

Effizienzlimitierende Rekombinationsprozesse in amorph/kristallinen und polykristallinen Siliziumsolarzellen

vorgelegt von
Diplom-Physiker
Caspar Leendertz
aus Berlin

Von der Fakultät II - Mathematik und
Naturwissenschaften
der Technischen Universität Berlin
zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor der Naturwissenschaften
- Dr. rer. nat. -

vorgelegte Dissertation

Promotionsausschuss:

Vorsitzender: Prof. Dr. Michael Lehmann
Gutachter: Prof. Dr. Mario Dähne
Gutachter: Prof. Dr. Bernd Rech
Gutachter: Prof. Dr. Jean-Paul Kleider

Tag der wissenschaftlichen Aussprache:

Berlin 2011

D83

Inhaltsverzeichnis

| | |
|---|-----------|
| 1. Einleitung | 1 |
| 2. Theoretische Grundlagen | 7 |
| 2.1. Potentialverteilung und Transport im Halbleiter | 7 |
| 2.1.1. Ladungsträgerdichten und Poissongleichung | 7 |
| 2.1.2. Kontinuitätsgleichungen und Transport | 12 |
| 2.1.3. Demberspannung | 14 |
| 2.2. Rekombinationsprozesse | 15 |
| 2.2.1. Intrinsische Rekombinationsprozesse | 15 |
| 2.2.2. Rekombination über Defekte | 17 |
| 2.2.3. Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit | 22 |
| 2.3. Ladungsträgerlebensdauer | 23 |
| 2.3.1. Ladungsträgerlebensdauer im Volumen | 23 |
| 2.3.2. Effektive Ladungsträgerlebensdauer | 25 |
| 2.3.3. Implizite Leerlaufspannung | 27 |
| 2.4. Numerische Bauteilsimulation | 29 |
| 2.4.1. Optische Rechnung | 29 |
| 2.4.2. Elektrische Rechnung | 30 |
| 3. Grundlagen zu Solarzellenmaterialien und -konzepten | 37 |
| 3.1. Materialeigenschaften | 37 |
| 3.1.1. Kristallines Silizium | 38 |
| 3.1.2. Amorphes Silizium | 39 |
| 3.1.3. Polykristallines Silizium | 45 |
| 3.2. Solarzellenkonzepte | 48 |
| 3.2.1. Amorph/kristalline Heterostruktursolarzelle | 48 |
| 3.2.2. Polykristalline Dünnschichtsolarzelle | 53 |
| 4. Experimentelle Methoden | 57 |
| 4.1. Photoleitfähigkeit zur Bestimmung der Ladungsträgerlebensdauer . . . | 57 |
| 4.1.1. Quasi-statische/transiente Photoleitfähigkeit (QSSPC/PCD) . | 58 |
| 4.1.2. Hochsensitive PCD für dünne Schichten (HS-PCD) | 60 |
| 4.2. Oberflächenphotospannung (SPV) | 66 |
| 4.2.1. Messaufbau und Funktionsprinzip | 66 |
| 4.2.2. SPV Datenaufbereitung | 68 |
| 4.2.3. Bestimmung der Ladungsträgerlebensdauer aus SPV-Transienten | 72 |
| 4.3. Zusammenfassung der Ergebnisse | 80 |

| | |
|---|------------|
| 5. Modelle zur Berechnung der effektiven Ladungsträgerlebensdauer | 83 |
| 5.1. Semi-analytische Berechnung von Ladungsträgerlebensdauern | 83 |
| 5.1.1. Oberflächenrekombination | 84 |
| 5.1.2. Effektive Lebensdauer | 90 |
| 5.1.3. Effective Lifetime Analysis Tool (ELifAnT) | 92 |
| 5.2. Numerische Simulation von Lebensdauerermessungen mit AFORS-HET | 93 |
| 5.3. Simulationsstudie zum Einfluss der physikalischen Prozesse auf die effektive Lebensdauer | 96 |
| 5.3.1. Einfluss der injektionsabhängigen Defektumladung | 96 |
| 5.3.2. Einfluss des DRM-Effekts | 99 |
| 5.3.3. Parameterstudie zur Modellvalidierung | 102 |
| 5.4. Simulationsstudie zur Untersuchung der Anwendbarkeit der CA-PCD Methode | 104 |
| 5.4.1. Annahme einer effektiver Festladung | 105 |
| 5.4.2. Berücksichtigung der injektionsabhängigen Ladung | 107 |
| 5.5. Zusammenhang zwischen Grenzflächenpassivierung und Leerlaufspannung | 108 |
| 5.6. Zusammenfassung der Ergebnisse | 118 |
| | |
| 6. Passiviereigenschaften von a-Si:H/c-Si-Schichtsystemen für HIT-Solarzellen | 121 |
| 6.1. Untersuchung des piN-Schichtsystems | 122 |
| 6.1.1. Probedetails der piN-Strukturen | 122 |
| 6.1.2. CA-PCD-Charakterisierung der i-Pufferschicht | 123 |
| 6.1.3. CA-PCD und SPV Charakterisierung des piN-Schichtsystems | 125 |
| 6.1.4. Einfluss der ZnO Abscheidung auf das piN-Schichtsystem | 129 |
| 6.1.5. Diskussion der Ergebnisse zum piN-Schichtstapel | 129 |
| 6.2. Untersuchung des niP-Schichtsystems | 135 |
| 6.2.1. Probedetails der niP-Strukturen | 135 |
| 6.2.2. CA-PCD und SPV Charakterisierung des niP-Schichtstapels | 135 |
| 6.2.3. Diskussion zur piN-Struktur | 138 |
| 6.3. Vergleich des niP- und piN-Schichtsystems | 140 |
| 6.4. Zusammenfassung der Ergebnisse | 140 |
| | |
| 7. Rekombinationsprozesse in der poly-Si-Dünnschichtsolarzelle | 143 |
| 7.1. Ein einfaches Modell für die poly-Si-Zelle | 143 |
| 7.2. Modellanpassung anhand von j-V-Kennlinien | 146 |
| 7.2.1. Einfluss der Modellparameter auf die j-V-Kennlinie | 146 |
| 7.2.2. J-V-Kennlinien der Minimodule | 148 |
| 7.2.3. Diskussion zur Analyse der j-V-Kennlinien | 149 |
| 7.3. Ladungsträgerlebensdauer im poly-Si-Absorber | 152 |
| 7.3.1. HS-PCD-Messungen der Ladungsträgerlebensdauer | 153 |
| 7.3.2. Simulationsstudie zur Lebensdauerermessung | 155 |
| 7.3.3. Diskussion zur Ladungsträgerlebensdauer | 157 |
| 7.4. Simulationsstudie zur Limitierung der Leerlaufspannung | 158 |
| 7.4.1. Dotierung und Defekte des Absorbers | 158 |

| | |
|---|---------------|
| 7.4.2. Einfluss der Kontaktschichten | 160 |
| 7.5. Vergleich der a-Si:H/c-Si - mit der poly-Si-Solarzelle | 161 |
| 7.6. Zusammenfassung der Ergebnisse | 163 |
| 8. Zusammenfassung und Ausblick | 165 |
| 8.0.1. Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse | 165 |
| 8.0.2. Ausblick | 169 |
| A. Experimentelle Methoden | III |
| B. Simulationsstudie zur Ladungsträgerlebensdauer | VII |
| C. Strom-Spannungs-Kennlinien der poly-Si Zelle | XXI |
| Abbildungsverzeichnis | XXVII |
| Tabellenverzeichnis | XXXI |
| Abkürzungsverzeichnis | XXXIII |
| Literaturverzeichnis | XLI |
| Publikationsliste | LIII |
| Danksagung | LV |

1. Einleitung

In Hinblick auf die ökologischen, ökonomischen und politischen Konsequenzen des Klimawandels ist es von großer Wichtigkeit, alternative Energiequellen zu den fossilen Brennstoffen zu finden. Auch die atomare Energiegewinnung ist mit großen Risiken für Menschen und Umwelt verbunden, wie die aktuelle Katastrophe in Japan in drastischer Weise deutlich macht.

Neben alternativen Energiequellen aus Windkraft, Wasserkraft und Solarthermie wird dabei viel Hoffnung in die Photovoltaik gesetzt. So erfährt die weltweite Herstellung von Photovoltaikmodulen in den letzten Jahren ein exponentielles Wachstum und hat sich in 2010 auf eine Jahresproduktion von >27 GW gesteigert [1] (siehe Abb. 1.1). Dabei lag die Wachstumsrate zwischen 2009 und 2010 bereits bei knapp 120% [1]. Trotz dieses rasanten Wachstums ist die Stromproduktion mit Photovoltaikanlagen gegenüber den fossilen Brennstoffen noch nicht wettbewerbsfähig und somit auf staatliche Subventionen angewiesen. Es ist folglich von großer Bedeutung, die Produktionskosten zu senken und die Wirkungsgrade der Solarzellen weiter zu erhöhen.

Bis heute werden in über 80% der Solarzellen mono- oder multikristalline Siliziumwafer als Absorber eingesetzt (siehe Abb. 1.2). Zu alternativen Konzepten, die dünne Absorberschichten einsetzen und nicht mehr auf Siliziumwafer angewiesen sind, gehören Technologien auf Basis von: Silizium (amorphes Silizium a-Si, micromorphes Silizium), Cadmiumtellurid und Chalkopyritverbindungen. Diesen Dünnschicht-Solarzellen, die in den letzten zehn Jahren einen schwankenden weltweiten Produktionsanteil zwischen 5% und 20% (siehe Abb. 1.2) hatten, wird ein großes Potenzial zur Kostensenkung zugeschrieben.

Das entscheidende Ziel der anwendungsorientierten Solarzellenforschung ist es folglich, Zellkonzepte mit hohen Wirkungsgraden bei möglichst geringen Kosten zu finden. In dieser Arbeit werden zwei Solarzellentypen auf Siliziumbasis untersucht, die am HZB entwickelt werden. Dabei besteht das Ziel darin, ein genaueres Verständnis für die effizienz-limitierenden Prozesse zu gewinnen und mögliche Optimierungsstrategien zu finden. Im Zentrum dieser Arbeit steht die Untersuchung der Rekombinationsprozesse, die im Allgemeinen die Leerlaufspannung limitieren. Einerseits wird eine Technologie untersucht, bei der als Absorber ein kristalliner Siliziumwafer eingesetzt wird und bei der der Emitter, sowie die Rückseitenkontaktierung aus dünnen amorphen Siliziumschichten besteht (a-Si:H/c-Si-Zelle). Dieses Zellkonzept ermöglicht hohe Wirkungsgraden von 23% und Leerlaufspannungen von 730 mV bei moderaten Kosten und ist somit bereits kommerziell erfolgreich [2]. Andererseits wird eine Zelle vorgestellt, deren Absorber aus einer dünnen poly-kristallinen Siliziumschicht (poly-Si) besteht und dadurch das Potenzial besitzt, wesentlich günstiger produziert werden zu können. Für eine erfolgreich Kommerzialisierung ist es allerdings wichtig, die Wirkungsgraden und Leerlaufspannungen dieser poly-Si-Dünnschichtzelle, die bisher bei

Weltweite Solarzellenproduktion von 1999 bis 2010

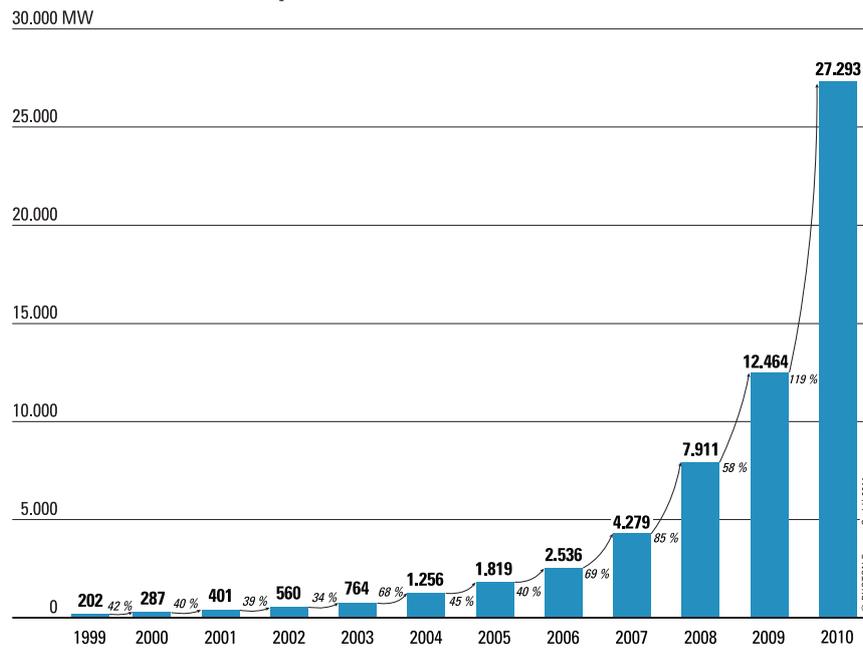


Abbildung 1.1.: Jährliche Solarzellenproduktion in Einheiten der Leistung unter Standard-Testbedingungen. Die Abbildung ist der Zeitschrift Photon International entnommen [1].

knapp 10% und 500 mV liegen [3], deutlich zu erhöhen.

Während die Herausforderung bei der Erhöhung der Leerlaufspannung der a-Si:H/c-Si-Zelle insbesondere darin besteht, die Rekombination über Defekte an den Grenzflächen zu Emitter und Rückkontakt zu minimieren, können sich bei der poly-Si-Zelle auch Defekte, wie z.B. Korngrenzen, in der Absorberschicht selber limitierend auswirken. Ein experimenteller Zugang zur Untersuchung der Rekombinationsprozesse besteht in der Messung der effektiven Ladungsträgerlebensdauer in Abhängigkeit der durch Beleuchtung generierten Überschussladungsträger $\tau(\Delta n)$ -Kurve. Zudem ermöglicht eine detaillierte Analyse von Strom-Spannungs-Kennlinien (Hell und Dunkel) Informationen zu den Rekombinationsprozesse zu gewinnen. Im Einzelnen erfordern die Optimierung und die experimentelle Untersuchung der a-Si:H/c-Si- und der poly-Si-Zelle unterschiedliche Strategien.

Bei der Optimierung der a-Si:H/c-Si-Zelle ist die Reduktion der Grenzflächenrekombination der Schlüssel zu hohen Leerlaufspannungen. Dabei wird eine defektarme nominell intrinsische a-Si(i) Pufferschicht eingesetzt, um die elektronischen Defekte an der Wafergrenzfläche zu minimieren, während eine dotierte, aber defektreichere a-Si:H(n,P) Emitterschicht eine Bandverbiegung im Wafer erzeugen. Die Leerlaufspannung dieses Systems wird durch die Rekombination von Ladungsträgern an der a-Si:H/c-Si-Grenzfläche limitiert. Die Rekombinationsrate hängt dabei von der Grenzflächendefektdichte und der Bandverbiegung ab und ergibt sich somit aus dem Zusammenspiel von Defekt- und Feldeffektpassivierung. Die Optimierung dieses Schichtstapels aus dotierten und intrinsischen amorphen Schichten wird in dieser Arbeit detailliert untersucht. Zur Charakterisierung der Grenzfläche werden Messungen der

Anteile der verschiedenen Zelltechnologien (in Prozent)

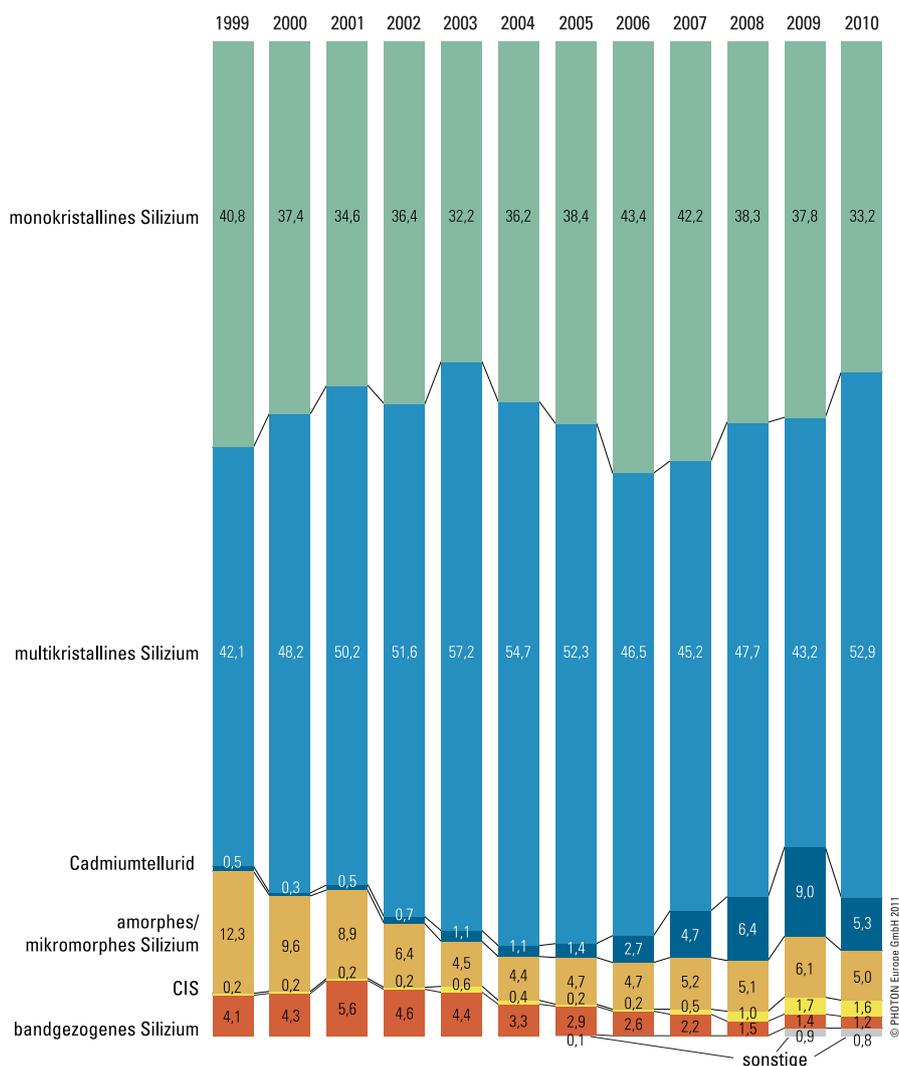


Abbildung 1.2.: Anteil der verschiedenen Solarzellentechnologien an der jährlichen Solarzellenproduktion. Die Abbildung ist der Zeitschrift Photon International entnommen [1].

Ladungsträgerlebensdauer und der Bandverbiegung eingesetzt. Zur experimentelle Bestimmung der $\tau(\Delta n)$ -Kurve wird die quasi-statischen und transienten Photoleitfähigkeit (QSSPC/PCD) eingesetzt. Es wird ein semi-analytisches Modell entwickelt, das es ermöglicht die experimentelle $\tau(\Delta n)$ -Kurve auszuwerten und so Materialparameter der Grenzfläche zu bestimmen. Diese computer-gestützte Auswertung der Photoleitfähigkeit (computer-aided PCD, CA-PCD) erlaubt es zwischen Defekt- und Feldeffektpassivierung zu unterscheiden und auf diese Weise Grenzflächendefektdichten zu bestimmen. Das entwickelte Modell berücksichtigt sowohl die relevanten Rekombinationsprozesse im Volumen (Shockley-Read-Hall- und Augerrekombination) als auch die Rekombination über Defekte durch offene Si-Bindungen (amphotere De-

fekte) an der a-Si:H/c-Si-Grenzfläche. Darüber hinaus wird ein Konzept vorgestellt, um den Ladungszustand der a-Si:H Defekte in Abhängigkeit von der Lage des Fermi-niveaus zu bestimmen. Daraus kann die injektionsabhängige Bandverbiegung berechnet werden und schließlich ein detailliertes Modell zur Beschreibung der Feldeffektpassivierung abgeleitet werden. Durch diese theoretische Beschreibung der Ladungsträgerlebensdauer in Solarzellenstrukturen können die physikalischen Prozesse, die die $\tau(\Delta n)$ -Kurve in den verschiedenen Injektionsniveaus (Δn) bestimmen, identifiziert werden. Darüber hinaus kann der Zusammenhang zwischen Passiviermechanismen und Leerlaufspannung detailliert analysiert werden. Die CA-PCD Methode ermöglicht es die Limitierung der Leerlaufspannung durch Rekombination über Defekte an der Grenzfläche im Volumen oder durch Augerrekombination in Abhängigkeit der Parameter des Schichtstapels zu unterscheiden.

Im Gegensatz zur a-Si:H/c-Si-Zelle, deren Details in der Literatur schon zu großen Teilen beschrieben werden, ist die poly-Si-Dünnschichtsolarzelle ein System mit vielen Unbekannten. Um ein einfaches Modell der Zelle zu entwickeln, werden deshalb zunächst Strom-Spannungs-Kennlinien mit Hilfe von numerischen Simulationen analysiert. Es zeigt sich, dass es so möglich ist, ein stark vereinfachendes Modell zur numerischen 1D Simulation der Zelle zu entwickeln, das das Zellverhalten unter Variationen verschiedener Absorbereigenschaften simulieren kann. Durch Anpassung des Modells an experimentelle Strom-Spannungs-Kennlinien ist es möglich, effektive Defektdichten im Absorber zu bestimmen. Mit diesem einfachen Simulationsmodell der Zelle werden Sensitivitätsanalysen durchgeführt, um zu untersuchen, wie sich die Zelle mit Hinblick auf die Leerlaufspannung optimieren lässt. Die Charakterisierung von dünnen poly-Si-Absorberschichten mit Hilfe von Messungen der Ladungsträgerlebensdauer ist wesentlich anspruchsvoller als für wafer-basierte Zellen. Bei QSSPC/PCD-Messungen ist vor allem die geringe Signalstärke aufgrund der geringen Schichtdicke ein Problem. Im Rahmen der Arbeit wird deshalb ein hochempfindlicher PCD Aufbau (HS-PCD) zur Eignung als Messaufbau für dünne Schichten untersucht. Mit der Messung der transienten Oberflächenbandverbiegung wird eine weitere Methode vorgestellt, mit der sich potenziell Ladungsträgerlebensdauern in dünnen Schichten bestimmen lassen. Die Ergebnisse der Messung der Ladungsträgerlebensdauer werden mit Hilfe numerischer Simulationen analysiert.

Im ersten Kapitel dieser Arbeit werden die theoretischen Grundlagen erarbeitet, um das semi-analytische Modell zur Beschreibung injektionsabhängigen Ladungsträgerlebensdauer entwickeln zu können und ein Fundament für die Grundlagen der numerischen Simulationen zu erarbeiten.

