program enabling the analysis of an illuminated p-i-n structure of a-Si:H solar cell was developed. This program is arranged to fit closely experimentally established localized states distribution within the mobility gap of a-Si:H. The model of localized states density includes the tails of donor-like states above the valence band, and of acceptor-like states below the conduction band, as well as defect levels having either positive or negative correlation energies. The established computer program solves electron and hole continuity equations and Poisson equation, where free and trapped charge carrier densities together with ionized impurity densities are taken into account. Attached there are some graphs showing calculated properties of the illuminated a-Si:H solar cell.

1. UVOD

Računalniška simulacija električnih dogajanj v polprevodniških strukturah je lahko pomemben pripomoček pri proučevanju dogajanj in optimizaciji struktur. Seveda pa je realnost rezultatov zelo odvisna od tega, kako so podani snovni parametri. Pri analizi a-Si:H plasti in struktur so najpomembnejši parameter prav gotovo dovoljena energijska stanja v mobilnostni reži. Čeprav v svetu potekajo številne raziskave na tem področju, razmere v mobilnostni reži še niso docela pojasnjene in ta-

ko ni možno postaviti povsem zanesljivega modela. V literaturi je možno zaslediti več aproksimativnih modelov, ki so še dodatno prilagojeni za matematično obdelavo. Hack in Shur sta npr. aproksimirala potek stanj v mobilnostni reži z eksponentnimi poteki ⁽¹⁾ (slika 1).

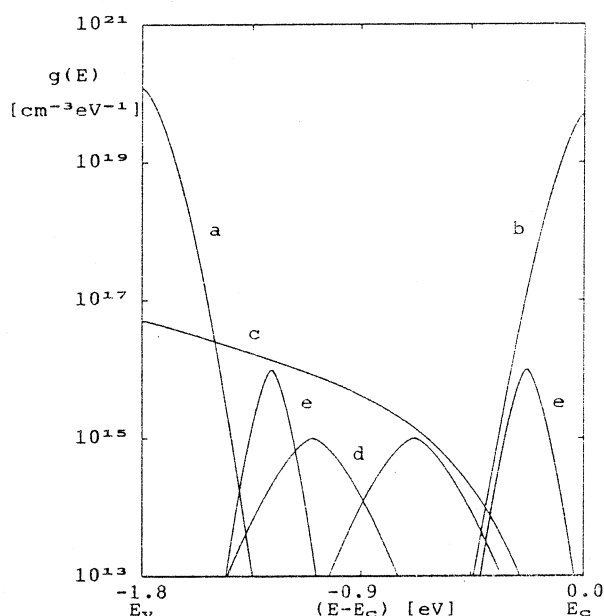


Slika 1: eksponencialni potek stanj v mobilnostni reži

V primerjavi s temi modeli smo skušali postaviti model, ki naj bi se bolj skladal z eksperimentalnimi rezultati. Takšen model vsekakor mora vsebovati repe donorskih stanj nad valenčnim pasom, repe akceptorskih stanj pod prevodnim pasom in stanja defektov. Potek stanj repov smo povzeli po M.Amerju in B.Jacksonu (2B, str. 108). Vrhova stanj bingljajočih vezi s pozitivno korelacijsko energijo smo skladno z ugotovitvami pri raziskavah Staebler-Wronskega efekta postavili simetrično glede na sredino mobilnostne reže. Vrhova stanj T_3^+ in T_3^- centrov smo postavili skladno s teoretičnimi predvidevanji Adlerja ^(2,6) in meritvami Morigakija ⁽⁴⁾. Pri tem smo pri lokaciji T_3^+ stanj upoštevali še ugotovitev DLTS meritev, da obstaja minimum stanj približno 0.4eV pod prevodnim pasom. Tako naj bi ležala stanja T_3^+ neposredno pod prevodnim (približno 0.2eV), stanja T_3^- pa so bolj

odmaknjena od valenčnega pasu, po nekaterih predvidevanjih naj bi se celo pokrivala s spodnjimi stanji bingljajočih vezi s pozitivno korelacijsko energijo⁽³⁾.

Sklepamo lahko, da se v neposredni okolici bingljajočih vezi in tudi ostalih defektov pojavlja večja deformiranost Si-Si vezi. Te vezi naj bi vnašale dodaten rep donorskih stanj, sicer nižjo koncentracijo, vendar pa globlje v mobilnostno režo (slika 2).



Slika 2: izboljšani model stanj v mobilnostni reži a-Si:H
a) repi donorskih stanj nad valenčnim pasom
b) repi akceptorskih stanj pod prevodnim pasom
c) donorska stanja močnejše deformiranih vezi
d) defekti s pozitivno korelacijsko energijo
e) defekti z negativno korelacijsko energijo

Predstavljeni model je služil kot osnova za nadaljnjo analizo. Pri tem je jasno, da razmere v mobilnostni reži a-Si:H niso povsem realno opisane. Gre za poskus, da bi čim boljše zajeli dosedanja spoznanja. Glede na to je tudi predstavljena analiza osvetljene p-i-n strukture a-Si:H sončne celice zastavljena tako, da bo možno pozneje brez večjih težav vnašati, oz. upoštevati nova dognanja.

2. RAČUNALNIŠKA SIMULACIJA DOGAJANJ V a-Si:H STRUKTURAH

Električna dogajanja v polprevodniških strukturah v splošnem opisujejo transportni, kontinuitetni in Poissonova enačba. Z rešitvijo tega sistema nelinearnih diferencialnih enačb dobimo vrednosti

posameznih električnih veličin na zunanjih sponkah kot tudi opis dogajanj znotraj strukture. Poissonova enačba, ki naj opisuje razmere v a-Si:H strukturi, mora poleg koncentracij prostih elektronov in vrzeli ter ioniziranih donorskih in akceptorskih primesi vsebovati tudi koncentraciji ujetih elektronov in vrzeli v dovoljena energijska stanja znotraj mobilnostne reže. Ta prispevek je običajno celo večji od prispevka prostih nosilcev in ga zato ne smemo zanemariti. Govorimo o razširjeni Poissonovi enačbi:

$$\epsilon \Delta V = q (p - n + p_t - n_t + N_{D+} - N_{A-}) \quad (1)$$

Podobno kot koncentraciji prostih nosilcev določimo tudi koncentraciji ujetih nosilcev s pomočjo porazdelitve gostote stanj in verjetnosti zasedenosti. Tako koncentracijo ujetih elektronov n_t določimo z integracijo produkta gostote akceptorskih stanj g_A in verjetnosti zasedenosti f_A , koncentracijo ujetih vrzeli p_t pa z integracijo produkta donorskih stanj g_D in verjetnosti zasedenosti f_D znotraj mobilnostne reže.

Ker gre za več vrst stanj $g_A(E)$ in $g_D(E)$, izračunamo najprej ločeno prispevke posameznih vrst stanj. Splošno lahko zapišemo:

$$n_t = \int_{E_v}^{E_c} g_A(E) f_A(E) dE \quad (2)$$

$$p_t = \int_{E_v}^{E_c} g_D(E) (1 - f_D(E)) dE \quad (3)$$

Zanimajo nas razmere izven termičnega ravnovesja, zato za verjetnosti zasedenosti f_A in f_D ne moremo uporabiti Fermi - Diracove porazdelitve. Pomagamo si s sklepanjem, da morajo biti v stacionarnem stanju neto rekombinacije in generacije elektronov enake neto rekombinacijam in generacijam vrzeli, bodisi skupno za vsa stanja, bodisi ločeno za vsako vrsto stanj posebej.

$$dG_n - dR_n = dG_p - dR_p \quad (4)$$

Iz tega pogoja lahko izrazimo verjetnost zasedenosti f_t , ki velja tudi izven termičnega ravnovesja.

$$f_t = \frac{\sigma_n v_{thn} n \sigma_p v_{thp} p_1}{\sigma_n v_{thn} (n + n_1) + \sigma_p v_{thp} (p + p_1)} \quad (5)$$

Pri zapisu izrazov za dG in dR smo izhajali iz SRH zakonitosti.

σ_n in σ_p sta prereza ujetja elektronov in vrzeli, V_{th} je termična hitrost, n_1 in p_1 pa sta odvisna od intrinzične koncentracije n_i in lege stanj znotraj mobilnostne reže.

Pri analizah, ki jih zasledimo v literaturi, največkrat predpostavljamo, da je termična hitrost enaka za vse proste nosilce, prerez ujetja pa je za elektrone in vrzeli različen in prav tako močno odvisen od vrste stanj.