Im Kapitel 2 werden die Grundlagen der untersuchten Solarzellenkonzepte und die eingesetzten Materialien vorgestellt. Der Kenntnisstand zu kristallinen, amorphen und poly-Kristallinen Silizium in der Literatur wird zusammengetragen, um so die für die Modellierungen nötigen physikalischen Modelle zu identifizieren und die nötigen Materialparameter zusammenzutragen.

Im Kapitel 3 werden die experimentellen Methoden beschrieben. Die Grundlagen des QSSPC/PCD- und SPV-Methode werden dargestellt. Darüber hinaus werden eine neue numerische Methode sowie eine analytische Näherung zur Berechnung der Ladungsträgerlebensdauer aus SPV-Transienten vorgestellt. Zudem wird der HS-PCD-Aufbau zur Messung der dünnen poly-Si-Absorberschichten diskutiert.

Im Kapitel 4 wird das semi-analytische Modell zur Berechnung der effektiven Ladungsträgerlebensdauern entwickelt. Dieses Modell und seine Anwendung stellen einen Schwerpunkt der Arbeit dar. Mithilfe von Modellrechnungen werden Feldeffekt- und Defektpassivierung sowie ihr Einfluss auf die implizite Leerlaufspannung in a-Si:H/c-Si-Strukturen diskutiert.

Im Kapitel 5 werden die Emitterkontaktschichten der a-Si:H/c-Si-Solarzelle untersucht. Die Lebensdauerermessungen werden mit dem semi-analytischen Modell ausgewertet, so dass die Mechanismen, die die Leerlaufspannung limitieren identifiziert werden können.

Im letzten Kapitel wird die Dünnschichtsolarzelle mit poly-Si-Absorberschicht untersucht. Durch Analyse von Strom-Spannungs-Kennlinien und Lebensdauerermessungen sollen auch hier die elektronischen Defekte untersucht werden, die die Leerlaufspannung der Zelle bestimmen.

2. Theoretische Grundlagen

2.1. Potentialverteilung und Transport im Halbleiter

In diesem Abschnitt werden mit der Poisson- und Kontinuitätsgleichung die Differentialgleichungen vorgestellt, die die Potentialverteilung und den Ladungsträgertransport unter Berücksichtigung von Rekombinations- und Generationsraten in Halbleitern beschreiben.

Es werden Ansätze für analytische Näherungslösungen diskutiert, die im Laufe der Arbeit sowohl für die Auswertung der Lebensdauermessungen, als auch für die Auswertung der Messung der Oberflächenphotospannung benötigt werden. Insbesondere bilden die hier eingeführten Gleichungen die Grundlage des in Kapitel 5 vorgestellten Modells zur semi-analytischen Berechnung der injektionsabhängigen Lebensdauer in a-Si:H/c-Si -Strukturen.

Neben den analytischen Lösungsansätzen wird hier auch die numerische Lösung des gekoppelten Differentialgleichungssystems aus Poissongleichung und den beiden Kontinuitätsgleichungen für Elektronen und Löcher vorgestellt. Dieser numerische Lösungsansatz bildet die Grundlage des im Rahmen der Arbeit vielfach eingesetzten Solarzellensimulators AFORS-HET .

2.1.1. Ladungsträgerdichten und Poissongleichung

Ladungsträger- und Ladungsdichte

Für die Ladungsträgerdichten im Halbleiter im thermodynamischen Gleichgewicht lassen sich analytische Gleichungen finden, wenn von der Fermibesetzungsfunktion zur Boltzmann-Näherung übergegangen wird [4]:

$$\begin{aligned}n_0 &= N_C \exp(-\beta(E_C - E_F)), \\p_0 &= N_V \exp(+\beta(E_V - E_F)), \\ \Rightarrow n_i^2 &:= n_0 \cdot p_0 = N_V \cdot N_C \exp(-\beta \cdot E_G).\end{aligned}\tag{2.1}$$

Die Konstante $\beta = \frac{1}{k_B \cdot T}$ ist durch die Boltzmannkonstante k_B und die Temperatur T gegeben. Die Größen N_C und N_V bezeichnen die effektiven Zustandsdichten der Bänder und E_C und E_V die Energieniveaus der Leitungs- und Valenzbandkante. Daraus ergibt sich dann die Bandlücke $E_G = E_C - E_V$. Die Fermienergieposition im Halbleitervolumen ist im Gleichgewicht E_F durch die Neutralitätsbedingung $\rho = 0$ bestimmt. Dabei setzt sich die Ladungsdichte ρ^1 aus den Ladungsträgerdichten in

¹Die Volumen- bzw. Flächenladungsdichte ρ bzw. Q wird im Folgenden als Dichte von Elementarladungen angegeben (Einheit: m^{-3} bzw. m^{-2}). Durch Multiplikation mit der Elementarladung e erhält man die eigentliche Ladungsdichte.

den Bändern n und p , aus den ionisierten Donator- und Akzeptorzuständen N_D^+ und N_A^- nahe der Bandkante und aus der Ladungsdichte ρ_D der Defekte zusammen [4]:

$$\rho = p - n + N_D^+ - N_A^- + \sum \rho_D(n, p). \quad (2.2)$$

Die Berechnung der Ladung in den Defekten ρ_D wird in Abschnitt 2.2 erläutert. Wird der Halbleiter durch eine äußere Anregung aus dem Gleichgewicht gebracht, so können sich erhöhte Ladungsträgerkonzentrationen $n = n_0 + \Delta n$ und $p = p_0 + \Delta p$ einstellen.² Es können dann quasi-Ferminiveaus für Elektronen E_{Fn} und Löcher E_{Fp} eingeführt werden, die das Einzelgleichgewicht der Ladungsträger beschreiben [4].³

$$\begin{aligned} n &= n_0 + \Delta n = N_C \exp(-\beta(E_C - E_{Fn})), \\ p &= p_0 + \Delta p = N_V \exp(+\beta(E_V - E_{Fp})). \end{aligned} \quad (2.3)$$

Poissongleichung

Die Poissongleichung beschreibt den Zusammenhang von elektrischem Potential $\varphi(x)$ und Ladungsdichte $\rho(x)$:

$$\frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} = -\frac{e}{\epsilon_0 \cdot \epsilon_r(x)} \rho(x). \quad (2.4)$$

Hier geht die Elementarladung e , sowie die elektrische Feldkonstante ϵ_0 und die Dielektrizitätskonstante ϵ_r ein. Die Poissongleichung mit den i. Allg. zeit- und ortsabhängigen Größen nimmt im Halbleiter mit Gl. (2.2) folgende Form an [4]:

$$\frac{\partial^2 \varphi(x, t)}{\partial x^2} = -\frac{e}{\epsilon_0 \cdot \epsilon_r(x)} \left(p(x, t) - n(x, t) + N_D^+ - N_A^- + \sum \rho_D(x, t) \right). \quad (2.5)$$

In dieser allgemeinen Form stellt die Poissongleichung eine Differentialgleichung dar, die bei der numerischen Halbleitersimulation gelöst werden muss, wie in Abschnitt 2.4 diskutiert wird. Ein in dieser Arbeit oft verwendeter Spezialfall, für den sich eine analytische Lösung finden lässt, wird im Folgenden beschrieben.

Oberflächenbandverbiegung

In Halbleiterstrukturen kommt es an der Oberfläche häufig zu einer Bandverbiegung. Um diese Situation zu berechnen, geht man von einer einseitig unendlichen Halbleiterschicht aus, an deren Oberfläche sich eine Festladung befindet. Unter der Annahme, dass die Ladung in den Defekten im Volumen zu vernachlässigen ist ($\rho_D = 0$) und dass die quasi-Ferminiveaus konstant sind, kann die Poissongleichung analytisch gelöst werden.[5]⁴ Dabei muss man sich zunächst klar machen, dass sich die lokalen Ladungsträgerdichten $n(x)$ und $p(x)$ als Funktion des Potentialverlaufs $\varphi(x)$ im

² Δn wird in dieser Arbeit mit Überschussladungsträgerdichte oder Injektion bzw. Injektionsniveau bezeichnet

³Diese Näherung ist gültig, solange die thermische Relaxation der Ladungsträger schnell gegenüber der zeitliche Änderung der äußeren Anregung ist.

⁴Die Herleitung aller Gleichungen in diesem Abschnitt folgt Ideen und Rechnungen, wie sie in dem Buch „Electrical properties of semiconductor surfaces“ von Frankel [5] vorgestellt werden, wobei eine abweichende Nomenklatur eingeführt und vom Gauß- ins SI-System übergangen wird.

Material schreiben lassen. Im Bereich des Halbleiters, in dem der Einfluss der Oberflächenladung abgefallen ist, gilt Gl. (2.3) mit dem elektrischen Potential φ^V und den Leitungsbandkanten E_C^V und E_V^V am Rande der Raumladungszone bzw. im Volumen des Halbleiters.

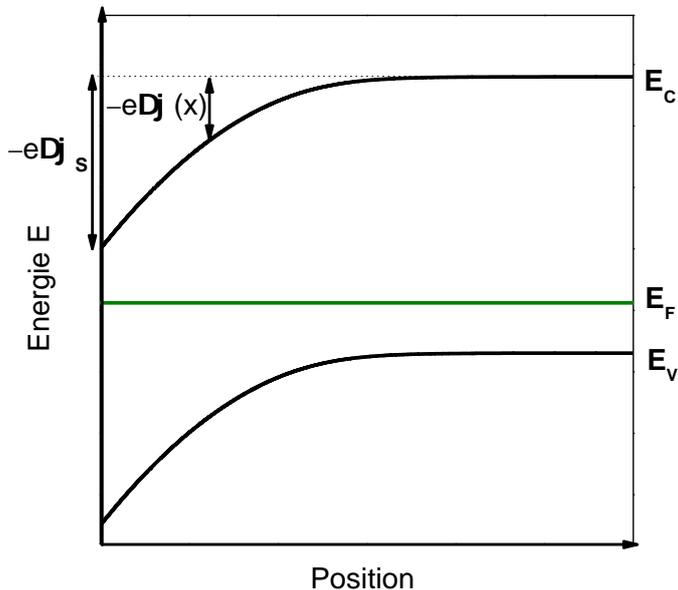


Abbildung 2.1: Oberflächenbandverbiegung $\Delta\varphi_S$ in einem Halbleiter mit einer Festladung auf der Oberfläche. Bei Annahme konstanter Fermienergie lassen sich die lokalen Ladungsträgerdichten als Funktion der Bandverbiegung $\Delta\varphi(x)$ schreiben

Nun sei $\Delta\varphi(x) = \varphi(x) - \varphi^V$ die Abweichung des elektrischen Potentials vom konstanten Wert im Volumen, so dass sich für die Leitungsbandkanten ergibt: $E_C = E_C^V - e\Delta\varphi(x)$ und $E_V = E_V^V - e\Delta\varphi(x)$. Die Gl. (2.3) nehmen dann folgende Form an:

$$\begin{aligned} n(x) &= N_C \exp(-\beta(E_C^V - e\Delta\varphi(x) - E_{Fn})) = (n_0 + \Delta n) \exp(+\beta e\Delta\varphi(x)), \\ p(x) &= N_V \exp(+\beta(E_V^V - e\Delta\varphi(x) - E_{Fp})) = (p_0 + \Delta p) \exp(-\beta e\Delta\varphi(x)). \end{aligned} \quad (2.6)$$

Damit ergibt sich die Ladungsdichte als Funktion des Potentials:

$$\rho(\varphi) = (p_0 + \Delta p) \exp(-\beta e\Delta\varphi) - (n_0 + \Delta n) \exp(+\beta e\Delta\varphi) + N_D^+ - N_A^-. \quad (2.7)$$

Die Poissongleichung Gl. (2.5) kann nun einmal integriert werden, wobei sich an der Oberfläche bei $x = 0$ das Potential $\varphi(0) = \varphi^S$ und die Bandverbiegung $\Delta\varphi_S = \varphi^S - \varphi^V$ einstellt. Die durch Oberflächenladung hervorgerufene Bandverbiegung fällt ins Material hin ab, so dass $\frac{\partial\varphi(x)}{\partial x} \rightarrow 0$ für $\varphi(x) \rightarrow \varphi^V$ mit $x \rightarrow \infty$ als Randbedingung angenommen werden kann:

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial\varphi(x)}{\partial x} \Big|_{x_{\varphi^S=0}} \right)^2 = - \frac{e}{\epsilon_0 \cdot \epsilon_r} \int_{\varphi^V}^{\varphi^S} \rho(\varphi) d\varphi. \quad (2.8)$$

Mit $E = -\frac{\partial\varphi}{\partial x}$ und Gl. (2.8) lässt sich das elektrische Feld E_S an der Halbleiterober-

fläche berechnen:

$$E_S = \pm \sqrt{-2 \frac{e}{\epsilon_0 \cdot \epsilon_r} \int_{\varphi^V}^{\varphi^S} \rho(\varphi) d\varphi}. \quad (2.9)$$

Unter Anwendung des Satzes von Gauß, $\oint \vec{E} d\vec{A} = e \cdot Q / (\epsilon_0 \cdot \epsilon_r)$, lässt sich die Ladung in der Raumladungszone bestimmen. Bei geeigneter Wahl der geschlossenen Oberfläche, über die integriert wird, ist E_S die einzige Feldkomponente, die in der Integration auftaucht. Damit ergibt sich für die auf die Oberfläche projizierte Ladung in der Raumladungszone die Flächenladungsdichte $Q_{SCR} = E_S \frac{\epsilon_0 \epsilon_r}{e}$. Durch Einsetzen in Gl. (2.9) und Ausführen der Integration über die Bandverbiegung mit der Ladungsdichte Gl. (2.7) ergibt sich ein Zusammenhang zwischen Oberflächenbandverbiegung und Ladungsdichte:

$$Q_{SCR}(\Delta n, \Delta p, \Delta \varphi_S) = \text{sgn}(\Delta \varphi_S) \sqrt{2 \frac{\epsilon_0 \cdot \epsilon_r}{e^2}} \cdot F(\Delta n, \Delta p, \Delta \varphi_S), \quad (2.10)$$

mit

$$F(\Delta n, \Delta p, \Delta \varphi_S) = \sqrt{e \Delta \varphi_S (N_A^- - N_D^+) + \frac{1}{\beta} ((p_0 + \Delta p) (e^{-\beta e \Delta \varphi_S} - 1) + (n_0 + \Delta n) (e^{\beta e \Delta \varphi_S} - 1))}.$$

Für eine gegebene Oberflächenladung kann diese Gleichung in Abhängigkeit von den Überschussladungsträgern im Volumen⁵ Δn und Δp numerisch nach der Oberflächenbandverbiegung $\Delta \varphi_S$ gelöst werden, so dass man eine injektionsabhängige Bandverbiegung bestimmen kann (siehe Abb. 2.2 (a)). Dieses Verfahren wird sowohl bei der Auswertung von Messungen der Oberflächenbandverbiegung als auch bei der Analyse von Lebensdauermessungen angewendet. Bei bekannter Bandverbiegung können dann die Ladungsträgerdichten an der Oberfläche n_S und p_S mit Gl. (2.6) bestimmt werden. Wie in Abb. 2.2 (b) zu sehen ist, weichen die Ladungsträgerdichten an der Oberfläche in Abhängigkeit der Injektion beträchtlich von den Werten im Volumen ab. Dies ist insbesondere bei Berechnung von Oberflächenrekombinationsraten entscheidend, wie in Abschnitt 2.2 noch genauer diskutiert wird. Eine weitere Größe, die im Laufe der Arbeit eine wichtige Rolle spielt, ist die Überschussladungsträgerkonzentration in der Raumladungszone, die im Folgenden hergeleitet wird. Dazu werden zunächst die Flächenladungsdichten ΔN_{SCR} und ΔP_{SCR} eingeführt, die die Abweichung der Ladungsträgerdichte in der Raumladungszone zu der im Volumen beschreiben:

$$\begin{aligned} \Delta N_{SCR} &= \int_0^\infty (n(x) - n^V) dx = \int_{\varphi^S}^{\varphi^V} (n(\varphi) - n^V) \left(\frac{\partial \varphi(x)}{\partial x} \Big|_{x_\varphi} \right)^{-1} d\varphi, \\ \Delta P_{SCR} &= \int_0^\infty (p(x) - p^V) dx = \int_{\varphi^S}^{\varphi^V} (p(\varphi) - p^V) \left(\frac{\partial \varphi(x)}{\partial x} \Big|_{x_\varphi} \right)^{-1} d\varphi. \end{aligned} \quad (2.11)$$

⁵Die Größen n , p , Δn und Δp ohne Indizes bezeichnen im Folgenden immer Größen im Volumen bzw. am Rande der Raumladungszone.

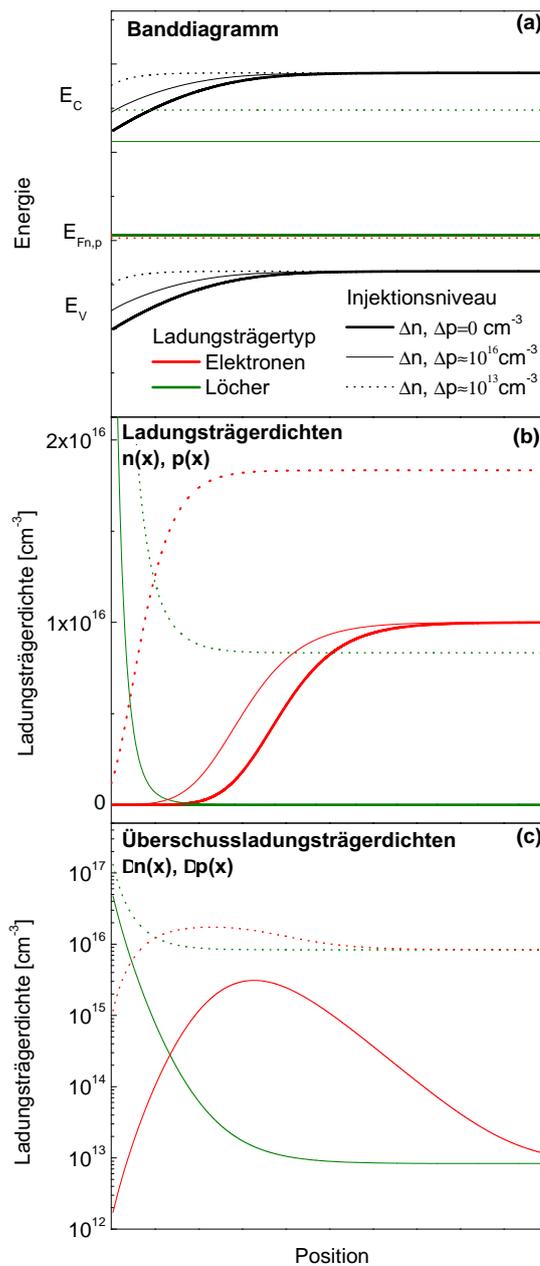


Abbildung 2.2.: Darstellung von Bandverbiegung (a), Ladungsträgerdichten (b) und Überschussladungsträgerdichten (c) im Gleichgewicht und für zwei verschiedene Injektionsniveaus. Es wird deutlich, dass für niedrige Injektion die Ladungsträger in der Raumladungszone die mittlere Überschussladungsträgerdichten in dünnen Schichten entscheidend beeinflussen können. Die Rechnungen wurden mit dem numerischen Halbleitersimulator AFORS-HET, der in Abschnitt 2.4 beschrieben wird, durchgeführt. Dabei wurden typische Materialparameter für kristallines Silizium verwendet Abschnitt 3.1.1, eine p-Dotierung mit $N_A^- = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ und eine Oberflächenfestladung mit $Q_S = 2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ angenommen. Die im Rahmen der hier vorgestellten analytischen Näherung hergeleiteten Gleichungen werden in Kapitel 5 mit AFORS-HET verglichen.

Setzt man nun für $n(x)$ und $p(x)$ die Beziehungen aus Gl. (2.6) ein und für $\frac{\partial\varphi(x)}{\partial x}$ die in Gl. (2.8) nehmen die Gleichungen folgende Form an:

$$\begin{aligned}\Delta N_{SCR}(\Delta n) &= (n_0 + \Delta n) \int_0^{\Delta\varphi_S} \frac{\exp(\beta e \Delta\varphi) - 1}{G(\Delta n, \Delta p, \Delta\varphi)} d\Delta\varphi, \\ \Delta P_{SCR}(\Delta p) &= (p_0 + \Delta p) \int_0^{\Delta\varphi_S} \frac{\exp(-\beta e \Delta\varphi) - 1}{G(\Delta n, \Delta p, \Delta\varphi)} d\Delta\varphi,\end{aligned}\tag{2.12}$$

mit $G(\Delta n, \Delta p, \Delta\varphi_S) = \frac{e}{\epsilon_0 \cdot \epsilon_r} F(\Delta n, \Delta p, \Delta\varphi_S)$.⁶ Geht man jetzt von einer halbunendlichen Halbleiterschicht zu einer mit endlicher Breite und symmetrischen Bandverbiegungen auf beiden Oberflächen über, lässt sich mit Hilfe dieser Formeln eine mittlere Überschussladungsträgerkonzentration berechnen. Dabei wird vorausgesetzt, dass die Struktur so groß ist, dass es einen Bereich gibt, der nicht durch die Bandverbiegungen gestört ist:

$$\begin{aligned}\Delta n_{av}(\Delta n) &= \frac{2}{W} (\Delta N_{SCR}(\Delta n) - \Delta N_{SCR}(0)) + \Delta n, \\ \Delta p_{av}(\Delta p) &= \frac{2}{W} (\Delta P_{SCR}(\Delta p) - \Delta P_{SCR}(0)) + \Delta p.\end{aligned}\tag{2.13}$$

Um die Bedeutung dieser Größe zu verstehen, stelle man sich die Situation vor, in der die mittlere Überschussladungsträgerdichte nicht durch die Ladungsträger im Volumen, sondern durch die in der Raumladungszone bestimmt wird ($\Delta n \ll \Delta n_{av}$). Diese Situation ist in Abb. 2.2(c) dargestellt. Wie später noch genau diskutiert wird, kann der Fall auftreten, dass die Ferminiveaufspaltung entsprechend Gl. (2.3) nicht mehr durch die z.B. mit Photoleitfähigkeitsmessungen bestimmte Überschussladungsträgerkonzentration bestimmt ist. Dies hat weitreichende Folgen für Lebensdauer-messungen bei Niedriginjektion in dünnen Schichten sowie auf den Zusammenhang zwischen Lebensdauer und Leerlaufspannung in Solarzellen, wie später noch genauer ausgeführt wird.