Pri izračunu koncentracij ujetih nosilcev v posamezne vrste stanj se pojavijo težave še zlasti pri izračunu koncentracij ujetih nosilcev naboja v dovoljena energijska stanja defektov, kot so npr. bingljajoče vezi, ki vnašajo v mobilnostno režo po dve stanji in je gostota, oz. vrsta aktivnih stanj odvisna od stopnje zasedenosti. Tako je npr. pri bingljajoči vezi s pozitivno korelacijsko energijo gornje stanje lahko zasedeno le, če je zasedeno spodnje stanje, to pa je aktivno le, če je zgornje stanje nezasedeno. To je posledica močnega medsebojnega elektrostatičnega vpliva nabojev in zakonov kvantne mehanike.

Gostota bingljajočih vezi s pozitivno korelacijsko energijo, ki imajo spodnje energijske nivoje pri energiji E , zgornje pa pri $E + U_{ef}$ je enaka vsoti pozitivno nabitih, nevtralnih in negativno nabitih vezi:

$$N_t(E) = N_{+1}(E) + N_0(E) + N_{-1}(E + U_{ef}). \quad (6)$$

Nevtralne in pozitivno nabite bingljajoče vezi predstavljajo donorska stanja.

$$g_{DB}(E) = N_{+1}(E) + N_0(E). \quad (7)$$

Vlogo akceptorskih stanj pa igrajo nevtralne in negativno nabite vezi

$$g_{AB}(E + U_{ef}) = N_0(E + U_{ef}) + N_{-1}(E + U_{ef}). \quad (8)$$

Gostoto ujetih vrzeli na energijski interval v donorska stanja izračunamo po enačbi

$$p_{tBE}(E) = g_{DB}(E) (1 - f_{DB}(E)) = N_{+1}(E) = (N_{+1}(E) + N_0(E)) (1 - f_{DB}(E)). \quad (9)$$

Gostoto ujetih elektronov na energijski interval v akceptorska stanja pa podaja naslednja enačba

$$n_{tBE}(E) = g_{AB}(E + U_{ef}) f_{AB}(E + U_{ef}) = N_{-1}(E + U_{ef}) = (N_0(E + U_{ef}) + N_{-1}(E + U_{ef})) f_{AB}(E + U_{ef}). \quad (10)$$

Iz gornjih enačb lahko izrazimo gostoto ujetih elektronov in vrzeli na energijski interval v odvisnosti od gostote $N_t(E)$ in verjetnosti zasedenosti $f_{DB}(E)$ ter $f_{AB}(E + U_{ef})$

$$p_{tBE} = N_t \frac{(1 - f_{DB})(1 - f_{AB})}{1 - f_{AB} + f_{AB}f_{DB}} \quad (11)$$

$$n_{tBE} = N_t \frac{f_{AB}f_{DB}}{1 - f_{AB} + f_{AB}f_{DB}} \quad (12)$$

Kot smo že spoznali, vnašajo bingljajoče vezi s pozitivno korelacijsko energijo stanja blizu sredine mobilnostne reže. Zaradi nepravilnosti v strukturi zgradbi prihaja do stresa stanj okrog vrha in potek stanj običajno matematično opišemo z Gaussovo porazdelitvijo. Celotno koncentracijo ujetih elektronov in vrzeli v stanja bingljajočih vezi s pozitivno korelacijsko energijo dobimo z integracijo znotraj mobilnostne reže:

$$p_{tBp} = \int_{E_v}^{E_c} p_{tBE}(E) dE \quad (13)$$

$$n_{tBp} = \int_{E_v}^{E_c} n_{tBE}(E) dE. \quad (14)$$

Pri defektih z negativno korelacijsko energijo so razmere mnogo bolj nejasne. Tu gre za pare $T_3^+ T_3^-$. Na podoben način kot defektov s pozitivno korelacijsko energijo jih ni možno obravnavati. V analizo smo jih vključili tako, da smo predpostavili, da delujejo T_3^+ centri kot čista donorska stanja, T_3^- pa kot čista akceptorska stanja. Ob tem pa smo zanemarili medsebojno sklopitev.