2.1.2. Kontinuitätsgleichungen und Transport

Im Halbleiter gilt für jeden Ladungsträgertyp einzeln die Kontinuitätsgleichung. Diese lässt sich unter geeigneter Definition von Erzeugungs- und Vernichtungsraten G , R aus den Maxwell-Gleichungen ableiten:[6]⁷

$$\begin{aligned}-\frac{1}{e} \frac{\partial j_n(x, t)}{\partial x} &= G_n(x, t) - R_n(x, t) - \frac{\partial n(x, t)}{\partial t}, \\ +\frac{1}{e} \frac{\partial j_p(x, t)}{\partial x} &= G_p(x, t) - R_p(x, t) - \frac{\partial p(x, t)}{\partial t}.\end{aligned}\tag{2.14}$$

⁶Die Herleitung erfolgt wie für Gl. (2.10).

⁷Die Herleitung erfolgt mit: $\nabla \cdot (\nabla \times \vec{H}) = \nabla \cdot (\vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t})$ und $\nabla \vec{D} = \rho$ mit dem Vektor der magnetischen Feldstärke H dem Vektor der elektrischen Flussdichte D . Die Kontinuitätsgleichungen ergeben sich unter Vernachlässigung der zeitlichen Änderung von Defektladungen.

Dabei beschreiben die Rekombinationsraten $R_n(x, t)$ und $R_p(x, t)$ die lokale Vernichtung von Ladungsträgern z. B. durch Rekombination über Defekt (Abschnitt 2.2.2) und die Generationsraten $G_n(x, t)$ und $G_p(x, t)$ beschreibt die lokale Erzeugung von Ladungsträgern z. B. durch optische Anregung (Abschnitt 2.4.1). Die Transportgleichungen, über die sich die Stromdichten $j_n(x, t)$ und $j_p(x, t)$ berechnen, beinhalten eine Vielzahl von physikalischen Mechanismen, und es lassen sich darum keine einfachen allgemeingültigen Gleichungen ableiten. Um die Transportgleichungen im Rahmen der Drift-Diffusions-Näherung aus der Boltzmann-Gleichung herzuleiten, macht man unter anderem folgende Annahmen: parabolische Bänder, relaxierte Ladungsträger, Boltzmannstatistik für die Ladungsträgerdichten, keine Temperaturgradienten sowie Näherungen für die Streuprozesse der Ladungsträger [7]. Die Stromdichten werden dann durch die lokalen Mobilitäten und Ladungsträgerdichten sowie die Gradienten der quasi-Fermi-niveaus bestimmt:

$$\begin{aligned} j_n(x, t) &= \mu_n(x)n(x, t)\frac{\partial E_{Fn}(x, t)}{\partial x}, \\ j_p(x, t) &= \mu_p(x)p(x, t)\frac{\partial E_{Fp}(x, t)}{\partial x}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Die quasi-Fermi-niveaus E_{Fn} und E_{Fp} berechnen sich aus dem elektrischen Potential und der Ladungsträgerkonzentrationen:

$$\begin{aligned} E_{Fn}(x, t) &= \chi(x) - e\varphi(x, t) + kT \ln \frac{n(x, t)}{N_C(x)}, \\ E_{Fp}(x, t) &= (\chi(x) + E_G(x)) - e\varphi(x, t) - kT \ln \frac{p(x, t)}{N_V(x)}. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Die den Strom treibende Kraft wird also durch den Konzentrationsgradienten und durch den Gradienten des elektrischen Potentials bestimmt. Zudem kann sich eine treibende Kraft aus Gradienten der Bandkanten z. B. an Heteroübergängen ergeben.

In dieser Form stellen die Kontinuitätsgleichungen neben der Poisson-Gleichung zwei weitere Differentialgleichungen dar, die bei der numerischen Simulation gelöst werden müssen. Neben den oben erwähnten Näherungen beinhalten diese Transportgleichungen insbesondere keine Tunnelprozesse. Bei starken Bandverbiegungen kann es in den Bändern allerdings zu Barrieren kommen, die einen Tunnelprozess ermöglichen [8].

Im Folgenden werden die Kontinuitätsgleichungen weiter vereinfacht, so dass analytische Lösungen gefunden werden können, die für Messung und Analyse von Ladungsträgerlebensdauern relevant sind. Zunächst setzen wir Gl. (2.16) in Gl. (2.15) ein und setzen beim Differenzieren voraus, dass nur das Potential $\varphi(x)$ und die Ladungsträgerdichten $n(x)$ und $p(x)$ eine x-Abhängigkeit besitzen. Weiterhin werden über die Einstein-Beziehung die Diffusionskonstanten $D_{n,p} = \mu_{n,p} \frac{kT}{e}$ eingeführt:

$$\begin{aligned} j_n(x, t) &= e\mu_n n(x, t)E(x, t) + eD_n \frac{\partial n(x, t)}{\partial x}, \\ j_p(x, t) &= e\mu_p p(x, t)E(x, t) - eD_p \frac{\partial p(x, t)}{\partial x}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Mit Hilfe von einigen Annahmen lassen sich Gl. (2.14) mit den Strömen aus Gl. (2.17) zu einer Gleichung für die Überschussladungsträger zusammenfassen [6]. Für das Beispiel eines p-dotierten Halbleiters ergibt sich mit:

- identischen Überschussladungsträgerkonzentrationen: $\Delta n = \Delta p$,
- Dotierung: $p_0 \gg n_0$,
- Niedriginjektion: $p_0 \gg \Delta n$,
- vernachlässigbaren elektrischen Feldern: $E = 0, \frac{\partial E}{\partial x} = 0$, zu

$$\frac{\partial \Delta n(x, t)}{\partial t} = G(x, t) - R(x, t) + D_n \frac{\partial^2 \Delta n(x, t)}{\partial x^2}. \quad (2.18)$$

Diese im Rahmen der Arbeit wichtige Differentialgleichung lässt sich analytisch lösen, wie in Kapitel 5 gezeigt wird.

2.1.3. Demberspannung

Bei inhomogener Anregung kommt es zu Diffusionsprozessen der Ladungsträger in der Probe. Aufgrund der unterschiedlichen Mobilitäten von Elektronen und Löchern in Silizium entsteht dabei die sogenannte Demberspannung. Diese Spannung muss bei der Analyse von Messungen der Oberflächenbandverbiegung berücksichtigt werden, wie später noch diskutiert werden wird. Im Folgenden wird eine Gleichung für die Demberspannung abgeleitet.⁸ Bei Annahme einer unkontaktierten Probe fließt kein Gesamtstrom ($j = j_n + j_p = 0$), und aus Gl. (2.17) lässt sich eine Gleichung für das Feld in der Probe herleiten:

$$E(x) = \frac{1}{\mu_n n + \mu_p p} \left(D_p \frac{\partial p(x)}{\partial x} - D_n \frac{\partial n(x)}{\partial x} \right). \quad (2.19)$$

Mit Hilfe der Näherung, dass Elektronen und Löcher gleich verteilt sind ($\frac{\partial p(x)}{\partial x} \approx \frac{\partial n(x)}{\partial x}$), und unter Beachtung der Einsteinrelation, $D_{n,p} = \mu_{n,p} \frac{kT}{e}$, erhält man:

$$E(x) = \frac{kT}{e} \frac{\mu_p - \mu_n}{\mu_n + \mu_p} \frac{\partial}{\partial x} \ln(\mu_n n + \mu_p p). \quad (2.20)$$

Mit $E(x) = -\frac{\partial \varphi(x)}{\partial x}$ ergibt sich die Demberspannung als Differenz der Spannung an der Probenoberfläche und im Probenvolumen $\Delta \varphi_D = \varphi_S - \varphi_V$:

$$\Delta \varphi_D = \frac{kT}{e} \frac{\mu_n - \mu_p}{\mu_n + \mu_p} \ln \left(\frac{\mu_n n_S + \mu_p p_S}{\mu_n n_V + \mu_p p_V} \right). \quad (2.21)$$

Nimmt man an, dass auf der unbeleuchteten Seite die Ladungsträgerkonzentrationen im Gleichgewicht angenommen werden, $n_V = n_0$, während die Beleuchtung auf der Vorderseite zu einer Erhöhung der Ladungsträgerkonzentration führt, $n_S = n_0 + \Delta n$, so ergibt sich die Demberspannung in Abhängigkeit von der Überschussladungsträgerdichte Δn und dem Mobilitätsverhältnis b :

$$\Delta \varphi_D = \frac{kT}{e} \frac{b - 1}{b + 1} \ln \left(1 + \Delta n \frac{b + 1}{n_0 b + p_0} \right), \quad (2.22)$$

$$b = \frac{\mu_n}{\mu_p}.$$

⁸Die Herleitung orientiert sich an Rechnungen im Buch „Physik der Solarzelle“ von Würfel [9].

In dem Fall, dass die Ladungsträgerdichte zur Rückseite nicht auf den Gleichgewichtswert abgefallen ist, lässt sich die Demberspannung wie folgt schreiben:

$$\Delta\varphi_D = \frac{kT}{e} \frac{b-1}{b+1} \ln \left(1 + \Delta n_S \frac{b+1}{n_0 b + p_0 + \Delta n_V (b+1)} \right). \quad (2.23)$$

2.2. Rekombinationsprozesse

Rekombination bzw. Generation bezeichnet die Prozesse, bei denen ein Elektronen-Lochpaar vernichtet bzw. erzeugt wird. Die Prozesse beinhalten also den Übergang von einem Elektron zwischen Valenz- und Leitungsband. Die dabei nötige Energie wird thermisch oder als Photonen freigesetzt bzw. bereitgestellt. Um Energie- und Impulserhaltung zu erfüllen, kann neben Photonen und Phononen auch ein weiterer Ladungsträger an der Wechselwirkung beteiligt sein. Im Allgemeinen hängt die Rekombinationsrate von den Ladungsträgerdichten in den Bändern ab und von Koeffizienten, die die Übergangswahrscheinlichkeit beschreiben. Im thermischen Gleichgewicht sind Rekombination R^0 und Generation G^0 im Gleichgewicht, und in den Bändern stellen sich die Gleichgewichtsladungsträgerdichten n_0 , p_0 ein. Wird das System zeitlich konstant angeregt, stellt sich ein neues stationäres Gleichgewicht mit erhöhten Ladungsträgerkonzentrationen, $n = n_0 + \Delta n$ und $p = p_0 + \Delta p$ sowie erhöhter Rekombination R^* und Generation G^* ein. Es ist in diesem Zusammenhang sinnvoll, die Nettorekombinationsraten $R = R^* - R^0$ und $G = G^* - G^0$ zu betrachten, die die Abweichung vom thermodynamischen Gleichgewicht beschreiben. Solange Ladungsträger nicht zu großen Anteilen in Defekten eingefangen sind, und an der entsprechenden Stelle der Struktur Ladungsneutralität vorherrscht, gilt für die Überschussladungsträgerkonzentrationen $\Delta n = \Delta p$. Nach Abschaltung der äußeren Anregung geht das System wieder in seinen Ausgangszustand über, wobei die Überschussladungsträger entsprechend der Rekombinationsrate abklingen.

$$\frac{\partial \Delta n}{\partial t} = -R(\Delta n) \quad (2.24)$$

Man unterscheidet intrinsische Rekombinationsprozesse, die auch im idealen, defektfreien Material auftreten, wie strahlende Band-Band-Rekombinationen und Auger-Rekombinationen, von einer Rekombination, die über Defektzustände in der Bandlücke abläuft. Die Gesamtrekombination ergibt sich aus der Summe der Einzelrekombinationen,

$$R(\Delta n) = \sum_i R_i(\Delta n). \quad (2.25)$$

2.2.1. Intrinsische Rekombinationsprozesse

Strahlende Rekombination

Die strahlende Band-Band-Rekombination ist der Übergang, bei dem ein Elektron aus dem Leitungsband unter Emission eines Photons in das Valenzband übergeht und dort ein Loch vernichtet. Da es sich bei Silizium um einen indirekten Halbleiter handelt, muss ein Phonon beteiligt sein, so dass die Impulserhaltung erfüllt werden kann.

Dies hat zur Folge, dass die Rekombinationsrate der strahlenden Rekombination in Silizium im Vergleich zu andern Materialien mit direkter Bandlücke um Größenordnungen geringer ist. Wie später gezeigt wird, ist die strahlende Rekombination im Vergleich zur Auger-Rekombination und der Rekombination über Defekte klein und kann bei der Simulation von Siliziumhalbleitern vernachlässigt werden. Trotzdem sollen hier kurz die Grundgleichungen vorgestellt werden. Die Nettorekombinationsrate R_{BB} ist proportional zu den Ladungsträgerdichten in den Bändern und ergibt sich zu [10]

$$R_{BB}(n, p) = B(n \cdot p - n_i^2). \quad (2.26)$$

Der temperaturabhängige Koeffizient der strahlenden Rekombination für Silizium bei Raumtemperatur wird in einer aktuellen Arbeit zu $B(300K) = 4.7 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ bestimmt [11]. Die Rekombinationsrate ist i. Allg. also von der Dotierung n_0, p_0 und der Überschussladungsträgerkonzentration $\Delta n, \Delta p$ abhängig, und für $\Delta n = \Delta p$ ergibt sich:

$$R_{BB}(n, p) = B\Delta n^2 + B\Delta n(n_0 + p_0). \quad (2.27)$$

Auger-Rekombination

Ein weiterer intrinsischer Rekombinationsmechanismus ist die Auger-Rekombination. Dabei geht ein Elektron aus dem Leitungsband in das Valenzband über, wobei die freiwerdende Energie an ein zweites Elektron im Leitungsband (eeh-Prozess) oder an ein Loch im Valenzband (ehh-Prozess) abgegeben wird.⁹ Dieser Vorgang beinhaltet somit die Wechselwirkung von drei Ladungsträgern, so dass die Rate für den eeh-Prozess proportional zu n^2p und die für den ehh-Prozess proportional zu np^2 ist. Für die Nettorekombinationsrate ergibt sich dann [12]:

$$R_{Auger}(n, p) = C_n(n^2p - n_i^2n_0) + C_p(np^2 - n_i^2p_0). \quad (2.28)$$

Für die Augerkoeffizienten in Silizium werden in der Literatur in der Regel die von Dziwior und Schmidt bestimmten Werte $C_n = 2.8 \times 10^{-31}$ und $C_p = 9.9 \times 10^{-32}$ angegeben [13]. Genauere Untersuchungen zeigen allerdings, dass diese Werte nicht für alle Injektionsniveaus gültig sind. Auch theoretische Überlegungen legen nahe, dass der funktionale Zusammenhang in Gl. (2.28) nur beschränkt gültig ist. Eine Erklärung für erhöhte Auger-Rekombination bei niedrigen Injektionsdichten liefern theoretische Überlegungen von Hangleiter und Häckler zur Coulomb Wechselwirkung der drei am Übergang beteiligten Ladungsträger und den damit verbundenen Exitonenzuständen [14]. Aufbauend auf diesen theoretischen Überlegungen stellten Altermatt et al. eine empirische Parametrisierung der Augerkoeffizienten als Funktion der Dotierung vor [15]. Im Rahmen dieser Arbeit wird allerdings das Ergebnis einer neueren Untersuchung von Kerr und Cuevas eingesetzt, die ebenfalls eine, auf einer Vielzahl von Messungen basierende, empirische Parametrisierung vorgestellt haben [16]:

$$R_{Auger}(\Delta n) = (n_0 + \Delta n)(p_0 + \Delta n) \cdot (C_a n_0^{0.65} + C_b p_0^{0.65} + C_c \Delta n^{0.8}) \quad (2.29)$$

Die Koeffizienten wurden zu $C_a = 1.8 \times 10^{-24}$, $C_b = 6 \times 10^{-25}$ und $C_c = 3 \times 10^{-27}$ bestimmt.

⁹Es kann vorkommen, dass bei diesem Prozess auch ein Phonon zur Impulserhaltung beteiligt ist.

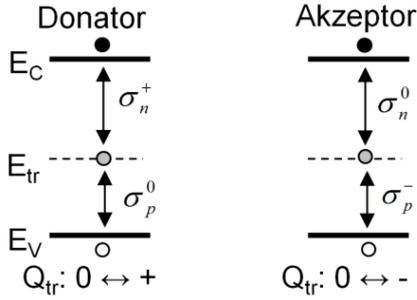


Abbildung 2.3: Einfang- und Emissionsprozesse sowie der Ladungszustand von Shockley-Read-Hall-Defekten

2.2.2. Rekombination über Defekte

Die Rekombination über Defekte ist ein wichtiger Verlustmechanismus in Solarzellen und seine Unterdrückung von entscheidender Bedeutung bei der Optimierung von Zelleffizienzen. Die Rekombination hängt insbesondere von den lokalen Ladungsträgerdichten ab und die Rekombinationsrate variiert somit mit dem Betriebszustand (Beleuchtung, Strom, Spannung und Temperatur). Neben der Rekombination tragen die Defekte in Abhängigkeit der lokalen Ladungsträgerdichte eine bestimmte Ladung, die vor allem in defektreichen Schichten wie a-Si:H bei der Simulation von entscheidender Bedeutung ist. Im Folgenden werden Gleichungen vorgestellt, die es ermöglichen, Rekombinationsraten und Ladung von Shockley-Read-Hall- und amphoteren Defekten in Abhängigkeit von der lokalen Ladungsträgerdichte zu berechnen.

Shockley-Read-Hall-Rekombination

Rekombinationsraten und Besetzung von Defekten, die nur ein einzelnes Elektron aufnehmen oder abgeben können, werden von der Shockley-Read-Hall-(SRH)-Theorie beschrieben [17, 18]. Es gibt zwei Einfang- und Emissionsprozesse¹⁰ für Donator- und Akzeptor-Defekte. Die Rate für den Einfang hängt von den Einfangkoeffizienten $c_{n,p}$ sowie den Ladungsträgerdichten in den Bändern n, p und der Anzahl der unbesetzten Zustände für Elektronen $(1 - f_t)N_{tr}$ bzw. für Löcher $f_t N_{tr}$ ab. Dabei ist N_{tr} die Defektdichte und f_t die Besetzung der Defekte mit Elektronen:

$$\begin{aligned} R_n^c &= c_n n (1 - f_t) N_{tr} \\ R_p^c &= c_p p f_t N_{tr} . \end{aligned} \quad (2.30)$$

Die Einfangkoeffizienten sind über $c_{n,p} = v_{th}^{n,p} \sigma_{n,p}$ durch den Einfangquerschnitt $\sigma_{n,p}$ der Defekte und die thermische Geschwindigkeit $v_{th}^{n,p}$ der Ladungsträger bestimmt. Die Rate für die Emission hängt von den Emissionskoeffizienten $e_{n,p}$ und der Besetzung der Defektzustände mit Elektronen $f_t N_{tr}$ bzw. mit Löchern $(1 - f_t) N_{tr}$ ab.

$$\begin{aligned} R_n^e &= e_n f_t N_{tr} \\ R_p^e &= e_p (1 - f_t) N_{tr} \end{aligned} \quad (2.31)$$

¹⁰Einfang- und Emissionsprozesse: capture and emission processes

Die Nettoraten R_p und R_n geben an, wie der Defekt Elektronen mit dem Leitungsband und Löcher mit dem Valenzband austauscht.

$$\begin{aligned}\frac{\partial n}{\partial t} &= R_n = R_n^e - R_n^c = -(c_n n(1 - f_t)N_{tr} - e_n f_t N_{tr}) \\ \frac{\partial p}{\partial t} &= R_p = R_p^e - R_p^c = -(c_p p f_t N_{tr} - e_p(1 - f_t)N_{tr})\end{aligned}\quad (2.32)$$

Im thermodynamischen Gleichgewicht gilt für die Besetzung des Defekts die Fermi-Dirac Statistik, und alle makroskopischen Größen sind zeitunabhängig, so dass die Nettoraten verschwinden.

$$f_t = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_t - E_F}{kT}\right) - 1}, \quad R_n = 0, \quad R_p = 0 \quad (2.33)$$

Mit Gl. (2.33) und Gl. (2.3) ergeben sich die Emissionskoeffizienten in Abhängigkeit von den Einfangkoeffizienten und als Funktion der Defektenergielage.¹¹

| Donator | Akzeptor | |
|--|--|--------|
| $e_n^0 = c_n^+ N_c \exp(\beta(E_t - E_c))$ | $e_n^- = c_n^0 N_c \exp(\beta(E_t - E_c))$ | (2.34) |
| $e_p^+ = c_p^0 N_v \exp(\beta(E_v - E_t))$ | $e_p^0 = c_p^- N_v \exp(\beta(E_v - E_t))$ | |

Bei der Nomenklatur für die Einfangkoeffizienten, Einfangquerschnitte und Emissionskoeffizienten bezeichnet der untere Index das wechselwirkende Teilchen (Elektron oder Loch) und der obere Index den Ladungszustand des Defekts bei der Wechselwirkung. Diese Nomenklatur wird auch im nächsten Abschnitt über amphotere Defekte beibehalten. Im Fall des stationären Gleichgewichts gilt $R_n = R_p$. Mit Gl. (2.32) erhält man unter der Annahme, dass Gl. (2.34) auch im Nichtgleichgewicht gültig bleibt, eine Beziehung für die Besetzung von Defektzuständen im stationären Gleichgewicht.

$$f^{\text{Donator}} = \frac{c_n^+ n + e_p^+}{c_n^+ n + e_n^0 + c_p^0 p + e_p^+}, \quad f^{\text{Akzeptor}} = \frac{c_n^0 n + e_p^0}{c_n^0 n + e_n^- + c_p^- p + e_p^0} \quad (2.35)$$

Als Gleichungen für die Rekombinationsraten $R_{n,p}$ und den Ladungszustand $Q_{n,p}$ der Defekte erhält man mit Gl. (2.32), Gl. (2.34) und Gl. (2.35):

$$\begin{aligned}R^{\text{Donator}}(n, p) &= (np - n_i^2) N_{tr}^{\text{Donator}}(E) \frac{c_p^0 c_n^+}{c_n^+ n + e_n^0 + c_p^0 p + e_p^+}, \\ R^{\text{Akzeptor}}(n, p) &= (np - n_i^2) N_{tr}^{\text{Akzeptor}}(E) \frac{c_p^- c_n^0}{c_n^0 n + e_n^- + c_p^- p + e_p^0},\end{aligned}\quad (2.36)$$

$$\begin{aligned}Q^{\text{Akzeptor}}(n, p) &= -N_{tr}^{\text{Akzeptor}}(E) f^{\text{Akzeptor}}(n, p), \\ Q^{\text{Donator}}(n, p) &= +N_{tr}^{\text{Donator}}(E) (1 - f^{\text{Donator}}(n, p)).\end{aligned}\quad (2.37)$$

¹¹Obwohl die Defektbesetzung über die Fermi-Dirac-Statistik berechnet wird, geht mit Gl. (2.3) die Boltzmannnäherung für die Besetzung der Bänder ein

Diese Gleichungen werden für die numerischen Simulation der Solarzellen im Abschnitt 2.4 sowie für das semi-analytische Modell zur Berechnung von injektionsabhängigen Lebensdauern benötigt.¹² An den Gleichungen lässt sich ablesen, dass die Rekombinationsrate entscheidend von der Abweichung der Ladungsträgerdichten vom Gleichgewicht ($np - n_i^2$) und von der Defektdichte N_{tr} abhängt. Weiterhin ist die Wirkungsweise der Defekte abhängig vom Injektionsniveau, wie im Folgenden diskutiert wird. Man unterscheidet die Defekte entsprechend folgender Gesichtspunkte: Eine detaillierte Analyse der Energielagen- und quasi-Ferminiveau abhängigen Wir-

| | |
|---------------------------|------------------------------------|
| Rekombinationszentrum | $R_n^c \gg R_p^e, R_p^c \gg R_n^e$ |
| Elektronen Einfangzentrum | $R_n^c \gg R_p^e, R_p^c \ll R_n^e$ |
| Löcher Einfangzentrum | $R_n^c \gg R_n^e, R_n^c \ll R_p^e$ |

kungsweise von Defekten wurde von Simmons und Taylor durchgeführt [19]. Dabei wird auch der Begriff des Demarkationsniveaus näher erläutert. Das Demarkationsniveau für Elektronen E_{Dn} ist definiert als das Energieniveau, bei dem die Rate der Emission ins Leitungsband gleich der Rate des Einfangs der Löcher ist. Entsprechend ist das Demarkationsniveau für Löcher E_{Dp} definiert als die Energie, für die die Emission eines Lochs in das Valenzband gleich der Wahrscheinlichkeit eines Elektroneneinfangs ist.

$$\begin{aligned}
 R_n^e = R_p^c &\rightarrow E_{Dn} = E_c - E_{Fp} + kT \ln \frac{\sigma_p N_V}{\sigma_n N_C} \\
 R_p^e = R_n^c &\rightarrow E_{Dp} = E_c - E_{Fn} + kT \ln \frac{\sigma_n N_C}{\sigma_p N_V}
 \end{aligned} \tag{2.38}$$

Die Bedeutung dieser Energieniveaus wird deutlich, wenn man die Rekombinationsrate als Funktion der Energie betrachtet, wobei im Folgenden eine konstante Defektdichte über die gesamte Bandlücke angenommen wird. In einer Analyse dieser Situation finden Simons und Taylor folgende Zusammenhänge: Defekte zwischen den Bandkanten und den Defektferminiveaus wirken als Einfangzentren und werden als flache Einfangzentren bezeichnet. Die Hauptrekombinationsstrom läuft über die Defekte innerhalb der Defektferminiveaus.¹³ Diese Defekte werden dementsprechend als Rekombinationszentren bezeichnet. Eine detaillierte Betrachtung unter Beachtung der Definition der Demarkationsniveaus zeigt, dass Defekte zwischen Defektferminiveau der Elektronen und Demarkationsniveau der Elektronen zusätzlich als Einfangzentren für Elektronen wirken können. Die Zustände zwischen Demarkationsniveau der Elektronen und Defektferminiveau der Löcher wirken ausschließlich als Rekomb-

¹²Es sei darauf hingewiesen, dass hier transiente Effekte nicht berücksichtigt wurden, dass die Gleichungen streng genommen nur für schwache Auslenkung aus dem Gleichgewicht gültig sind, und dass angenommen wurde, dass die Relaxationszeit der eingefangenen Ladungsträger klein gegen die Reemissionszeit ist.

¹³Es ist zu beachten das die Defektferminiveaus nicht den quasi-Ferminiveaus der Ladungsträger in den Bändern entsprechen. Die Defektferminiveaus liegen immer etwas näher an den Bändern als die Band-quasi-Ferminiveaus. In Abb. 2.4 wird deutlich, dass die Defektbesetzungsfunktionen Gl. (2.35) abschnittsweise die Form einer Fermiverteilung annehmen. Darüber lassen sich die Defektferminiveaus E_{DFn} und E_{DFp} definieren [19].

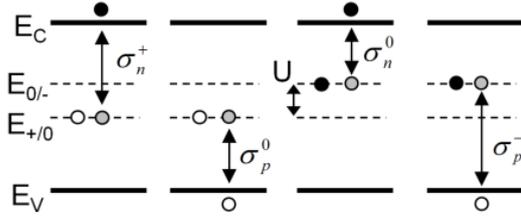


Abbildung 2.5: Energieniveaus und Einfangs- und Emissionsprozesse amphoterer Defekte mit drei möglichen Besetzungszuständen

übliche Notation verwendet [21, 22]. Für die Emissionsraten ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 e_n^0 &= \frac{1}{2} c_n^+ N_C \exp(\beta(E - E_C)), \\
 e_p^+ &= 2c_p^0 N_V \exp(\beta(E_V - E)), \\
 e_n^- &= 2c_n^0 N_C \exp(\beta(E + U - E_C)), \\
 e_p^0 &= \frac{1}{2} c_p^- N_V \exp(\beta(E_V - E - U)).
 \end{aligned} \tag{2.39}$$

Die Besetzungsfunktionen für den unbesetzten $F^+(n, p)$, einfach besetzten $F^0(n, p)$ und zweifach besetzten Zustand $F^-(n, p)$ ergeben sich zu

$$\begin{aligned}
 F^+(n, p) &= \frac{P^- P^0}{N^+ P^- + P^0 P^- + N^+ N^0}, \\
 F^0(n, p) &= \frac{P^- N^+}{N^+ P^- + P^0 P^- + N^+ N^0}, \\
 F^-(n, p) &= \frac{N^0 N^+}{N^+ P^- + P^0 P^- + N^+ N^0},
 \end{aligned} \tag{2.40}$$

mit

$$\begin{aligned}
 N^+ &= c_n^+ n + e_p^+, & N^0 &= c_n^0 n + e_p^0, \\
 P^0 &= c_p^0 p + e_n^0, & P^- &= c_p^- p + e_n^-.
 \end{aligned} \tag{2.41}$$

Damit ergeben sich die Rekombinationsrate R_{int}^{db} und der Ladungszustand Q_{int}^{db} des DB-Defekts:

$$R^{db}(n, p) = (np - n_i^2) D_{int}(E) \frac{c_n^+ c_p^0 P^- + c_n^0 c_p^- N^+}{N^+ P^- + P^0 P^- + N^+ N^0} \tag{2.42}$$

$$Q^{db}(n, p) = D^{db}(E) (F^+(n, p) - F^-(n, p)) \tag{2.43}$$

Diese Gleichungen werden für das semi-analytische Modell zur Berechnung der injektionsabhängigen Lebensdauer benötigt (Kapitel 5). Da die exakte Beschreibung der DB-Defekte komplizierte Gleichungen enthält, wurden diverse Näherungen entwickelt. Zum einen ist es üblich einen DB-Defekt als Donator/Akzeptor-Paar von SRH-Defekten zu beschreiben. Diese Näherung wird im folgenden als **unkorrelierter DB-Defekt** bezeichnet. Wie man sich mit Hilfe von Abb. 2.3 und Abb. 2.5 schnell klar machen kann, ist es mit dieser Beschreibung möglich, alle Einfangs- und Emissionsprozesse sowie die drei Ladungszustände zu beschreiben. Eine genauere Untersuchung zu dieser

Näherungsmethode wurde von Halpern et. al [23] und ausführlicher in der Doktorarbeit von Willemen [24] durchgeführt. Es zeigt sich, dass die Beschreibung als unkorrelierte Defekte die Rekombinationsrate tendenziell überschätzt, allerdings gute Ergebnisse liefert, solange die Einfangquerschnitte für Übergänge in einen geladenen Zustand größer sind als diejenigen in einen ungeladenen Zustand $\sigma_{n,p}^{\text{charged}} > \sigma_{n,p}^{\text{uncharged}}$. Dabei entspricht der relative Fehler ungefähr dem Quotienten der Einfangquerschnitte. Eine weitere Bedingung ist, dass die Korrelationsenergie positiv und größer als die thermische Energie ist ($U > kT$). Die Beschreibung der DB-Defekte als unkorrelierte Defekte eignet sich insbesondere für numerische Simulationen, da keine zusätzlichen Gleichungen implementiert werden müssen. Eine weitere Näherungsmethode, die sich in der Literatur etabliert hat, wurde von Hubin et al. vorgestellt [25]. Eine entscheidende Annahme in der **Hubin-Näherung** ist die einer hoher Ladungsträgerinjektion. Es wird angenommen, dass alle Defekte als Rekombinationszentren angesehen werden können. Diese Näherung ist bei Annahme einer energetischen Verteilung der Defekte nur sehr beschränkt gültig, wie die Diskussion zu den Defektferminiveaus der SRH-Defekte zeigt und wurde aus diesem Grund in der Literatur sehr kritisch betrachtet [26, 27]. Des Weiteren lässt sich mit dieser Näherung der injektionsabhängige Ladungszustand der Defekte nicht berechnen.

2.2.3. Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit

Bei erhöhter Defektdichte an einer Ober- bzw. Grenzfläche kommt zu einem Elektronen- und Lochstrom in diese Fläche hinein und die Ladungsträger rekombinieren dann über diese Oberflächendefekte. Es ist sinnvoll, diesen Prozess mit Hilfe einer Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit (surface recombination velocity SRV) S zu beschreiben:

$$S(n, p) = \frac{R(n, p)}{\Delta n}. \quad (2.44)$$

Typischerweise sind an Ober- und Grenzflächen erhöhte Defektdichten und eine Defektverteilung über die Energie anzutreffen, so dass man die Rekombination über all diese Defekte summiert und so ein Integral über die Bandlücke erhält,

$$S(n, p) = \int_{E_V}^{E_C} \frac{R(E, n, p)}{\Delta n} dE. \quad (2.45)$$

Des Weiteren liegt an Grenz- und Oberflächen typischerweise eine Bandverbiegung vor. Diese kann ihren Ursprung in Festladungen auf der Oberfläche, in geladenen Ober- oder Grenzflächendefekten haben oder einfach durch die Bandverbiegung, die sich aus den Materialparameter bei einem Heteroübergang ergibt, verursacht werden. Wie in Abschnitt 2.1 hergeleitet wurde und in Abb. 2.2 zu sehen ist, führt eine Bandverbiegung dazu, dass die Ladungsträger an der Ober- bzw. Grenzfläche eine vom Volumen abweichende Konzentration haben. Für eine Festladung lässt sich die Bandverbiegung mit Gl. (2.10) berechnen, und die Ladungsträger an der Oberfläche ergeben sich dann mit Gleichung Gl. (2.6). Man führt dann, unter Vernachlässigung

der Rekombination in der Raumladungszone selbst, eine effektive Oberflächenrekombination am Rande der Raumladungszone ein [28, 29],

$$S_{eff}(n, p) = \int_{E_V}^{E_C} \frac{R(E, n_S, p_S)}{\Delta n} dE. \quad (2.46)$$

Diese Methode der Berechnung der effektiven SRV wurde in vielen Arbeiten erfolgreich eingesetzt. So analysieren z. B. Girisch et al. und Aberle et al. mit Hilfe dieser Berechnung die Rekombination an SiO/Si Grenzflächen und Olibet die an a-Si:H/c-Si Grenzflächen [30–32]. Auch im Rahmen dieser Arbeit wird die injektionsabhängige SRV in Abhängigkeit von der Bandverbiegung mithilfe dieser Methode berechnet (Kapitel 5).

2.3. Ladungsträgerlebensdauer

Die Lebensdauer ist zum einen eine Größe, die Messungen zugänglich ist, über die man ein Verständnis der einzelnen Rekombinationsprozesse gewinnen kann, zum anderen korreliert sie direkt mit der Leerlaufspannung V_{oc} von Solarzellen und ermöglicht es so, Schichten und Schichtsysteme in Hinblick auf ihr V_{oc} -Potential hin zu bewerten. Die effektive Lebensdauer einer Struktur ist allerdings eine sehr komplexe Größe. Zum einen enthält sie die oben genannten Rekombinationprozesse, zum anderen sei daran erinnert, dass jede der Rekombinationsraten von der lokalen Ladungsträgerdichte abhängt, so dass die durch Bandverbiegungen beeinflusste Verteilung der Ladungsträger berücksichtigt werden muss. Die Lebensdauer τ ist über folgende Gleichung definiert:

$$\tau(\Delta n) := \frac{\Delta n}{R(\Delta n)}. \quad (2.47)$$

2.3.1. Ladungsträgerlebensdauer im Volumen

Mit der Definition aus Gl. (2.47) lässt sich für jeden der oben diskutierten Rekombinationsmechanismen eine Lebensdauer berechnen, die sich nach Gl. (2.25) reziprok addieren, so dass man die Ladungsträgerlebensdauer im Volumen τ_V erhält:

$$\frac{1}{\tau_V(\Delta n)} = \frac{1}{\tau_{BB}(\Delta n)} + \frac{1}{\tau_{Auger}(\Delta n)} + \frac{1}{\tau_{SRH}(\Delta n)}. \quad (2.48)$$

Mit den Rekombinationsraten Gl. (2.27), Gl. (2.29) und Gl. (2.36) lässt sich dann eine Lebensdauer in Abhängigkeit von der Überschussladungsträgerkonzentration Δn berechnen. In Abb. 2.6 erkennt man, dass für kristallines Silizium nur im Hochinjektionsbereich die Auger-Rekombination entscheidend ist, während die Lebensdauer für niedrige Überschussladungsträgerkonzentrationen in der Regel von der Rekombination über Defekte bestimmt wird. Für Siliziumwafer sehr hoher Reinheit kann die Lebensdauer in Spezialfällen auch durch die Auger-Rekombination beschränkt sein.

Eine besonders anschauliche Bedeutung erhält man für den Spezialfall einer Rekombinationsrate, die proportional zur Überschussladungsträgerdichte ist. In diesem

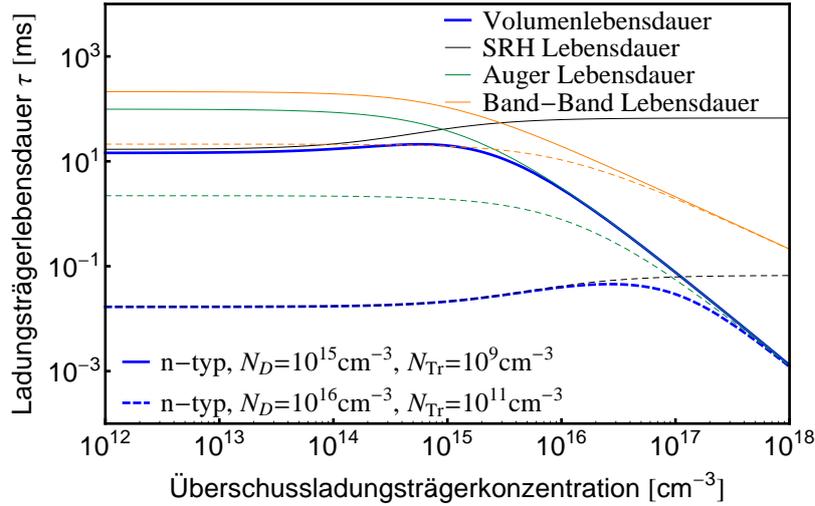


Abbildung 2.6.: Die Volumenlebensdauer wird durch die Auger-Rekombination und SRH-Rekombination bestimmt. Die Band-Band-Rekombination ist in Silizium so gering, dass sie keinen Einfluss hat. Auger-Rekombination und Band-Band-Rekombination nehmen mit der Dotierung N_D zu, und die SRH-Rekombination mit der Defektdichte N_T . Für die Rechnung wurde ein Defekt in der Bandmitte mit $\sigma_{n/p} = 1/2 \times 10^{-14} \text{ cm}^{-2}$ zugrundegelegt. Zwischen den beiden blauen Kurven liegt somit der Bereich mit realistischen Volumenlebensdauern von Siliziumwafern.

Fall ist die Lebensdauer konstant $\tau(\Delta n) = \tau$ und entspricht nach Gl. (2.24) der Zeitkonstante des exponentiellen Zerfalls der Überschussladungsträger.

$$\Delta n(t) = \Delta n_{max} \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (2.49)$$

Bei einer einfachen Datenauswertung von Lebensdaueremessungen wird eine konstante Lebensdauer angenommen und ein exponentieller Zerfall nach Gl. (2.49) ausgewertet. Die Annahme einer konstanten Lebensdauer ist allerdings, wie in Abb. 2.6 zu sehen ist nur für einen begrenzten Bereich von Überschussladungsträgern sinnvoll. Es existieren diverse Charakterisierungsmethoden, die in der Lage sind, Lebensdauern in Abhängigkeit von der Überschussladungsträgerkonzentration einer Struktur zu bestimmen. Dazu soll nun Gleichung Gl. (2.18) betrachtet werden. Bei Annahme einer homogenen Überschussladungsträgerkonzentration erhält man durch Einsetzen der Definition für die Lebensdauer Gl. (2.47):

$$\tau_V(\Delta n) = \frac{\Delta n(t)}{G(t) - \frac{\partial \Delta n(t)}{\partial t}}. \quad (2.50)$$

Somit lässt sich eine injektionsabhängige Lebensdauer unter transienten und stationären Bedingungen bestimmen. Dabei muss z. B. mit Hilfe einer Leitfähigkeitsmessung die Überschussladungsträgerkonzentration bestimmt werden und im stationären Fall zusätzlich die Generationsrate oder alternativ im transienten Fall das zeitliche Abklingen der Überschussladungsträger.

2.3.2. Effektive Ladungsträgerlebensdauer

Die Annahme einer homogenen Ladungsträgerverteilung ist jedoch i. Allg. keine gute Näherung, da an Oberflächen mit einer erhöhten Defektdichte gerechnet werden muss, so dass es zu einem Diffusionsprofil kommen kann. Weiterhin liegt an Ober- und Grenzflächen typischerweise eine Bandverbiegung vor, die die Ladungsträgerkonzentration in den Bädern beeinflusst. Man führt dann eine effektiven Lebensdauer ein, die sich aus der Volumenlebensdauer und der SRV S berechnet. In diesen Fall bleibt in der Kontinuitätsgleichung für die Überschussladungsträger Gl. (2.18) der Term des Diffusionsstroms erhalten. Die SRV wird über Randbedingungen berücksichtigt, wobei hier eine symmetrische Probenstruktur angenommen wird.

$$\frac{\partial \Delta n(x, t)}{\partial t} = G(x, t) - \frac{\Delta n(x, t)}{\tau_b(\Delta n)} + D_n \frac{\partial^2 \Delta n(x, t)}{\partial^2 x} \quad (2.51)$$

$$\pm D \frac{\partial \Delta n(x)}{\partial x} \Big|_{\mp \frac{W}{2}} = S \Delta n \left(\mp \frac{W}{2} \right) \quad (2.52)$$

Durch Integration über die Waferdicke W lässt sich diese Gleichung in eine Form analog zu Gl. (2.50) bringen [33]:

$$\tau_{av}(\Delta n_{av}) = \frac{\Delta n_{av}(t)}{G_{av}(t) - \frac{\partial \Delta n_{av}(t)}{\partial t}}, \quad (2.53)$$

mit

$$\begin{aligned} \Delta n_{av}(t) &= \frac{1}{W} \int_{-W/2}^{W/2} \Delta n(x, t) dx, \\ \Delta G_{av}(t) &= \frac{1}{W} \int_{-W/2}^{W/2} G(x, t) dx. \end{aligned} \quad (2.54)$$

Es wird deutlich, dass die effektive Lebensdauer einer Halbleiterschicht eine äußerst komplizierte Größe ist. Es lassen sich Näherungen finden, um das Zusammenspiel von SRV und Volumenlebensdauer zu beschreiben. Es ist zu beachten, dass in Gl. (2.51) zwar elektrische Felder vernachlässigt werden, dass sich jedoch über die effektive SRV der Einfluss der Bandverbiegung auf die Rekombination an der Oberfläche berücksichtigen lässt.

Transiente Ladungsträgerlebensdauer

Die Lösung der Differentialgleichung für das Abklingen nach einem Lichtpuls wird im Detail von Schroder beschrieben [34](Appendix 7.1), und es werden im Folgen kurz die Ergebnisse zusammengefasst. Der Ansatz beinhaltet die Annahme einer konstanten SRV und Volumenlebensdauern und eine exponentielles Abklingen der Generationsrate $G(x)$ in die Probe hinein. Das transiente Abklingen des Systems wird nach

Ausschalten der Beleuchtung berechnet ($G(x) = 0$), so dass Gl. (2.53) folgende Form annimmt:

$$\tau_{av}(\Delta n_{av}, t) = -\frac{\Delta n_{av}(t)}{\frac{\partial \Delta n_{av}(t)}{\partial t}}. \quad (2.55)$$

Unter diesen Bedingungen ergibt sich die Überschussladungsträgerkonzentration als Summe von exponentiellen Abklingfunktionen, wobei jede Mode durch eine Abklingkonstante τ beschrieben werden kann.

$$\Delta n(t) = \sum_{k=0}^{\infty} A_k \exp\left(-\frac{t}{\tau_k}\right) \quad (2.56)$$

Bei einer transienten Messung kommt es typischerweise zu einem schnellen initialen Zerfall bis die Mode mit der höchsten Lebensdauer τ_{eff} übrigbleibt. Der physikalische Grund für diesen Verlauf ist, dass sich nach dem Lichtpuls zunächst die Ladungsträgerverteilung in der Probe symmetrisiert. Es lassen sich Näherungen für den Zusammenhang von SRV, Volumenlebensdauer und effektiver Lebensdauer finden. Dabei wird der Fall besonders hoher und besonders niedriger SRV unterschieden.

$$\tau_{\text{eff}} = \left(\frac{1}{\tau_b} + \frac{2S}{W}\right)^{-1} \quad \text{für} \quad \frac{S \cdot W}{D_n} < \frac{1}{4} \quad (2.57)$$

$$\tau_{\text{eff}} = \left(\frac{1}{\tau_b} + D_n \left(\frac{\pi}{W}\right)^2\right)^{-1} \quad \text{für} \quad \frac{S \cdot W}{D_n} > 100 \quad (2.58)$$

Im Fall einer hohen SRV S hat der Wert von S selbst keinen Einfluss, da der die Geschwindigkeit limitierende Schritt in diesem Fall die Diffusion der Ladungsträger zur Oberfläche hin ist. Für kleine SRV wird der Diffusionsprozess irrelevant und der die Geschwindigkeit bestimmende Schritt ist die Rekombination selber. Eine Kombination dieser Lösungen wurde von Grivickas et al. [35] vorgeschlagen und ihre Gültigkeit wurde im Detail von Sproul [36] untersucht.

$$\tau_{\text{eff}} = \left(\frac{1}{\tau_b} + \left(\frac{L}{2S} + \frac{W^2}{D_n \pi^2}\right)^{-1}\right)^{-1} \quad (2.59)$$

Es konnte gezeigt werden, dass diese Lösung für beliebige Parameterkombinationen nur maximal 5 % von der exakten Lösung abweicht. An dieser Stelle ist darauf hinzuweisen, dass die Näherung einer konstanten SRV i. Allg. nicht gegeben ist, und es neben der Ladungsträgersymmetrisierung in x -Richtung, die in dem oben diskutierten 1D-Ansatz erfasst werden, auch zu 3D-Effekten kommen kann, da die Ladungsträger auch lateral wegdiffundieren, wenn die Beleuchtung nicht homogen über die gesamte Probenoberfläche erfolgt.¹⁶

Stationäre Ladungsträgerlebensdauer

Im stationären Fall nimmt Gl. (2.53) folgende Form an:

$$\tau_{av}(\Delta n_{av}) = \frac{\Delta n_{av}}{G_{av}}. \quad (2.60)$$

¹⁶Eine Untersuchung für injektionsabhängige SRV $S(\Delta n)$ und Volumenlebensdauer $\tau(\Delta n)$ findet sich in [37]

Es ist üblich die Näherung Gl. (2.57) auch im stationären Fall anzusetzen. Die Gültigkeit dieser Näherung wurde unseres Wissens nach in der Literatur noch nicht im Detail untersucht, und somit wird in Kapitel 5 eine exaktere Lösung erarbeitet und mit der Näherung verglichen.