Celotna koncentracija ujetih elektronov in vrzeli je enaka vsoti ujetih nosilcev v posamezne vrste stanj

$$n_t = n_{tA} + n_{tBp} + n_{tBn} \quad (15)$$

$$p_t = p_{tD} + p_{tBp} + p_{tBn} + p_{tBD} \quad (16)$$

kjer je:

n_{tA} ...koncentracija ujetih elektronov v akceptorska stanja pod prevodnim pasom

n_{tBp} ...koncentracija ujetih elektronov v zgornja stanja bingljajočih vezi s pozitivno korelacijsko energijo

n_{tBn} ...koncentracija T_3^- defektov z negativno korelacijsko energijo

p_{tD} ...koncentracija ujetih vrzeli v

donorska stanja nad valenčnim pasom

p_{tBD} ...koncentracija ujetih vrzeli v donorska stanja deformiranih vezi okrog bingljajočih vezi

p_{tBp} ...koncentracija ujetih vrzeli v spodnja stanja bingljajočih vezi s pozitivno korelacijsko energijo

p_{tBn} ...koncentracija T_3^+ defektov z negativno korelacijsko energijo.

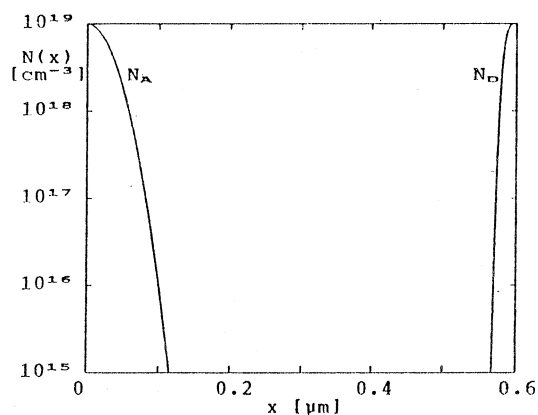
S tem, ko smo nakazali pot za izračun n_t in p_t , lahko preidemo k diskretizaciji Poissonove enačbe. To je nelinearna diferencialna enačba drugega reda. Da je ustrezna za učinkovito numerično reševanje, je potrebno izvesti najprej linearizacijo z razvitjem v Taylorjevo vrsto. Poseben problem in pomembna razlika v primerjavi z monokristalnim silicijem nastopi pri izračunu odvoda $d\rho/ds$, $\sigma\alpha\varphi$ in $\rho(\xi, s)$ $\nu\alpha\sigma\tau\omega\pi\alpha\tau\alpha$ $\kappa\omega\chi\epsilon\tau\rho\alpha\chi\iota\phi\iota$ ν_t in p_t , pri katerih je odvisnost od potenciala preveč zapletena, da bi bilo smiselno analitično odvajanje. Pri izračunu numeričnega odvoda smo uporabili izboljšano sekantno metodo.

Pri diskretizaciji kontinuitetnih enačb smo uporabili metodo, ki vključuje Bernoullijevo funkcijo. S tem je znotraj posameznih segmentov strukture upoštevana eksponencialna odvisnost koncentracij elektronov in vrzeli od potenciala. Razmere v segmentih strukture so tako realneje opisane, izboljšana je točnost računanja in hitrost konvergence. Prednost te metode je tudi v tem, da nad rekombinacijskim členom znotraj segmentov ni potrebna integracija, kot pri večini ostalih metod. Vrednost rekombinacijskega člena se namreč znotraj segmentov lahko znatno spreminja, kar prinese pri izračunu numeričnega integrala precejšno napako.

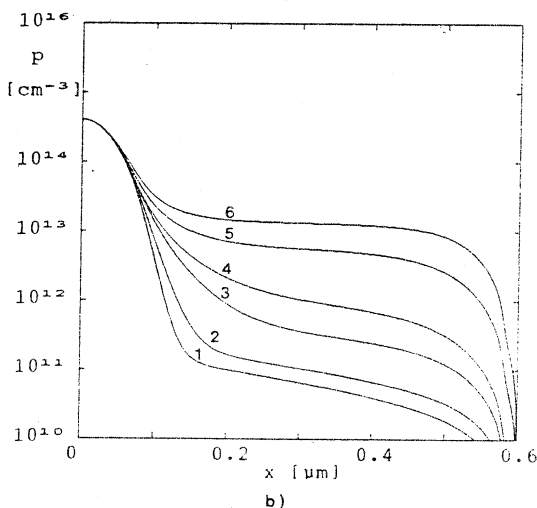
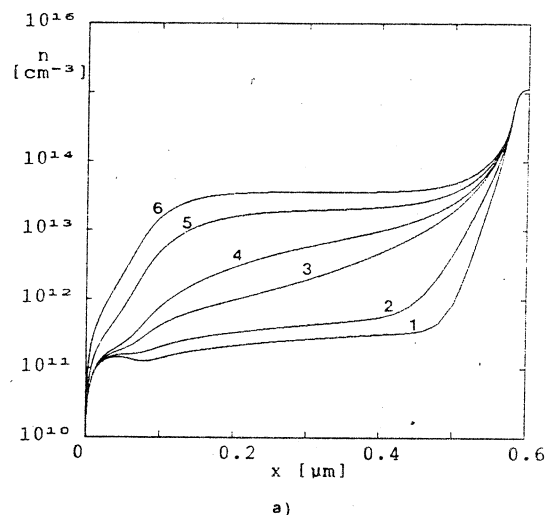
3. ANALIZA OSVETLJENE p-i-n STRUKTURE a-Si:H SONČNE CELICE