2.3.3. Implizite Leerlaufspannung

Die Leerlaufspannung V_{OC} einer Solarzelle ist durch die Differenz der Fermienergien an den beiden Kontakten bei Beleuchtung mit dem Sonnenspektrum (AM1.5)¹⁷ gegeben. V_{OC} ist somit limitiert durch die Aufspaltung der quasi-Fermienergien im Absorber. Dieser Zusammenhang wird in Abb. 2.7 verdeutlicht, lässt sich aber auch mit Hilfe von thermodynamischen Überlegungen mathematisch herleiten [9]. Die Aufspaltung der quasi-Fermienergien im Absorber wird implizite Leerlaufspannung genannt (implied open circuit voltage, V_{OC}^{imp}) und ist über Gl. (2.3) und Gl. (2.60) direkt mit der effektiven Lebensdauer verknüpft. Zunächst errechnet sich die implizite Leerlaufspannung

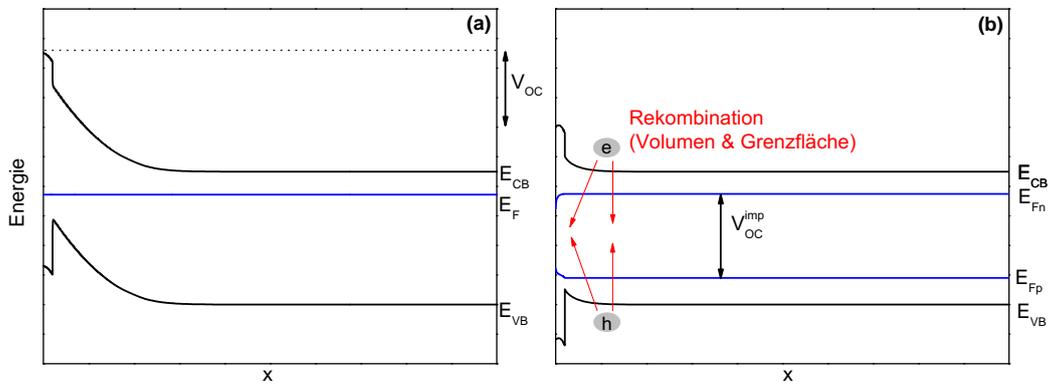


Abbildung 2.7.: Das Banddiagramm eines Heterokontakts im Dunkeln (a) und bei Beleuchtung mit AM1.5 (b). Es lässt sich erkennen, dass die Änderung der Bandverbiegung, die der Spannung entspricht, die im äußeren Stromkreis abgegriffen werden kann, der Aufspaltung der Fermienergien entspricht. Diese Aufspaltung wird limitiert durch die Rekombinationsprozesse im Volumen und an der Grenzfläche und ist damit korreliert mit der effektiven Lebensdauer der Struktur.

aus der Aufspaltung der quasi-Fermienergien mit Gl. (2.3) zu:

$$V_{OC}^{imp} = \frac{1}{e} \Delta E_F = \frac{1}{e\beta} \ln \left(\frac{(n_0 + \Delta n)(p_0 + \Delta p)}{n_i^2} \right). \quad (2.61)$$

Wobei Δn und Δp wie gehabt die Überschussladungsträger im Volumen, bzw. am Rande der Raumladungszone sind. Bei Annahme eines p-Typ Halbleiters und $\Delta n = \Delta p$ vereinfacht sich Gl. (2.61) zu:

$$V_{OC}^{imp} = \frac{1}{e\beta} \ln \left(1 + \frac{p_0 \Delta n + \Delta n^2}{n_i^2} \right). \quad (2.62)$$

¹⁷Sonnenspektrum nach 1.5-fachem Durchlaufen der Atmosphäre.

Durch Einsetzen von Gl. (2.60) für die stationäre Lebensdauer ergibt sich unter der Annahme $\Delta n = \Delta n_{av}$:

$$V_{OC}^{imp} = \frac{1}{e\beta} \ln \left(1 + \frac{p_0 G_{av}^{AM15} \cdot \tau_{AM15} + (\Delta G_{av}^{AM15})^2 \cdot \tau_{AM15}^2}{n_i^2} \right). \quad (2.63)$$

Für ein gegebenes Absorbermaterial ergibt sich also als Daumenregel, dass die Leerlaufspannung logarithmisch mit der Lebensdauer bei einer Sonne skaliert (Gl. (2.63) und Abb. 2.8). Da sich die effektive Lebensdauer nach Gl. (2.57) bzw. Gl. (2.59) aus Volumenlebensdauer und Oberflächenrekombination berechnet, kann über Gl. (2.63) die Leerlaufspannung in Abhängigkeit von diesen beiden Verlustmechanismen berechnet werden. In Abb. 2.8 ist die Leerlaufspannung für einen Siliziumwafer mit Gl. (2.59) für eine Generationsrate $G_{av}^{AM15} = 2.6 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ gezeigt.¹⁸ In Kapitel 5 wird gezeigt, wie sich die Leerlaufspannung auf die fundamentalen Größen der Defektdichten im Volumen und an der Oberfläche zurückführen lässt. Dabei muss dann auch entsprechend Gl. (2.46) die Bandverbiegung berücksichtigt werden. Wie

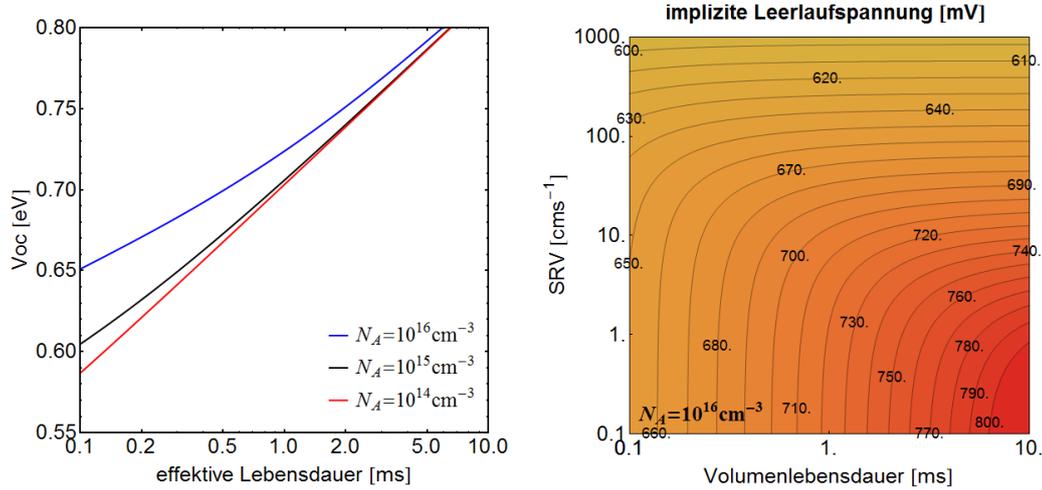


Abbildung 2.8.: Implizite Leerlaufspannung als Funktion der Ladungsträgerlebensdauer berechnet mit Gl. (2.63) (links) und Gl. (2.63) und Gl. (2.57) (rechts) für einen $250 \mu\text{m}$ dicken p-Typ Siliziumwafer mit einer Dotierung von $N_A = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

in Abschnitt 2.1 diskutiert wurde, ist die Annahme $\Delta n = \Delta n_{av}$ insbesondere bei kleinen Überschussladungsträgerdichten, kleinen Schichtdicken und hohen Dunkelbandverbiegungen nicht immer richtig (siehe dazu auch Abb. 2.2), und damit ergibt sich ein komplizierterer Zusammenhang zwischen V_{oc} und τ . Dieser Fall wird in Kapitel 5 ausführlich diskutiert und wird uns auch bei der Lebensdauerermessung an Dünnschichtproben wieder begegnen.

¹⁸Im Vorgriff auf Abschnitt 2.4 wird die Generationsrate entsprechend Gl. (2.65) mit AFORS-HET berechnet

2.4. Numerische Bauteilsimulation

In diesem Abschnitt werden die Grundlagen der numerischen Bauteilsimulation diskutiert. Dabei wird ein Konzept zur Simulation von Halbleiterstrukturen vorgestellt, wie es in dem Programm AFORS-HET (automat for simulation of heterostructures) implementiert ist, das am HZB seit vielen Jahren entwickelt und eingesetzt wurde [38]. Die Entwicklung von AFORS-HET orientiert sich in vielen Bereichen an der Arbeit von Selberherr [7]. Die Grundlagen zu AFORS-HET wurden von R. Stangl und dem Autor, der vorliegenden Arbeit, in einigen Buchkapiteln veröffentlicht [38–40]. AFORS-HET wird fortwährend weiterentwickelt und wurde in der Vergangenheit vor allem eingesetzt, um a-Si:H/c-Si -Solarzellen zu simulieren [41–43].

Mit AFORS-HET können 1D-Homo- und Heterostrukturen, also beliebige Schichtstapel aus Halbleitermaterialien simuliert werden. Es stehen diverse Randbedingungen zur Verfügung, um die äußere Kontaktierung der Struktur zu definieren, sowie verschiedene Grenzflächentransportmodelle, um die verschiedenen Halbleiterschichten aneinander zu koppeln. Die lokale Rekombinationsrate im Halbleitervolumen, sowie an Ober- und Grenzflächen wird entsprechend der definierten Defektverteilung in Abhängigkeit von den Ladungsträgerdichten berechnet. Nach der Definition der Struktur und der Diskretisierung auf einem Gitter verläuft die Simulation in zwei Schritten. Es stehen verschiedene optische Modelle zur Verfügung, mit denen im ersten Schritt die Generationsrate in Abhängigkeit von der Beleuchtung mit beliebigen Spektren und Intensitäten berechnet werden kann. Im zweiten Schritt wird das System aus gekoppelten Halbleiterdifferentialgleichungen unter Berücksichtigung der vorgegebenen Rand- und Grenzflächenbedingungen mit Hilfe eines Finite-Differenzenverfahrens numerisch nach Ladungsträgerdichten der Elektronen $n(x)$ und Löcher $p(x)$ und dem elektrischen Potential $\varphi(x)$ gelöst. Aus den Variablen $n(x)$, $p(x)$, $\varphi(x)$ können alle weiteren elektrischen Größen in der Struktur, wie z. B. quasi-Ferminiveaus, berechnet werden.

2.4.1. Optische Rechnung

Das einfachste Modell zur Berechnung der lokalen Generationsrate $G(x)$ beruht auf der Lambert–Beer-Absorption. Dabei muss neben der Struktur auch der spektrale Photonenfluss $\Phi(\lambda)$ sowie der spektrale Absorptionskoeffizient $\alpha_x(\lambda)$ der einzelnen Halbleiterschichten definiert werden. Zusätzlich können noch eine spektrale Reflexion der Oberfläche $R(\lambda)$ sowie eine Absorption in den Kontaktschichten $A(\lambda)$ definiert werden. Die Generationsrate berechnet sich dann wie folgt:

$$G(x) = \int_{\lambda_{min}}^{\lambda_{max}} d\lambda \Phi(\lambda)(1 - R(\lambda))(1 - A(\lambda))\alpha_x(\lambda)e^{-\alpha_x(\lambda)x} \quad (2.64)$$

$$G(x) = \int_{\lambda_{min}}^{\lambda_{max}} d\lambda \Phi(\lambda)(1 - r(\lambda))\alpha_x(\lambda)e^{-\alpha_x(\lambda)x} \quad (2.65)$$

Sollte der Photonenfluss $\Phi(\lambda)$ Wellenlängen mit Energien unterhalb der Bandlücke beinhalten, wird die obere Grenze der Integration durch die Bandlückenenergie beschränkt.

Eine Erweiterung dieses einfachen Modells erlaubt die Definition von internen Reflexionen an Vorder- und Rückseite, so dass das Licht die Struktur mehrfach durchläuft und eine einfache Form des „optischen trappings“ simuliert werden kann. Darüber hinausgehende Modelle zur Simulation der optischen Generationsrate, die den schrägen Einfall von Licht und die wellenlängenabhängige Brechung an Grenzflächen berücksichtigen können, wurden in dieser Arbeit nicht genutzt und sollen darum hier nicht im Detail beschrieben werden. Die internen Parameter, die im Rahmen der optischen Simulation benötigt werden, sind in Tab. 2.1 zusammengefasst.

Tabelle 2.1.: Parameter zur Berechnung der Generationsrate mit AFORS-HET

| | | |
|--|-------------------|---|
| spektraler Photonenfluss | $\Phi(\lambda)$ | $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1} \text{nm}^{-1}$ |
| spektraler Absorptionskoeffizient | $\alpha(\lambda)$ | $\text{cm}^{-1} \text{nm}^{-1}$ |
| spektrale Oberflächenreflektivität | $R(\lambda)$ | |
| spektrale Absorption in Kontaktschichten | $A(\lambda)$ | |

Es besteht auch die Möglichkeit, die Generationsrate mit einem alternativen Programm zu ermitteln und in AFORS-HET einzugeben.

2.4.2. Elektrische Rechnung

Nachdem die lokale Generationsrate berechnet wurde, wird in einem zweiten Schritt die elektrische Rechnung durchgeführt, das heißt es wird ein System aus gekoppelten Differentialgleichung für die Variablen Elektronendichte, Löcherdichte und elektrisches Potential – $n(x)$, $p(x)$, $\varphi(x)$ – unter Voraussetzung bestimmter Randbedingungen und externer Parameter numerisch gelöst (siehe Tab. 2.2). Unter den externen Parametern versteht man die äußeren Betriebsbedingungen des Bauelements, also die Generationsrate bzw. der spektrale Photonenfluss, die Temperatur und die äußere Spannung oder alternativ den äußeren Stromfluss. Man unterscheidet diese externen Parameter von den internen Materialparametern, die das Halbleitervolumen bzw. die Grenz- und Oberflächen definieren. Die zu lösenden Differentialgleichungen und Randbedingungen mit den dazugehörigen internen Parametern werden in den folgenden Abschnitten beschrieben.

Tabelle 2.2.: Externe Parameter und Lösungen der elektrischen Rechnung mit AFORS-HET

| | | |
|---------------------------------------|-----------------|--------------------------------|
| externe Parameter ($f^{ext}(x, t)$) | | |
| Generationsrate | $G(x, t)$ | $\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$ |
| externe Spannung | $U(t)$ | V |
| externe Stromdichte | $j(t)$ | A/cm^2 |
| Temperatur | T | K |
| Lösungen ($f^{sol}(x, t)$) | | |
| Elektronendichte | $n(x, t)$ | cm^{-3} |
| Löcherdichte | $p(x, t)$ | cm^{-3} |
| elektrisches Potential | $\varphi(x, t)$ | eV |

Es soll nun kurz der Ansatz der zur numerische Lösung der Differentialgleichungen erwähnt werden, wie er im Detail von Selberherr beschrieben wird [7].¹⁹ Die Lösung erfolgt mittels des Finiten-Differenzen-Verfahrens wie es von Gummel zur Lösung der Halbleitergleichungen eingeführt wurde [44]. Zunächst muss von der kontinuierlichen Ortsvariablen x zu einer diskreten Variablen x_i übergegangen werden. Dadurch gehen die Ableitungen in den zu lösenden Differentialgleichungen in finite Differenzen über und das System der partiellen Differentialgleichungen in ein System von Differenzgleichungen, das iterativ z. B. mit Hilfe des Newton-Verfahrens gelöst werden kann.

- $x \rightarrow x_i$ mit $i = 1, 2 \dots N$
- $g'(x_i) \rightarrow \frac{g(x_{i+1}) - g(x_{i-1}))}{x_{i+1} - x_{i-1}}$ (zentraler Differenzenquotient)

Die Menge der Orte x_i , an denen die Gleichungen gelöst werden müssen, wird als Gitter bezeichnet. Die Gitterpunkte brauchen nicht äquidistant sein, sondern ihre Dichte sollte sich nach den Gegebenheiten der zu berechnenden Struktur richten. Gebiete nahe an Grenzflächen bzw. allgemein Gebiete, an denen sich eine interner Parameter räumlich schnell ändert, erfordern ein feines Gitter. Andere Gebiete erlauben ein gröberes Gitter, so dass die Gesamtzahl der Gitterpunkte N gering gehalten werden kann, um die Rechenzeit zu reduzieren. Neben der Diskretisierung der Ortsvariablen muss bei zeitabhängigen Rechnungen auch die Zeitvariable t geeignet diskretisiert werden. Bei Berücksichtigung von Rekombinationen über Defektverteilungen in der Bandlücke muss auch die Energie E diskretisiert werden. Es gibt verschiedene Betriebsmodi unter denen das Gleichungssystem gelöst werden kann:

- Gleichgewicht (EQ-Modus)
Bei Rechnungen im Gleichgewicht sind die externen Parameter: Photonenfluss, externe Spannung und externe Stromdichte, gleich Null, ($f^{ext}(x, t) = 0$), d.h. es gibt keine Aufspaltung der quasi-Ferminiveaus. Diese Rechnung muss bei der Initialisierung einer Struktur einmal durchgeführt werden, da die Lösung für den Gleichgewichtsfall für alle weitergehenden Rechnungen bekannt sein müssen.
- Stationärer Zustand (DC-Modus)
Bei Steady-State-Rechnungen nehmen die externen Parameter: Photonenfluss, externe Spannung und externe Stromdichte einen zeitlich konstanten Wert an. Somit können alle Differentialgleichungen ohne ihre Zeitabhängigkeit gerechnet werden: $\frac{\partial g(x, t)}{\partial t} = 0$.
- Periodische Zeitabhängigkeit (AC-Modus)
Im AC-Modus können kleine periodische Zeitabhängigkeiten berechnet werden. Dabei können die externen Parameter in der Form $f^{ext}(x, t) = f_{DC}^{ext}(x) + f_{AC}^{ext}(x) \cdot \sin(\omega t)$ vorgegeben werden und die Lösungen werden in der Form $f^{sol}(x, t) = f_{DC}^{sol}(x) + f_{AC}^{sol}(x) + e^{i\omega t}$ angesetzt.

¹⁹Wir beschränken uns hier darauf, nur die prinzipiellen Ideen zu erläutern, da die Implementierung des numerischen Lösungsverfahrens nicht Teil dieser Arbeit ist.

- Transienter Modus

In diesem Modus können allgemeine Zeitabhängigkeiten der externen Parameter vorgegeben werden und in den Differentialgleichungen wird die volle Zeitabhängigkeit berücksichtigt.

In der vorliegenden Arbeit wurden nur Rechnungen im DC-Modus durchgeführt, so dass auf die Details der zeitabhängigen Rechnung nicht weiter eingegangen wird, und die Variablen im Folgenden als Funktion des Ortes geschrieben werden können.

Halbleitervolumen

Die drei gekoppelten Differentialgleichungen, die gelöst werden müssen, sind die Poisson-Gleichung Gl. (2.5) und die beiden Kontinuitätsgleichungen für Elektronen und Löcher Gl. (2.14). Die Ladungsdichte der Defekte, die in die Poisson-Gleichung eingeht, ergibt sich aus der Summation über alle Defekte am entsprechenden Gitterpunkt.

$$\rho_D(n, p) = \sum_i Q_i^{\text{Akzeptor}}(n, p) + \sum_i Q_i^{\text{Donator}}(n, p) \quad (2.66)$$

Die Defektladungen berechnen sich nach Gl. (2.37) und es gehen die Defektbesetzungsfunktionen Gl. (2.35) ein. Die Stromdichten der Elektronen und Löcher, die in die Kontinuitätsgleichung eingehen, berechnen sich nach Gl. (2.15) mit den quasi-Ferminiveaus Gl. (2.16). Die Rekombinationsraten für Elektronen und Löcher berechnen sich aus der Band-Band-Rekombination Gl. (2.27), Auger-Rekombination Gl. (2.29) und der SRH-Rekombination, die sich aus der Summation über alle Defekte ergibt.

$$R(n, p) = R_{\text{Auger}}(n, p) + R_{\text{BB}}(n, p) + \sum_i R_i^{\text{Akzeptor}}(n, p) + \sum_i R_i^{\text{Donator}}(n, p) \quad (2.67)$$

Die Einzelrekombinationsraten der Defekte berechnen sich nach Gl. (2.32) mit den Emissionskoeffizienten Gl. (2.34). Eine Rekombination über amphotere Defekte ist in AFORS-HET noch nicht implementiert.

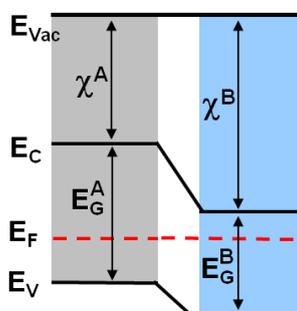
Im Volumen der einzelnen Halbleiterschichten müssen, entsprechend den oben eingeführten Gleichungen, Materialparameter definiert werden, die in Tab. 2.3 zusammengefasst sind. Durch die Summation über die Defekte lassen sich auch energetische Verteilungen von Defekten berücksichtigen, was insbesondere für die Modellierung von a-Si:H-Schichten von großer Wichtigkeit ist.

Grenzflächenbedingungen

Um zwei Halbleiterschichten aneinander zu koppeln, sind in AFORS-HET zwei Grenzflächenbedingungen implementiert. Zum einen gibt es das Drift-Diffusionsmodell, das im Folgenden erläutert wird, zum anderen gibt es das Modell der thermionischen Emission, das im Rahmen dieser Arbeit erweitert wurde, um auch Tunnelprozesse zu berücksichtigen. Wie im Halbleitervolumen müssen für die drei Variablen $n(x)$, $p(x)$, $\varphi(x)$ drei Gleichungen bereitgestellt werden.

Tabelle 2.3.: Parameter der elektrischen Rechnung im Volumen mit AFORS-HET

| | | |
|--|----------------------|--|
| interne Schichtparameter (f_i^{int}) | | |
| Dielektrizitätskonstante | ϵ_r | |
| Elektronenaffinität | χ | eV |
| Bandlücke | E_g | eV |
| effektive Zustandsdichten | $N_{V,C}$ | cm^{-3} |
| Mobilitäten | $\mu_{n,p}$ | cm^2/Vs |
| Dotierung | $N_{A,D}$ | cm^{-3} |
| thermische Geschwindigkeiten | $v_{n,p}^{th}$ | cm/s |
| interne Defektparameter (f_i^{int}) | | |
| Defektdichte | N_{tr} | cm^{-3} bzw. cm^{-2} |
| Einfangquerschnitte | σ_n, σ_p | cm^2 |
| Energielage | E_{tr} | eV |


Abbildung 2.9: An Heterogrenzflächen ergibt sich eine, den Strom treibende Kraft, durch einen Gradienten in den Bandkanten.

Drift-Diffusionsmodell

Im Drift-Diffusionsmodell werden die selben Gleichungen wie im Volumen angesetzt. Alle Materialparameter werden dabei zwischen den Halbleiterschichten linear interpoliert. Im Vergleich zum Volumen, in dem in der Regel von einer konstanten Bandlücke und Elektronenaffinität ausgegangen werden kann, wird die Stromdichte dabei am Übergang von Halbleiter A zu Halbleiter B infolge der möglichen Offsets im Leitungsband $\Delta E_{CB} = \chi^A - \chi^B$ und Valenzband $\Delta E_{CB} = \chi^A + E_g^A - (\chi^B + E_g^B)$ durch eine weitere treibende Kraft beeinflusst (siehe Gl. (2.16)).

Randbedingungen

Die Randbedingungen legen fest, wie der Halbleiterschichtstapel kontaktiert ist. Es müssen wiederum Gleichungen für jede der drei Variablen $n(x)$, $p(x)$, $\varphi(x)$ vorgegeben werden. Als wichtigste Kontaktierung ist hier der Metall-Halbleiter-Kontakt zu nennen, der es auch ermöglicht, die Struktur in einem äußeren Stromkreis zu rechnen. Weitere mögliche Randbedingungen in AFORS-HET sind der Metall-Isolator-Halbleiterkontakt (metal-insulator-semiconductor, MIS), der wichtig ist, um Messungen der Oberflächenphotospannung (surface photo voltage, SPV) zu simulieren, sowie

der im Rahmen dieser Arbeit implementierte Isolator-Kontakt, der benötigt wird, um Lebensdaueremessungen zu simulieren (siehe dazu auch Kapitel 5).

Metall-Halbleiterkontakt

Die exakte Beschreibung eines Metall-Halbleiterkontakts ist in einfachen Gleichungen nicht zu erfassen, so dass verschiedene Näherungen entwickelt wurden, die für die Bauteilsimulation geeignet sind [7] (Seite 130). Ein einfaches Standardmodell, das in den meisten Devicesimulatoren implementiert ist, wird als **idealer ohmscher Kontakt** bezeichnet und beinhaltet folgende Näherungen.²⁰

- Es werden Flachbandbedingungen angenommen, d.h. die Metallaustrittsarbeit ist derart, dass es im Halbleiter zu keiner Bandverbiegung kommt.
- Die Ladungsträgerdichten $n_{v,r}$ und $p_{v,r}$ an Vorder- und Rückseite nehmen ihre Gleichgewichtswerte an, d. h. dass es am Kontakt zu keiner quasi-Ferminiveau-Aufspaltung kommt.

Unter dieser Annahmen können die Randbedingungen für Vorder- und Rückseite aus folgenden Gleichungen abgeleitet werden:

$$\begin{aligned}\varphi_v &= 0 \\ \varphi_r &= V_{ext} \\ n_i^2 &= n_{v,r} \cdot p_{v,r} \\ 0 &= p_{v,r} - n_{v,r} + N_D - N_A\end{aligned}\tag{2.68}$$

In AFORS-HET ist eine präzisere Beschreibung des Kontakts möglich, deren Details von Stangl beschrieben wurden [38]. Diese erlaubt es, eine Metallaustrittsarbeit vorzugeben, die zum Kontakt hin eine Bandverbiegung im Halbleiter verursacht. Des Weiteren können Rekombinationsgeschwindigkeiten definiert werden, so dass es möglich ist, eine quasi-Ferminiveauaufspaltung am Kontakt zuzulassen, $n_i^2 < n_{v,r} \cdot p_{v,r}$. Außerdem sind die Randbedingungen so erweitert worden, dass die Struktur in einem Außenstromkreis mit Parallel- und Serienwiderstand berechnet werden kann. Wählt man Flachbandbedingungen und eine hohe Rekombinationsgeschwindigkeit, so geht dieses Modell in die einfache Randbedingung gemäß Gl. (2.68) über. Die Parameter, die den Kontakt in AFORS-HET definieren, sind in Tab. 2.4 zusammengefasst.

Tabelle 2.4.: Parameter zur Definition des Schottky-Kontakts in AFORS-HET

| interne Parameter (f_i^{int}) | | |
|--|-----------|-----------------------|
| Rekombinationsgeschwindigkeit | $s_{n,p}$ | cm/s |
| Metallaustrittsarbeit | W | eV |
| Serienwiderstand | R_s | $\Omega \text{ cm}^2$ |
| Parallelwiderstand | R_p | $\Omega \text{ cm}^2$ |

²⁰Der ohmsche Kontakt ist z. B. auch die Standardkontaktierung in den Programmen WIAS-TeSCA, Silvaco Atlas und PC-1D.

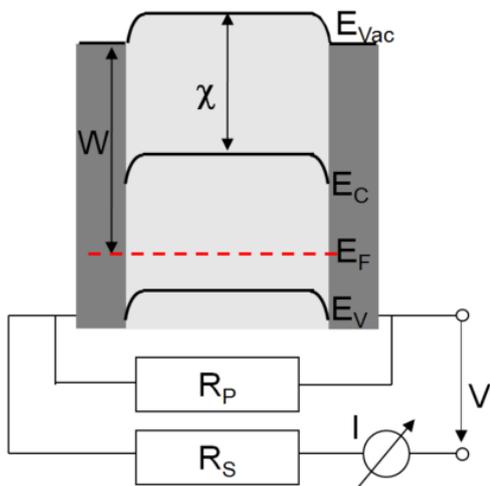


Abbildung 2.10: Metall-Halbleiterkontakt in AFORS-HET mit durch das Metall erzeugter Bandverbiegung und Widerständen im Außenkreis.

Simulation von Messmethoden

Typischerweise wird bei der Modellierung einer Messmethode die Simulation für eine Einzelsituation wiederholt durchgeführt, während ein externer Parameter variiert wird. Aus den Lösungen $n(x)$, $p(x)$, $\varphi(x)$ können dann sekundäre Größen berechnet werden.

j-V-Kurve

So werden bei der Simulation einer j - V -Kurve Schottky-Kontakte mit einem Außenstromkreis definiert, der externe Photonenfluss $\Phi(\lambda)$ entsprechend dem Sonnenspektrum AM 1.5 festgelegt und die externe Spannung variiert. In einem iterativen Verfahren wird dann die Spannung bei maximaler Leistung (maximum power point, MMP) V_{MPP} und die Leerlaufspannung V_{OC} bestimmt. Der Kurzschlussstrom j_{SC} ergibt sich für $V = 0$. So können alle weiteren Solarzellenkenngrößen, wie Füllfaktor FF und Effizienz η , berechnet werden.

$$\begin{aligned}
 FF &= \frac{j_{MPP} \cdot V_{MPP}}{j_{SC} \cdot U_{OC}} \\
 \eta &= \frac{j_{MPP} \cdot V_{MPP}}{\frac{hc}{\lambda} \int \Phi(\lambda) d\lambda}
 \end{aligned}
 \tag{2.69}$$

3. Grundlagen zu Solarzellenmaterialien und -konzepten

3.1. Materialeigenschaften

Im Rahmen dieser Arbeit werden Siliziumsolarzellen mit verschiedener Konfiguration untersucht. Dabei besitzt der Einsatz von kristallinen Schichten (c-Si) als Absorbermaterial aufgrund der geringen Defektdichte das Potential für sehr hohe Leerlaufspannungen. Der Nachteil besteht darin, dass die als Absorber eingesetzten Siliziumwafer in ihrer Produktion besonders energie- und kostenintensiv sind. Demgegenüber bieten dünne polykristalline Siliziumschichten (poly-Si) einen hohen Kostenvorteil, sind allerdings aufgrund der auftretenden Korngrenzen und Versetzungen mit höheren Defektdichten verbunden. Weiterhin müssen aufgrund des geringen Absorptionskoeffizienten von Silizium, insbesondere bei dünnen Schichten, spezielle Strukturen zum Lichteinfang eingebaut werden. Des Weiteren werden hydrogenisierte amorphe Siliziumschichten (a-Si:H) in ihrer Funktion als Kontaktschichten diskutiert. Zum einen können dotierte a-Si:H-Schichten eingesetzt werden, um den ladungstrennenden p/n-Übergang zu erzeugen (Emitterschichten), zum anderen werden sie eingesetzt, um durch einen Feldeffekt die Rekombination am Rückkontakt der Zelle zu minimieren (back surface field layer, BSF-Schicht). Amorphe Kontaktschichten bieten dabei zwei funktionale Vorteile, die besonders hohe Leerlaufspannungen ermöglichen. Zum einen kommt es aufgrund der höheren a-Si:H-Bandlücke zu einem Sprung in den Bandkanten zwischen Kontaktschicht und Absorber, der die Ladungsträgertrennung unterstützen und sich günstig auf die SRV auswirken kann. Zum anderen sind a-Si:H-Schichten aufgrund ihres hohen Wasserstoffgehalts geeignet, offene Bindungen an der Grenzfläche zu passivieren und so die Defektdichten gering zu halten. Dabei unterscheidet sich a-Si:H aufgrund der fehlenden kristallinen Struktur in wichtigen Materialparametern stark von den kristallinen bzw. polykristallinen Schichten, wie noch im Detail diskutiert werden wird. Bei der Diskussion der verschiedenen Materialien wird hier insbesondere auf die Defekte eingegangen, da diese ausschlaggebend für die Zelleffizienz sind, und die Kenntnis der Defektdichten und von deren energetischer Verteilung essentiell für eine realistische Modellierung ist. Des Weiteren werden die für die Modellierung relevanten Materialparameter eingeführt und einige materialspezifische Modelle erwähnt. Details zu der Materialherstellung und -prozessierung und zu den strukturellen Eigenschaften finden sich in den gleichzeitig angefertigten Doktorarbeiten von Schulze (a-Si:H und a-Si:H/c-Si-Grenzfläche) und Sontheimer (poly-Si) [45, 46].

3.1.1. Kristallines Silizium

In den hier untersuchten Solarzellen kommen Siliziumwafer hoher Qualität zum Einsatz, so dass die Rekombination über Defekte und ihr Ladungszustand im Vergleich zu Defekten an Grenzflächen und in Kontaktschichten kaum ins Gewicht fallen. Es wird ausschließlich Silizium verwendet, das mittels des Zonenziehen-Verfahrens (float zone, FZ) hergestellt wurde und eine besonders hohe Reinheit besitzt. Trotzdem sollen hier die wichtigsten Defekte kurz genannt werden. Silizium bildet als Element der Hauptgruppe IV vier kovalente Bindungen zu seinen Nachbaratomen aus und kristallisiert im Diamantgitter. Der ideale Kristall besitzt eine Bandlücke von 1.12 eV, in der keine Zustände liegen, und eine Elektronenaffinität von 4.05 eV [12]. Defekte können durch Störung des idealen Kristallgitters Zustände in dieser Bandlücke hervorrufen. Als intrinsische Defekte bezeichnet man Defekte, die nur durch Gitterfehler hervorgerufen werden, wie Eigenzwischengitteratome und Leerstellen. Unter den extrinsischen Defekten versteht man Fremdatome, die sich auf Gitterplätzen oder Zwischengitterplätzen anordnen können. Dabei wird ihre Wirkungsweise im Wesentlichen durch ihre energetische Lage bestimmt (Vgl. Abschnitt 2.2). So erhält man eine Dotierung des Materials aus Defekten direkt an den Bandkanten. Dabei wird hier als n-Dotierung das Gruppe V Element Phosphor verwendet, das ein Elektron ins Leitungsband abgibt und als p-Dotierung das Gruppe III Element Bor, das ein Elektron aus dem Valenzband aufnimmt. Beide Dotierdefekte können aufgrund ihrer Energielage bei Raumtemperatur als vollständig ionisiert und nicht rekombinationsaktiv angenommen werden. Rekombinationsaktive Defekte, die infolge von Herstellungsprozessen häufig in Silizium auftreten, sind Stickstoff, Kohlenstoff und Sauerstoff. Darüber hinaus kommen Elemente der 3d-Übergangsmetalle vor, die häufig tiefe, besonders rekombinationsaktive Störstellen ausbilden. Insbesondere Eisen ist häufig für die lebensdauerlimitierende Rekombination verantwortlich, wobei der Defekt durch folgende Materialparameter charakterisiert werden kann $E_{tr} = 0.39$ eV, $\sigma_n = 3.6 \times 10^{-15}$ cm² und $\sigma_p = 7.0 \times 10^{-17}$ cm² (Donator) [47–49]. Ein weiterer Defekt, der weniger bei FZ-Silizium sondern eher bei Czochralski-Silizium vorkommt und die Lebensdauer bestimmt, ist der Bor-Sauerstoff-Komplex, der verschiedene Konfigurationen mit unterschiedlicher energetischer Lage $E_{tr} = 0.4$ eV und $E_{tr} = 0.6$ eV annehmen kann [50, 51]. Im Allgemeinen hängen die Parameter des rekombinationsbestimmenden Defekts also von dem Herstellungsverfahren ab. In AFORS-HET wird entsprechend dem anerkannten Halbleitersimulator PC1D ein effektiver Defekt in der Bandmitte eingeführt [52]. Aufgrund der hohen Materialqualität der untersuchten Schichten können dabei Defektdichten $N_{tr} < 10^{11}$ cm⁻³ bei Einfangquerschnitte von $\sigma_{n,p} = 10^{-14}$ cm² angenommen werden. Weitere Details, wie die genaue Energielage und das Verhältnis der Einfangquerschnitte können im Rahmen dieser Arbeit vernachlässigt werden, da die SRV die effektive Lebensdauer dominiert. Weitere siliziumspezifische Modelle für Materialparameter, die in AFORS-HET in Analogie zu PC1D implementiert wurden, sind Modelle für die Abnahme der Ladungsträgermobilitäten [53] sowie für die Abnahme der Bandlücke und der Zustandsdichten für hohe Dotierung [54, 55]. Ein Modell zur Beschreibung der Abnahme der Mobilität mit Erhöhung der Überschussladungsträgerkonzentration ist noch in Entwicklung. Modelle zur Beschreibung dieser Ladungsträger-Ladungsträger-Streuung in Silizium wurden beispielsweise von Dorkel

und Leturcq [56] oder Pang und Rohatgi [57] vorgeschlagen. In der folgenden Tabelle sind alle Parameter für das Beispiel eines p-Typ Siliziumwafer mit einer Dotierung von $N_A^- = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ zusammengefasst.

Tabelle 3.1.: c-Si-Materialparameter (p-Typ, Dotierung: $N_A^- = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$)

| Schichtparameter | | |
|--------------------------|----------------------|---|
| Dielektrizitätskonstante | ϵ_r | 11.9 |
| Elektronenaffinität | χ | 4.05 eV |
| Bandlücke | E_g | 1.124 eV |
| effektive Zustandsdichte | N_C | $2.84 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ |
| effektive Zustandsdichte | N_V | $2.68 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ |
| Mobiltät | μ_n | $1107 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ |
| Mobiltät | μ_p | $425 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ |
| Defektparameter | | |
| Defektdichte | N_{tr} | $10^8 - 10^{11} \text{ cm}^{-3} \text{ bzw. } \text{cm}^{-2}$ |
| Einfangquerschnitte | σ_n, σ_p | 10^{-14} cm^2 |
| Energielage | E_{tr} | 0.562 eV |

3.1.2. Amorphes Silizium

Im Folgenden werden die Grundlagen zu amorphem Silizium zusammengefasst, wie sie in den Büchern von Street und Tanaka diskutiert werden [21, 58]. Weiterhin wird mit dem Defekt-Pool-Modell von Powell und Deane ein Konzept vorgestellt, mit dem sich die Defektverteilung in der a-Si:H-Bandlücke in Abhängigkeit vom Depositionsparameter berechnen lässt [59, 60].

a-Si:H Struktur und Zustandsdichte

Amorphes Silizium zeichnet sich gegenüber kristallinem Silizium durch das völlige Fehlen einer Fernordnung aus. Eine Nahordnung über 1 bis 2 Atomabstände ist jedoch

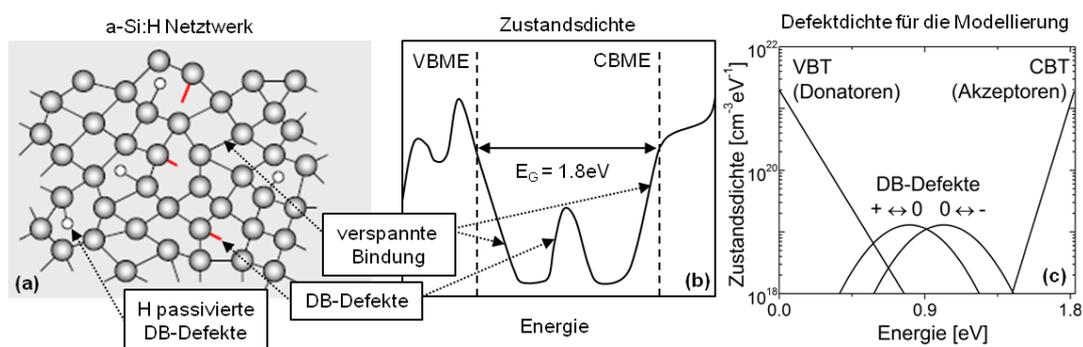


Abbildung 3.1.: a-Si:H Netzwerk (a), schematische Zustandsdichte nach Street [58] (b) und Defektdichte wie sie zur Simulation eingesetzt wird (c). Die Zustände der H-passivierten DB-Defekte liegen im Valenzband.

gegeben, da die Siliziumatome in der Mehrzahl vier kovalente Bindungen eingehen und tetraedrisch koordiniert sind. Die Unordnung im Gitter und die damit einhergehende Verlust der Periodizität des Potentials der Gitteratome führt zu erhöhten Streuprozessen und einer Unbestimmtheit des Impulsvektors k , so dass keine strenge Dispersionsrelation gültig ist, wie sie für kristalline Materialien gefunden wird. Die permanente Ladungsträgerstreuung führt auch dazu, dass sich die Impulserhaltung bei der optischen Absorption nicht mehr limitierend auswirkt, wie dies im kristallinen Silizium der Fall ist. Die Variationen in Bindungslängen und -winkeln (verspannte Bindungen) sowie die ungesättigten bzw. offenen Bindungen (DB-Defekte) führen des Weiteren zu einer stark vom kristallinen Silizium abweichenden Zustandsdichte (siehe Abb. 3.1). Es existieren keine scharfen Bandkanten, sondern die Zustandsdichte nimmt graduell ab, wobei die freien Elektronenzustände in immer stärker lokalisierte Zustände übergehen. Der Übergang von freien Zuständen zu lokalisierten Zuständen geht mit einem Abfall der Leitfähigkeit einher, über die die Valenzband- und Leitungsband-Beweglichkeitskanten (valence/conduction band mobility edge CBME/VBME) definiert sind, die der Bandkanten eines kristallinen Halbleiters entsprechen. Die Bandlücke bzw. Beweglichkeitslücke liegt typischerweise zwischen 1.6 eV und 1.8 eV und die Elektronenaffinität beträgt ca. 3.8 eV. Wie in Abb. 3.1 skizziert, führen die verspannten Bindungen zu bandkantennahen Defektzuständen, die durch eine von den Bandkanten ausgehende, exponentiell abfallende Defektdichte beschrieben werden können. Diese Valenzbandausläufer (valence band tail, VBT) und Leitungsbandausläufer (conduction band tail, CBT) können in Näherung durch folgende Funktionen beschrieben werden:

$$\begin{aligned} N_{CBT}(E) &= N_{CBT0} \exp\left(\frac{E - E_C}{E_{CBT0}}\right) \\ N_{VBT}(E) &= N_{VBT0} \exp\left(\frac{E_V - E}{E_{VBT0}}\right) \end{aligned} \quad (3.1)$$

Die den exponentiellen Abfall charakterisierende Energie wird als Urbachenergie E_{CBT0} , E_{VBT0} bezeichnet. Dabei wird die VBT-Urbachenergie durch die dem Gitter inherente Unordnung bestimmt und ist somit von Depositionsparametern abhängig $E_{VBT0} = (45 - 60)$ meV, während die CBT-Urbachenergie ausschließlich durch thermische Gitterfluktuationen beeinflusst und somit bei Raumtemperatur mit $E_{CBT0} = 26$ meV angegeben wird. Die Zustandsdichten E_{CBT0} und E_{VBT0} geben den Übergang zu den freien Zuständen an ($E_{CBT0} = E_{VBT0} = 2 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$) [61]. Die offenen Bindungen führen zu tiefen Defekten, wobei es wiederum nicht zu einem einzelnen Energieniveau kommt, sondern sich durch die Netzwerkvariationen in der Umgebung des DB-Defekts eine Verteilung der Defektdichte ergibt, die näherungsweise durch eine Gaußverteilung beschrieben werden kann. Dabei werden für die Korrelationsenergie U_{DB} und die Breite der Gaußfunktion σ_G typischerweise Werte von ca. $U_{DB} = 0.2$ eV und $\sigma_G = 0.18$ eV angegeben. Die Werte für die Einfangquerschnitte, die die Rekombinationsrate maßgeblich beeinflussen, sind in der Literatur noch nicht abschließend geklärt. Von Street et al. werden $\sigma_n = 4 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$ und $\sigma_p = 2 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$ angegeben, wobei das Verhältnis von geladenen zu ungeladenen Einfangquerschnitten zu $\sigma_{n,p}^{+,-} / \sigma_{n,p}^0 = 3$ bis 5 bestimmt wurde [62, 63]. In neueren Untersuchungen finden Meaudre und Meaudre Werte zwischen $\sigma = 3 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$ und $7 \times 10^{-18} \text{ cm}^2$, wobei die

Verhältnisse der Verschiedenen Einfangquerschnitte nicht genauer spezifiziert werden [64, 65]. Beck et al. finden mit Photoleitfähigkeitsmessungen für das Verhältnis von geladenen zu ungeladenen Einfangquerschnitten $\sigma_{n,p}^{+,-}/\sigma_{n,p}^0 = 50 \pm 25$ [66]. In Simulationsstudien, in denen die Einfangquerschnitte indirekt bestimmen werden, ergeben sich für DB-Defekte an der Grenzfläche sogar Werte von $\sigma_{n,p}^{+,-}/\sigma_{n,p}^0 = 500$ bzw. 2000 [32, 67, 68]. Wir nehmen hier Werte von $\sigma_{n,p} = 10^{-16} \text{ cm}^2$ an, mit einem Verhältnis von $\sigma_{n,p}^{+,-}/\sigma_{n,p}^0 = 10$, und diskutieren Abweichungen, die durch eine Variation der Einfangquerschnitte verursacht werden können, gesondert.

$$N_{DB}(E) = N_{DB} \exp\left(-\frac{(E - E_{DB})^2}{2\sigma_G^2}\right) \quad (3.2)$$

Amorphe Schichten ohne Beimengung von Wasserstoff haben mit $(10^{19} - 10^{20}) \text{ cm}^{-3}$ eine so hohe DB-Defektkonzentration, dass sie elektronisch nicht sinnvoll genutzt werden können. Der Wasserstoffgehalt, der in Schichten mit guter elektronischer Qualität typischerweise 10 – 15 % beträgt, ermöglicht eine Passivierung der DB-Defekte, so dass Defektdichten von $(10^{16} - 10^{18}) \text{ cm}^{-3}$ erreicht werden können (siehe Abb. 3.1). Die Zustände der mit Wasserstoff abgesättigten Bindungen liegen im Valenzband und stellen somit keine Rekombinationszentren mehr da. Bei der Schichtoptimierung spielt folglich der Wasserstoffgehalt eine entscheidende Rolle, wobei neben der Wasserstoffkonzentration auch seine Verteilung entscheidend ist, und es neben der Reduzierung der Defektdichte auch zu einem Absenken der Valenzbandkante und zu einer Verringerung der VBT-Urbachenergie kommt. Dieser Zusammenhang wurde, für die im Rahmen dieser Arbeit analysierten Schichten, im Detail von Korte et al. und Schulze et al. untersucht [69, 70].