Kot primer smo analizirali p-i-n strukturo amorfnega silicija, prikazano na sliki 3.

Takšna struktura je tipična pri depoziciji a-Si:H na stekleno podlago, kjer najprej deponiramo p^+ plast z dodajanjem diborana. Zaradi prerazporeditve šibko vezanih borovih atomov p-i prehod ni stopničast. Analizirali smo osvetljeno strukturo. Svetloba jakosti enega sonca AM1 je vpadala skozi steklo na p^+ plast. Slika 4 prikazuje krajevni potek koncentracij prostih elektronov in vrzeli pri različnih zunanjih prednapetostih. Te koncentracije so precej nižje, kot jih srečamo pri monokristal-

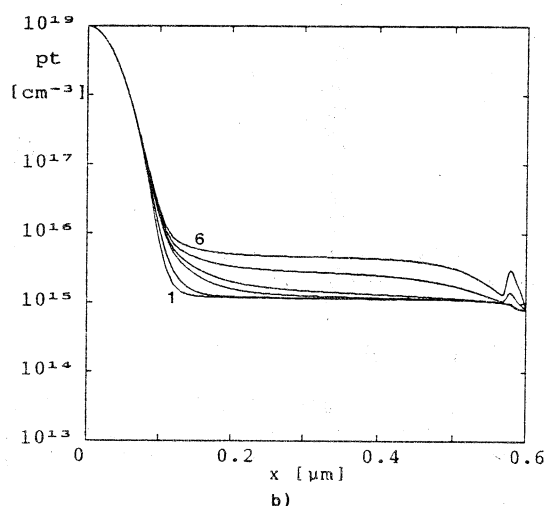
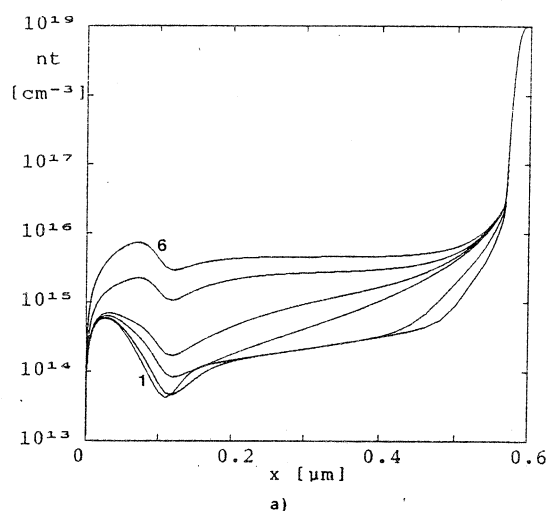


Slika 3: krajevna porazdelitev koncentracije primesi v obaravnani p-i-n strukturi a-Si:H SC



Slika 4: krajevni potek koncentracij:
a) prostih elektronov
b) prostih vrzeli pri različnih zunanjih prednapetostih

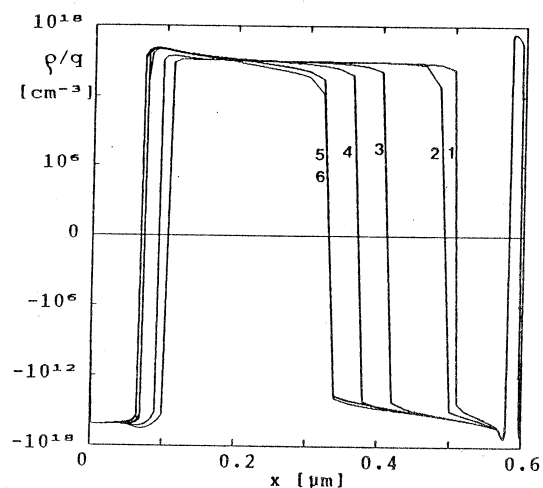
nem siliciju. Prvi vzrok temu je nižja intrinzična koncentracija n_i zaradi širšega prepovedanega pasu v amorfnem siliciju, ki je tipično 1.5-2.0 eV (v obravnavanem primeru 1.8V). Drugi razlog pojasnjuje slika 5: večina prostih nosilcev je ujetih v lokalizirana stanja znotraj mobilnostne reže.