Dotierte a-Si:H Schichten

Wie in kristallinem Material kann p-Typ bzw. n-Typ amorphes Silizium durch eine Dotierung mit Phosphor und Bor hergestellt werden (siehe Abb. 3.2) [71]. Aufgrund der hohen Koordinationsfreiheit in dem ungeordneten Netzwerk ist allerdings nur ein geringer Anteil der Dotieratome aktiv, und aufgrund der hohen Defektdichte im Material kommt es zu einer starken Kompensation der Defekte. Die Variation des Fermi-niveaus ist somit begrenzt und er kann nicht beliebig nah an die Bandkanten gebracht werden, was wiederum die maximale Leitfähigkeit begrenzt. Wie bereits erwähnt, ist die Ladungsträgerstreuung in einem amorphen Netzwerk stark erhöht, so dass sich kleine Mobilitäten ergeben. Bei einer detaillierten Beschreibung der Mobilität müssen Einfang- und Reemissionsprozesse in flachen Defekten sowie Hopping-Prozesse berücksichtigt werden. In AFORS-HET ist allerdings kein detailliertes Modell für Transport in a-Si:H implementiert, und es wird mit effektiven Mobilitäten gerechnet ($\mu_n \approx 5 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$, $\mu_p \approx 1 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$). Dieser einfache Ansatz lässt sich dadurch rechtfertigen, dass die a-Si:H Schichten im Vergleich zu dem kristallinen Absorber nur sehr dünn sind und des weiteren keine Temperaturabhängigkeiten untersucht werden. In mehreren experimentellen Untersuchungen konnte gezeigt werden, dass höhere Dotierungen auch mit einer erhöhten DB-Defektdichte einhergehen (siehe Abb. 3.2) [72]. Dabei ist nicht nur die Defektdichte abhängig von der Dotierung sondern auch die energetische Verteilung der Defekte wie im Folgenden gezeigt wird.

Tabelle 3.2.: Materialparameter von amorphem Silizium

| | | |
|-------------------------------------|--------------------------|---|
| Schichtparameter | | |
| Dielektrizitätskonstante | ϵ_r | 11.9 |
| Elektronenaffinität | χ | 3.9 eV |
| Bandlücke | E_g | 1.75 – 1.95 eV |
| effektive Zustandsdichte | N_C, N_V | $2 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ |
| Mobilität | μ_n | $5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ |
| Mobilität | μ_p | $1 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ |
| Parameter der Leitungsbandausläufer | | |
| maximale Zustandsdichte | E_{CBT0}, N_{VBT0} | $2 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ |
| VBT Urbachenergie | E_{VBT0} | 0.04 – 0.06 eV |
| CBT Urbachenergie | E_{CBT0} | 0.026 eV |
| Parameter der DB-Defekte | | |
| Defektdichte am Maximum | N_{DB} | $10^{16} - 10^{19} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-3}$ |
| Einfangquerschnitte | σ_p^0, σ_n^0 | 10^{-16} cm^2 |
| Einfangquerschnitte | σ_n^+, σ_p^- | 10^{-15} cm^2 |
| Energielage der Gaußfunktion | E_{DB} | variabel |
| Gaußbreite | σ_G | 0.18 eV |
| Korrelationsenergie | U_{DB} | 0.2 eV |

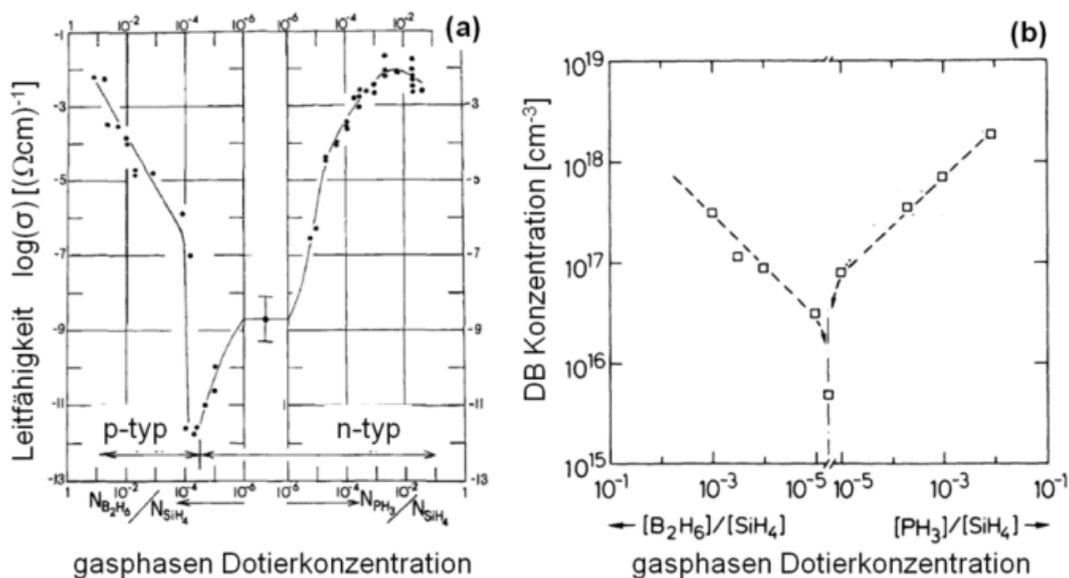


Abbildung 3.2.: Dotierabhängige Leitfähigkeit bestimmt von LeComber und Spears (a) (Abbildung aus [73]). DB-Defektdichte bestimmt mittels Sub-Bandlücken-Absorptionsmessungen von Stutzmann et al. (Abbildung aus [72])

Defekt-Pool-Modell

Mit Hilfe des Defekt-Pool-Modell von Powell und Deane lässt sich die Defektdichte in Abhängigkeit vom Fermi-niveau berechnen [59, 60]. Das Modell beschreibt die Thermodynamik der amorphen Netzworfbildung und der damit einhergehenden Gitterdefektbildung. Die amorphe Struktur stellt einen metastabilen Gitterzustand da, der sich in Abhängigkeit der Abkühlrate unterhalb einer bestimmten Glasktemperatur T^* einstellt und dann quasi eingefroren ist. Dieser Vorgang kann über einen quasi-Gleichgewichtsprozess von verspannten Bindungen zu offenen Bindungen und H-passivierten Bindungen in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration und dem Fermi-niveau beschrieben werden. Bei dem Gleichgewicht zwischen dem Aufbrechen einer verspannten Bindung und der Verknüpfung zweier offener Bindungen zu einer verspannten Bindung spielt der Wasserstoff eine entscheidende Rolle, da er offene Bindungen absättigen kann und die Rücktransformation damit beeinflusst. Die Anlagerung eines Wasserstoffatoms hängt wiederum vom Ladungszustand der offenen Bindung ab und ist somit abhängig vom Fermi-niveau. Die Defektdichte im Gleichgewicht erhält man durch Minimierung der freien Energie dieses Systems. Ohne auf weitere Details einzugehen, sollen die Ergebnisse des Defekt-Pool-Modells von Powell und Deane vorgestellt werden, das in der a-Si:H Bauteilsimulation vielfach eingesetzt wird, um realistische Defektdichten und Verteilungen für die Definition der amorphen Schichten zu berechnen.¹ Sieht man den VBT mit E_{VBT0} und N_{VBT0} als gegeben an, so hängt die DB-Defektverteilung N_{tr}^{DB} von der Verteilung möglicher DB-Defekte P und von der Anzahl der neutralen Defekte ab, die über die Besetzungsfunktion F^{0*} (Gl. (2.40)) bei der Glasktemperatur T^* bestimmt ist:²

$$N_{tr}^{DB}(E) = \left(\frac{2}{F^{0*}} \right)^{\frac{\rho k T^*}{E_{VBT0}^*}} P \left(E + \frac{\rho \sigma^2}{E_{VBT0}^*} \right) \gamma, \quad (3.3)$$

mit:

$$\gamma = \left(\frac{2N_{VBT0}(E_{VBT0}^*)^2}{2E_{VBT0}^* - kT^*} \right)^\rho \left(\frac{i}{2H} \right)^{\rho-1} \exp \left(-\frac{\rho}{E_{VBT0}^*} \left(E_P - E_V - \frac{\rho \sigma^2}{2E_{VBT0}^*} \right) \right),$$

$$\rho = \frac{2E_{VBT0}^*}{2E_{VBT0}^* + ikT^*},$$

$$P(E) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{(E - E_P)^2}{2\sigma^2} \right).$$

Die Gaußfunktion $P(E)$ wird als Defekt-Pool, mit der Poolbreite σ und Position E_P , bezeichnet und gibt die Verteilung möglicher Defekte an. Die Größe i gibt die Anzahl, der Wasserstoffatome an, die an der Defektreaktion beteiligt sind und H ist die Wasserstoffkonzentration der Schicht. In Abb. 3.3 ist zu erkennen, dass sich das Maximum der DB-Defektdichte entgegengesetzt zum Fermi-niveau verschiebt

¹Ein anerkannter Simulator zur Simulation von a-Si:H Solarzellen, der das Defekt-Pool-Modell nutzt ist: Advanced Semiconductor Analysis (ASA) [74].

²Größen bei der Glasktemperatur werden im Folgenden durch den Index * gekennzeichnet.

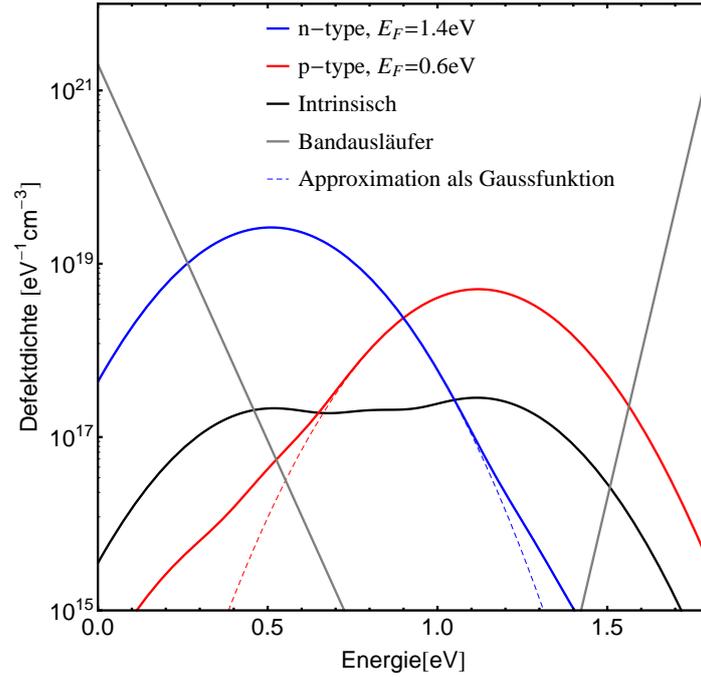


Abbildung 3.3.: Defektdichte in Abhängigkeit des Fermi-niveaus bei vorgegebenen VBT von 50 meV, berechnet nach dem Defekt-Pool-Modell von Powell und Deane Gl. (3.3) [59]. Die gestrichelten Linien sind Gaußfunktionen mit denen man die Defektverteilung von dotierten Schichten approximativ beschreiben kann.

und für dotierte Schichten erhöht ist. Die Verteilung lässt sich im Fall von dotierten Schichten gut durch eine Gaußverteilung annähern. Die intrinsischen Schichten hingegen weisen eine stark verbreiterte Defektdichte auf. Die Defekt-Pool Parameter sind nicht abschließend geklärt. Paul und Deane finden für $T^* = 500$, $\sigma = 0.178$ eV, $E_P = E_i + 0.22$ eV mit dem intrinsischen Fermi-niveau E_i und $i = 2$ gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten [59]. Als freie Parameter verbleiben die Wasserstoffkonzentration H , die Urbachenergie des VBT E_{VBT0}^* und das Fermi-niveau E_F^* . Diese werden in dieser Arbeit entsprechend den Depositionsparametern angepasst, dabei lassen sich die Valenzbandparameter aus der Photoelektronenspektroskopie bestimmen [70, 75]. Mit Hilfe des Defekt-Pool-Modells lassen sich folglich die freien Parameter, die die Defektdichte in a-Si:H bestimmen, stark reduzieren und auf zugängliche Messgrößen zurückführen. Dabei müssen die Rechnungen zur Bestimmung der Defektdichte bei der Glastemperatur durchgeführt werden, bei der sich im Allgemeinen ein anderes Fermi-niveau einstellt als bei Raumtemperatur. Aufgrund der hohen Defektdichten kann keine analytische Lösung für das temperaturabhängige Fermi-niveau gefunden werden und es muss numerisch entsprechend Gleichung Gl. (2.5) bestimmt werden. Ebenso besitzt der VBT eine Temperaturabhängigkeit $E_{VBT0}(T)^2 = E_{VBT0}(0)^2 + (kT)^2$, da die thermischen Gitterschwingungen zu einer Bindungslängen- und Winkel-Fluktuation führen [76].

3.1.3. Polykristallines Silizium

Während man in a-Si:H und c-Si von einer homogenen Defektverteilung ausgehen kann, ist dies bei poly-Si nicht der Fall, da hier Korngrenzen und Versetzungen auftreten. Im Folgenden werden einige Grundlagen zu Korngrenzen und Versetzungen diskutiert und spezielle Erkenntnisse zu diesen Defekttypen in poly-Si vorgestellt.

Grundlagen zu Korngrenzen

Korngrenzen sind Grenzflächen zwischen zwei Einkristallen desselben Materials mit unterschiedlichen räumlichen Orientierungen. An diesen Grenzflächen kommt es typischerweise zu Gitterfehlern, so dass Korngrenzen als zweidimensionale Defekte betrachtet werden müssen. Anzahl und Art der Gitterfehler hängen von der räumlichen Orientierung der beiden Kristalle zueinander ab. Neben diesen intrinsischen Korngrenzdefekten kann es an Korngrenzen auch zur Ausbildung von Versetzungen und zur Segregation von Fremdatomen kommen. Experimentell lassen sich Kornorientierungen mittels Elektronenrückstreubeugung (electron backscatter diffraction, EBSD) bestimmen.

Im Zusammenhang mit der Optimierung von Solarzellen ist von besonderem Interesse, wie sich die strukturellen Eigenschaften der Korngrenze auf die elektronischen Verhältnisse auswirken. Zum einen führt eine hohe Defektdichte zu hohen Rekombinationsraten an der Korngrenze. Hierbei ist zu beachten, dass je nach Ladungszustand der Defekte eine Bandverbiegung an der Korngrenze entstehen kann, was zu einer räumlichen Trennung von Majoritäts- und Minoritätsladungsträgern führt und somit wiederum die Rekombination beeinflusst. Zum anderen muss beachtet werden, dass solch eine Bandverbiegung zu einer Barriere führt, die den Ladungsträgertransport über die Korngrenze behindert.

Die Grundlage der wissenschaftlichen Diskussion zu den elektronischen Verhältnissen an Korngrenzen ist ein Modell von Seto, der Hall-Messungen an p-leitendem polykristallinen Silizium durchführte [77]. Seto erklärt seine Messergebnisse unter Annahme von Potentialbarrieren, die durch an der Korngrenze lokalisierte Ladungen hervorgerufen werden. Die Ladungen bilden sich, da die Gitterdefekte, die üblicherweise an Korngrenzen auftreten zu „trapping states“ führen und Ladungsträger einfangen. Der Ladungsträgertransport über die Potentialbarrieren wird unter Vernachlässigung von Tunneleffekten durch thermische Emission erklärt. Nimmt man an der Korngrenze lokalisierte, positive Ladungen an und löst, unter Annahme einer abrupten Verarmungszone, die Poissongleichung, so ergibt sich eine Barriere im Leitungs- und Valenzband sowie im Vakuumniveau (siehe Abbildung 2.4).

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= \frac{e^2 N_A^-}{\epsilon_r \epsilon_0} (|x - p| - d)^2 + \varphi_0 \quad \text{für } |x - p| \leq d \\ \varphi(x) &= \varphi_0 \quad \text{für } |x - p| > d \end{aligned} \quad (3.4)$$

Hier ist d die Breite der Raumladungszone und p die Position der Korngrenze. Die numerischen Simulationen mit AFORS-HET ermöglichen eine genauere Beschreibung der Korngrenzen. So ist die Berechnung der bei vorgegebener Defektdichte an der Korngrenze in Abhängigkeit von den quasi-Ferminiveaus vorherrschenden Ladungs-

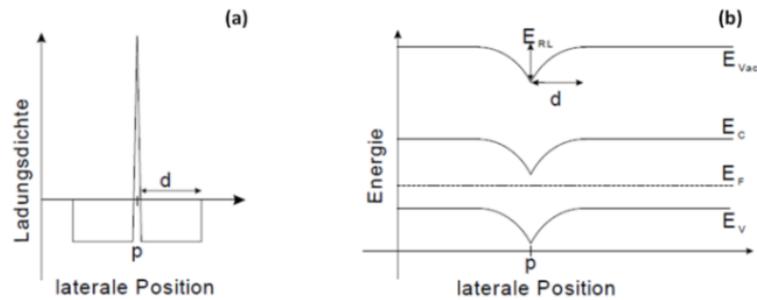


Abbildung 3.4.: (a) zeigt die Verteilung der Ladung und (b) die Potentialbarriere im Vakuumniveau E_{Vac} , im Leitungsband E_C und im Valenzband E_V . Das Fermi-niveau E_F ist ebenfalls eingezeichnet

und Potentialbarriere möglich. Dies ermöglicht es, die injektions-abhängige Bandverbiegung und Rekombinationsrate an Korngrenzen zu berechnen und damit auch die injektionsabhängige Ladungsträgerlebensdauer. Dabei können nicht nur Defekte mit einem einzelnen Energieniveau sondern auch Defektverteilungen berücksichtigt werden. Der Transport über Korngrenzen wird in dieser Arbeit nicht weiter diskutiert, da der Ladungsträgertransport in den untersuchten Strukturen parallel zur Korngrenze verläuft. Um den Transport parallel zur Korngrenze berechnen zu können, sind 2D- oder 3D-Rechnungen nötig.

Korngrenzen und Versetzungen in poly-Si

In der Literatur werden für poly-Si zwei Defekttypen diskutiert, die die elektronische Qualität insbesondere bestimmen. Das sind zum einen Hochenergie-Korngrenzen und zum anderen Schraubenversetzungen. Beide Defekttypen werden im Folgenden kurz vorgestellt. Korngrenzen in poly-Si müssen wie oben diskutiert, entsprechend ihrer Struktur unterschieden werden. Dabei sind die besonders rekombinationsaktiven Korngrenzen mit vielen offenen Bindungen energetisch besonders ungünstig und werden in der Literatur oft als „Hochenergie-Korngrenzen“ bezeichnet. Experimentelle Ergebnisse legen nahe, dass an Hochenergie-Korngrenzen in poly-Si Defektdichten und Verteilungen auftreten können, die denen in a-Si:H-Schichten entsprechen (siehe Abb. 3.5) [81, 82]. Dass Korngrenzen mit hoher struktureller Unordnung und

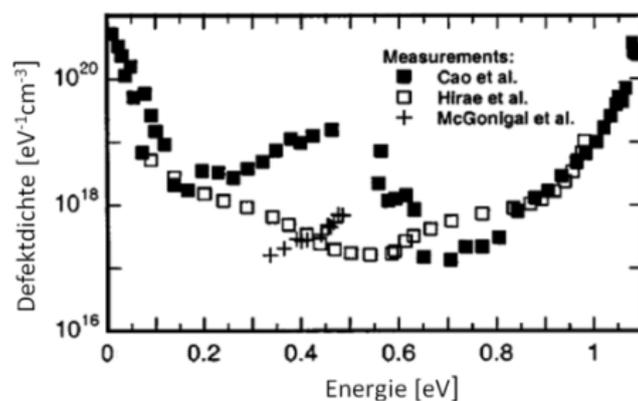


Abbildung 3.5: Messung der Defektverteilung an Hochenergie-Korngrenzen von Cao [78] und Hirae [79] (Abbildung aus [80]). Die Defektverteilung verhält sich so, wie es auch vom Defekt-Pool-Modell vorhergesagt wird.