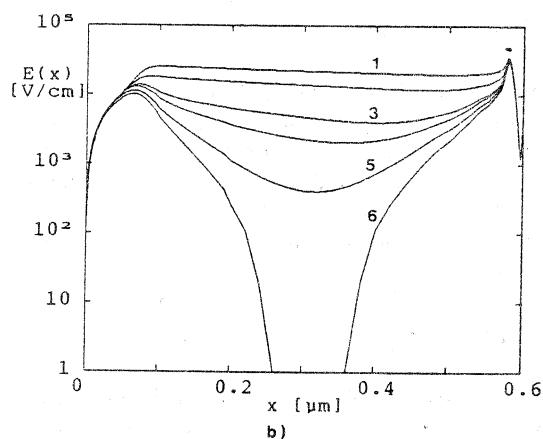
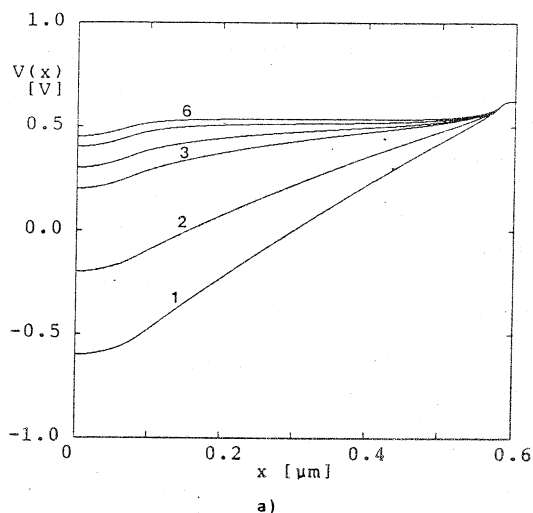
Slika 5: krajevni potek koncentracij:
 a) ujetih elektronov v lokalizirana stanja
 b) ujetih vrzeli v lokalizirana stanja pri različnih zunanjih prednapetostih

Na sliki 6 je prikazan potek prostorskega naboja v p-i-n strukturi. Glavni prispevek k prostorskemu naboju, še posebej v i-plasti, imajo prav lokalizirana stanja. Negativen prostorski naboj v p^+ plasti in pozitiven v n^+ plasti sta zelo velika in posledica tega je močno vgrajeno električno polje (slika 7) skozi celotno p-i-n strukturo. To igra pomembno vlogo pri prehajanju generiranih prostih nosilcev s kratko življenjsko dobo skozi strukturo.

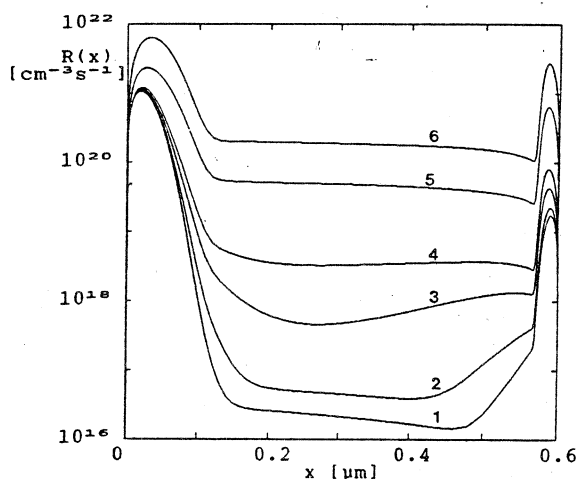
Posledica strukturnih napak v a-Si:H je tudi izredno visoka stopnja rekombinacij (slika 8), ki še posebej narastejo v dopiranih plasteh, kjer se tudi gostota dovoljenih energijskih stanj v mobilnostni reži še dodatno poveča. Pri analizi je bila skladno



Slika 6: prostorski naboj v osvetljeni p-i-n a-Si:H strukturi pri različnih zunanjih prednapetostih



Slika 7: krajevni potek:
 a) potenciala
 b) električnega polja v osvetljeni p-i-n a-Si:h strukturi pri različnih zunanjih prednapetostih



Slika 8: krajevni poteki rekombinacij

z eksperimentalnimi ugotovitvami upoštevana korenska odvisnost naraščanja gostote stanj od dodanih primesi

$$g_{\max}(N) = g_{\max}(N=0) (1 + K_t N^{1/2}), \quad (17)$$

kjer je

$g_{\max}$...maksimalna gostota določene vrste stanj

N ...koncentracija primesi, ki vplivajo na povečanje gostote stanj

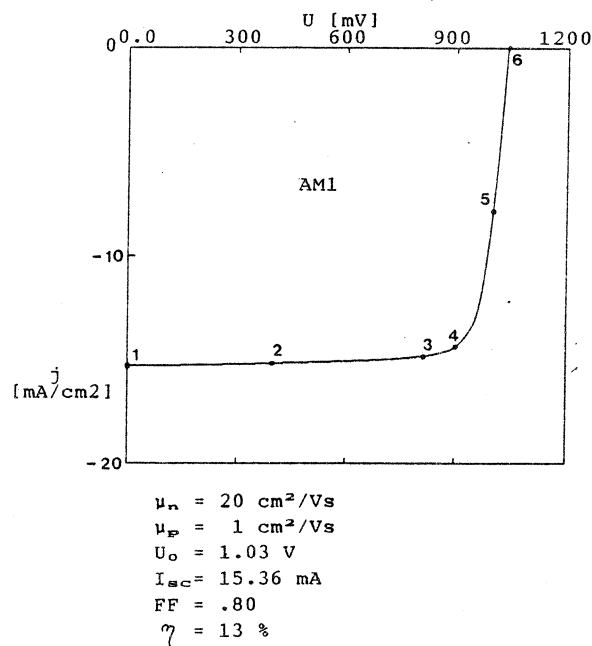
K_t ...izbrana konstanta.

Konstanta K_t je izbrana tako, da se pri koncentraciji primesi v razredu $N = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, maksimalna gostota stanj defektov poveča za približno 100-krat, maksimalna gostota stanj repov pa 10-krat.

Rezultat celotne analize osvetljene p-i-n strukture je I-U karakteristika (slika 9). Napetost odprtih sponk je pri amorfnih silicijevih sončnih celicah višja kot pri monokristalnih, kratkostični tok pa je nižji. Zaradi strukturnih napak v a-Si:H je polnilni faktor slabši, razlog za nizek izkoristek je tudi v slabši gibljivosti nosilcev.

4. ZAKLJUČEK

V predstavljenem delu so podane predvsem nekatere posebnosti, oz. razlike, ki se pojavijo v primerjavi s podobnimi analizami pri monokristalnem siliciju.



Slika 9: I-U karakteristika osvetljene (AM1) p-i-n strukture a-Si:H sončne celice

5. LITERATURA

- (1) M.Hack and M.Shur, J.Appl.Phys. 58, 997-1020, (1985)
- (2) J.I.Pankove (Volume Editor), Semiconductors and semi-metals, Volume 21, Hydrogenated Amorphous Silicon, Part A-C, (1984)
- (3) P.Viscor, Journal of Non-Crystalline Solids, vol. 77&78, 37-46, (1985)
- (5) J.Robertson, J. of Non-Crystalline Solids, vol, 77&78, 37-46, (1985)
- (6) D.Adler, Solar Cells 21, 439-448, (1987)
- (7) F.Vaillant and D.Jousse, Mat.Res.Soc.Symp., Proc.Vol. 70, 143-147, (1986)
- (8) S.Selberherr, Analysis and Simulation of Semiconductor Devices, Springer-Verlag Wien New York, (1984)
- (9) F.Smole, J.Furlan, S.Amon, Zbornik referatov XV. jugoslovanskega posvetovanja o mikroelektroniki, Banja Luka, 277-284, (1987)
- (10) F.Smole, J.Furlan, S.Amon, Zbornik referatov XVI. jugoslovanskega posvetovanja o mikroelektroniki, Zagreb, 437-44

mag.F. Smole, dipl.ing
 Prof.dr. J. Furlan, dipl.ing.
 Prof.dr.S. Amon, dipl.ing.
 D. Senčar, dipl.ing.
 Fakulteta za elektrotehniko,
 Laboratorij za nelinearne elemente,
 Tržaška 25, Ljubljana