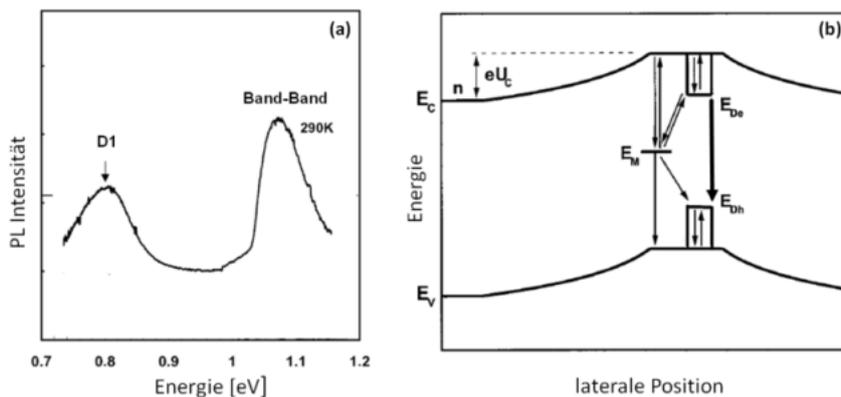


Abbildung 3.6.: Energienivauschema einer mit Metallverunreinigungen dekorierten Versetzung in Poly-Si (Fig. (b) aus [86]). Der Übergang zwischen den SDBs ($E_{De} \rightarrow E_{Dh}$) ist als D1-Peak im PL-Spektrum zu sehen (Fig. (a) aus [87]). Die Gesamtrekombination ist erhöht wenn eine Metallverunreinigung einen tiefen Defekt E_M erzeugt

Defektdichten wie bei a-Si:H-Schichten auftreten können, zeigt sich auch in molekulardynamischen Rechnungen, die den Kristallisierungsprozess von nano-kristallinem Silizium aus einer Schmelze simulieren [83, 84]. Altermatt et al. zeigen in einer Zusammenfassung vieler experimenteller Ergebnisse, dass sich die an den Grenzflächen auftretenden Defektdichten, wie bei a-Si:H, im Rahmen des Defekt-Pool-Modells erklären lassen [80, 85].

Neben den auftretenden Korngrenzen muss davon ausgegangen werden, dass in poly-Si-Schichten im Vergleich zu kristallinem Silizium hoher Qualität viele Versetzungen auftreten. Die dabei entstehenden Defektniveaus werden detailliert von Kveder et al. [86] und Kittler et al. [87] beschrieben. Die mit Versetzungen in poly-Si verbundene Spannung führt dazu, dass sich bandkantennahe Zustände (shallow dislocation bands, SDB) ausbilden, über die eine Ladungsträgerrekombination stattfinden kann [88] (siehe Abb. 3.6 (a)). An Orten hoher Versetzungsdichte zeigt sich in PL-Messungen eine Abnahme der Band-zu-Band-Rekombination während der Übergang zwischen den SDBs bei 0.8 eV sichtbar wird [87] (siehe Abb. 3.6 (b)). EBIC-Messungen zeigen, dass die Rekombination zwischen den SDBs verstärkt wird, wenn zusätzlich Metallverunreinigungen vorliegen [86]. Der mit der Metallverunreinigung verbundene tiefe Defekt fungiert bei der Rekombination als Zwischenzustand, so dass die D1-Linie in PL-Messungen abgeschwächt wird.

Um die Zahl der Rekombinationszentren, die mit den oben genannten strukturellen Defekten verbunden sind zu minimieren, werden poly-Si-Schichten typischerweise temperaturbehandelt, so dass sich Verspannungen im Material ausgleichen können [89]. Weiterhin werden die Schichten üblicherweise einer Wasserstoffpassivierung unterzogen, bei der die offenen Bindungen, wie bei a-Si:H, teilweise mit H-Atomen abgesättigt werden [90]. Auf der anderen Seite ist eine geringe Verunreinigung mit Fremdatomen essentiell, unter anderem, um die Rekombination über Versetzungsdefekte zu minimieren. Wie im c-Si ist die Eisenkonzentration besonders kritisch. Des Weiteren muss die Anzahl der Hochenergie-Korngrenzen gering gehalten, bzw. die Korngröße insgesamt erhöht werden.

| Rekordsolarzellenparameter | | | | |
|----------------------------|---------------|------------------|-----------------------------------|-----------|
| | η [%] | V_{OC} [eV] | j_{SC} [$\frac{mA}{cm^2}$] | FF [%] |
| Sanyo | | | | |
| c-Si(n) | 23 | 729 | 39.5 | 80 |
| HZB | | | | |
| c-Si(n) | 19.8 | 639.4 | 39.3 | 78.9 |
| c-Si(p) | 17.4 | 629.0 | 34.9 | 79.0 |

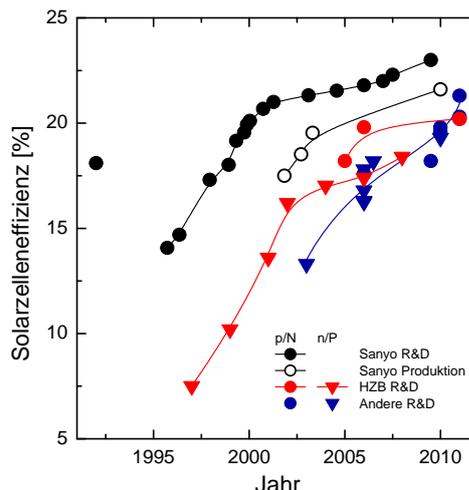


Abbildung 3.7.: Parameter der Rekordsolarzellen von Sanyo und vom HZB und zeitliche Entwicklung der Zelleffizienzen (Abb. aus [45]). Die Zelleffizienzen deuten auf einen Vorteil der a-Si:H(p)/c-Si(n) gegenüber der invertierten Struktur hin. Des weiteren zeigt sich, dass bei den HZB Zellen ein Potential zur Optimierung der Leerlaufspannungen von fast 100 meV besteht.

3.2. Solarzellenkonzepte

Die Zellkonzepte, die hier vorgestellt werden, sind zum einen die wafer-basierte a-Si:H/c-Si-Solarzelle und zum anderen die Dünnschichtzelle mit Poly-Si-Absorber und Kontaktschichten. Dabei ist als Ausblick auch von Interesse, ob sich die poly-Si-Zelle mit a-Si:H-Kontaktschichten optimieren lässt.

3.2.1. Amorph/kristalline Heterostruktursolarzelle

Heterostruktursolarzellen werden am HZB seit 1997 entwickelt und es konnten Effizienzen von bis zu 19.8 % auf n-Typ Wafern und 17.4 % auf p-Typ Wafern erreicht werden [91]. Dabei sind a-Si:H/c-Si-Heterostruktursolarzellen nicht nur von akademischen Interesse, sondern ihr Kosten/Effizienz-Verhältniss ist so gut, dass sie von Sanyo kommerzialisiert wurden. Bereits 1992 konnte Sanyo mit Effizienzen von > 16 % einen Rekord für diesem Zelltyp aufstellen [92]. In publizierten Zellergebnissen von 2009 wird eine Effizienz von 22 % angegeben [2] und in aktuellen Presseberichten sogar von 23 %. In Abb. 3.7 ist die zeitliche Entwicklung der a-Si:H/c-Si-Zelloptimierung zusammengefasst. Ein detaillierterer Vergleich der Rekordzellen vom HZB und Sanyo zeigt, dass insbesondere die Leerlaufspannung der HZB-Zellen noch Potential für Verbesserungen bietet. Die erhöhte Leerlaufspannung kann mit einer zusätzlichen dünnen, nominell intrinsischen Pufferchicht (i-Layer) zusammenhängen, die bei den Sanyo Zellen eingesetzt wird, um die Grenzflächendefektdichte abzusenken [92, 93]. Diese Konzept der Sanyo HIT-Zelle (Heterokontaktzelle mit dünner intrinsischen Schicht, heterojunction with intrinsic thin layer) wird auch im Rahmen dieser Arbeit untersucht.

Der a-Si:H/c-Si-Heterokontakt

Im Folgenden wird verdeutlicht, wie der Vorteil der a-Si:H/c-Si-Solarzellen gegenüber Siliziumwaferzellen mit diffundiertem Emitter mit der Ausbildung des Heteroübergangs zusammenhängt. Aufgrund der höheren a-Si:H-Bandlücke kommt es zu Sprüngen im Leitungsband (conduction band offset, CB-Offset) und im Valenzband (valence band offset, VB-Offset). Mit Hilfe verschiedener experimenteller Methoden konnten der VB-Offset³ und die a-Si:H-Bandlücke⁴ in Abhängigkeit von den a-Si:H-Depositionsparametern bestimmt werden, so dass die Bandstruktur festgelegt ist. Es zeigt sich, dass die Bandlücke zwischen 1.75 eV und 1.95 eV variiert, und dass es damit einhergehend zu einer Variation des VB-Offsets zwischen 0.430 eV und 0.630 eV kommt, während der Offset im Leitungsband als relativ konstant bei 200 eV angenommen werden kann [69, 70]. Damit ergeben sich in Abhängigkeit von den Offsets und dem Dotierlevel und der a-Si:H-Defektkonzentration verschiedene mögliche Bandstrukturen. In Abb. 3.8 ist zu erkennen, dass der Hauptanteil der Bandverbiegung in der kristallinen Schicht abfällt. Vernachlässigt man die kleine Bandverbiegung in der amorphen Schicht, so berechnet sich die **Dunkelbandverbiegung** im c-Si aus den Fermi-niveaus der Schichten und den Offsets:

$$\begin{aligned} \text{a-Si:H(p)/c-Si(n)} : \quad e\Delta\varphi &= (E_F - E_{VB}^{aSi}) - (E_F - E_V^{cSi}) + \Delta E_{VB} \\ \text{a-Si:H(n)/c-Si(p)} : \quad e\Delta\varphi &= (E_V^{cSi} - E_F) - (E_{VB}^{aSi} - E_F) + \Delta E_{CB} \end{aligned} \quad (3.5)$$

Dabei berechnet sich das Fermi-niveau in der kristallinen Schicht mit Gl. (2.1) direkt aus der Dotierung. Die Fermi-niveaulage in den a-Si:H-Schichten hingegen ist durch die Dotierung sowie durch die Defekte der Bandausläufer sowie die DB-Defekt und deren energetischen Lage bestimmt und muss numerisch mit Gl. (2.2) berechnet werden. Des weiteren wird die Bandverbiegung durch die jeweiligen Bandoffsets erhöht. Verglichen mit Homokontaktsolarzellen mit diffundierten Emitter, haben Heterokontaktsolarzellen das Potential für besonders hohe Leerlaufspannungen. Bei Homokontaktsolarzellen ist die Leerlaufspannung durch die Dunkelbandverbiegung beschränkt, die sich aus den Dotierungen ergibt. Dies erzwingt hohe Emitterdotierungen und es zeigt sich, dass die Leerlaufspannung auf 650 eV beschränkt ist [95]. In Heterokontaktsolarzellen kann durch geschicktes Design die Dunkelbandverbiegung zusätzlich durch die Offsets verstärkt werden, wie in Abb. 3.8 und Gl. (3.5) zu erkennen ist. Weiterhin ist es prinzipiell auch möglich, dass unter Beleuchtung die Bänder nicht nur flach sind und sich somit $V_{OC} = e\Delta\varphi$ ergibt, sondern dass sich die Bänder sogar in die andere Richtung verbiegen und somit Leerlaufspannungen ermöglichen, die höher als die Dunkelbandverbiegung sind. Dies ist jedoch bei der a-Si:H/c-Si-Zelle nicht der Fall, wie später noch gezeigt wird. Neben den hohen Dunkelbandverbiegungen besteht ein weiterer Vorteil der a-Si:H/c-Si darin, dass die Bandverbiegung im kristallinen Teil abfällt und die Ladungsträger somit in einem Zellgebiet getrennt werden, in dem geringe Defektdichten vorherrschen. An der Grenzfläche, an der mit erhöhten Defektdichten zu rechnen ist, ist die Konzentration des einen Ladungsträgertyps abgesenkt, was die Rekombination gering hält und somit eine hohe Fermi-niveaueaufspaltung bzw.

³Bestimmung des VB-Offsets mittels PES [69] und des CB-Offsets mittels Leitfähigkeitsmessungen [94].

⁴Bestimmung der Bandlücke mittels Ellipsometrie [70].

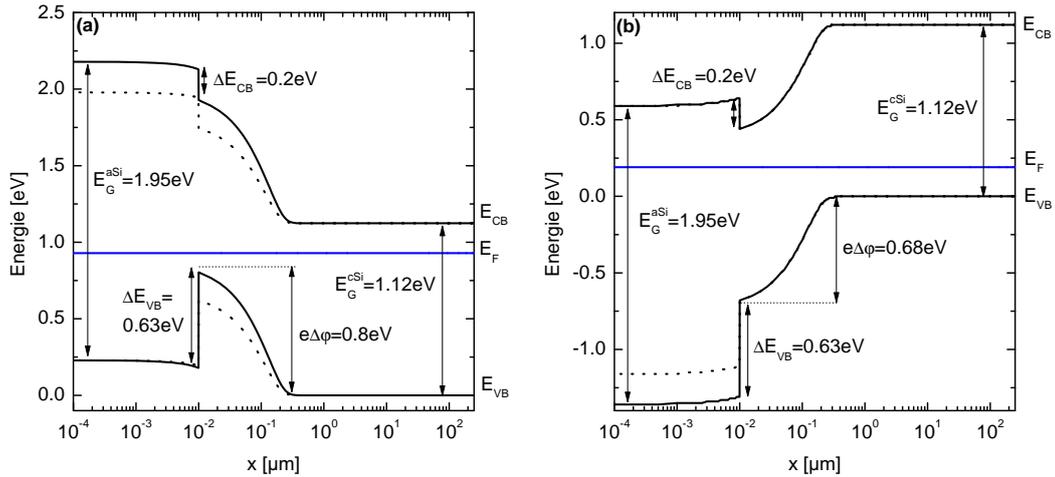


Abbildung 3.8.: Banddiagramm des a-Si:H(p)/c-Si(n) (Abb. a) und des a-Si:H(n)/c-Si(p)- (Abb. b) Heterokontakts für eine a-Si:H-Schicht mit maximaler Bandlücke 1.95 eV (durchgezogene Linie) und mit minimaler Bandlücke von 1.75 eV (gestrichelte Linie). Die Dunkelbandverbiegung $e\Delta\varphi$ stellt sich entsprechend der Fermienergie und des Offsets ein. Für die c-Si-Dotierung von $1.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ergibt sich der Abstand zwischen Fermienergie und VB bzw. CB von 0.2 eV. Für die a-Si:H(p)-Schicht wurde ein Fermienergie von 0.6 eV oberhalb des VBs und für die a-Si:H(n)-Schicht ein Fermienergie von 0.4 eV unterhalb des CBs angenommen. Die Bandstruktur wurde mit AFORS-HET berechnet, wobei die a-Si:H-Defektverteilung entsprechend dem Defekt-Pool-Modell Gl. (3.3) für $E_{VBT0} = 50 \text{ meV}$ berechnet wurde.

implizite Leerlaufspannungen (Gl. (2.63)) ermöglicht. Dieser Effekt wird im Rahmen dieser Arbeit des öfteren unter dem Namen **Feldefekt-Passivierung** diskutiert werden. Dabei ist zu beachten, dass zur Berechnung der Rekombinationsrate unter V_{OC} Bedingungen die Ladungsträgertrennung nicht durch die Dunkelbandverbiegung sondern die Bandverbiegung bei $AM1.5$ und $j = 0$ gegeben ist. Ein weiterer Vorteil der a-Si:H/c-Si-Zelle besteht darin, dass a-Si:H hervorragend dazu geeignet ist die offenen Bindungen an der a-Si:H/c-Si zu passivieren und somit die Defektdichte gering zu halten. Dieser Effekt wird im Laufe der Arbeit unter dem Begriff **Defekt-Passivierung** diskutiert. Wie bereits für die Defektdichten im a-Si:H-Volumen diskutiert wurde, ist auch an der Grenzflächen von dotierten a-Si:H-Schichten eine gegenüber den intrinsischen Schichten erhöhte Defektdichte vorzufinden, die sich negativ auf das V_{OC} auswirkt [93, 96, 97]. Um diesen Effekt zu umgehen, wurden von Sanyo das HIT-Zellen-Konzept mit der dünnen, nominell intrinsischen Pufferschicht entwickelt, die die Grenzflächendefekte nochmals stark reduziert, damit besonders geringe SRVs ermöglicht und Leerlaufspannungen von bis zu $V_{OC} = 730 \text{ eV}$ [2].

In Hinblick auf die vergleichsweise geringen Leerlaufspannungen von $V_{OC} = 630 \text{ eV}$, die bisher am HZB erreicht werden konnten stellt sich die Aufgabe den a-Si:H(p)/a-Si:H(i)/c-Si(n) bzw. a-Si:H(n)/a-Si:H(i)/c-Si(p) Schichtstapel zu optimieren. Im Rahmen dieser Arbeit werden photoelektrische Charakterisierungsmethoden und Simulationen eingesetzt um ein genaueres Verständnis für die V_{OC} bestimmenden Effekte: Dunkelbandverbiegung sowie Feldefekt- und Defekt-Passivierung zu erarbeiten.

Neben den oben diskutierten Effekten der Heterokontakts auf Leerlaufspannung

und Rekombination, muss auch der Transport über diese Grenzfläche speziell diskutiert werden. Zellparameter, die dadurch beeinflusst werden sind Kurzschlussstrom und Füllfaktor. Es sei noch erwähnt, dass unter V_{OC} -Bedingungen zwar kein Gesamtstrom fließt $j = j_n + j_p = 0$, dass aber Elektronen- und Lochstrom einzeln nicht verschwinden, so dass beispielsweise ein Teilchenstrom in das a-Si:H hinein mit anschließender Vernichtung der Ladungsträger durch Rekombination denkbar ist, so dass indirekt auch die Leerlaufspannung durch Transportprozesse beeinflusst werden kann. Der Stromtransport über Heterokontakte kann dabei zum einen durch das Drift-Diffusionsmodell beschrieben werden, wobei sich eine stromtreibende Kraft aus den Bandoffsets ergibt (siehe Gl. (2.15), Gl. (2.16) und Abb. 2.9). Zum anderen kann er durch das Modell der thermionischen Emission beschrieben werden, bei der der Strom durch die thermisch über den Offset angeregten Ladungsträger bestimmt wird. Wie in Abb. 3.8 zu erkennen ist, führen beide Effekte demnach für die a-Si:H(p)/c-Si(n) -Zelle zu einer Barriere im Valenzband und ein den Transport begünstigende Offset im Leitungsband. Für die a-Si:H(n)/c-Si(p) -Struktur haben die Offsets genau den umgekehrten Einfluss auf den Strom. Mehrere Untersuchungen deuten allerdings darauf hin, dass Tunnelprozesse den Transport beeinflussen und für ein detaillierteres Verständnis und realistische Simulationen des Transports weitergehende Modelle entwickelt werden müssen [98–100].

Das a-Si:H/c-Si-Zellkonzept

Die Herstellung von a-Si:H/c-Si -Solarzelle erfolgt typischerweise durch plasmaunterstützte chemische Dampfabcheidung (**plasma-enhanced chemical vapour deposition**, PECVD) von a-Si:H-Schichten auf Siliziumwafern. Eine Dotierung der a-Si:H-Schichten erreicht man durch Beimengung von wasserstoffverdünnetem Diboran oder Phosphin zum Silan-Precursorgas. Eine chemische Reinigung der Waferoberflächen vor der Deposition ist dabei essentiell, um geringe Grenzflächendefektdichten zu ermöglichen.⁵ Details zur Prozessierung und insbesondere zur a-Si:H-Abscheidung finden sich in der Arbeit von Schulze [45].

In der a-Si:H/c-Si -Solarzelle wird der a-Si:H(p)/c-Si(n) bzw. a-Si:H(n)/c-Si(p) Heterokontakt zur Ladungsträgertrennung eingesetzt, wobei man die a-Si:H-Schichten hier als Emitterschichten bezeichnet. Ebenfalls führt man an der an der Rückseite a-Si:H(n+)/c-Si(n) bzw. a-Si:H(p+)/c-Si(p) Heterokontakte ein, um über eine Feldeffekt-Passivierung die Rekombination an der Rückseite zu minimiert. An den Heterokontakten zum Emitter und zum BSF können durch den Einbau einer dünnen i-Pufferschichten die Grenzflächendefektdichten minimiert werden. Es ist dabei zu beachten, dass die a-Si:H-Schichten und insbesondere die dotierten Schichten sehr dünn gehalten werden, da sie zum einen zu einer parasitären Absorption führen und zum anderen mit einem Serienwiderstand verbunden sind. Die Schichten werden als „elektronisch tote Schichten“ bezeichnet, da es aufgrund der hohen Defektdichte und der fehlenden Bandverbiegung zu keiner Ladungsträgertrennung kommt, sondern alle generierten Ladungsträger durch Rekombination verloren gehen. Darüber hinaus sind sie aufgrund ihrer geringen Mobilitäten im Vergleich zu c-Si-Emittern benachteiligt.

⁵Es wird die Reinigungsprozedur der Radio Company of America (RCA Reinigung) [101] und ein zweiter Reinigungsschritt in 1 %-HF-Lösung durchgeführt

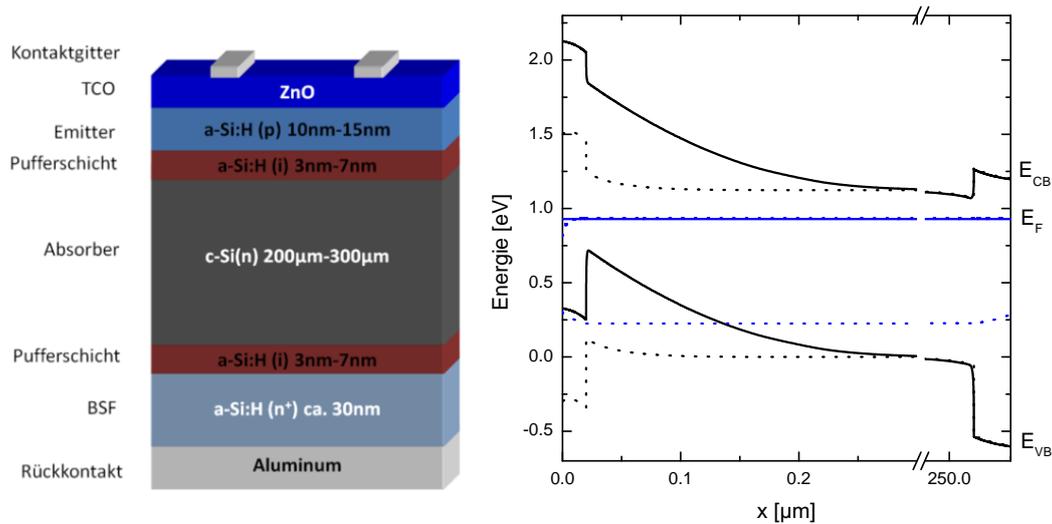


Abbildung 3.9.: Zellstruktur und Banddiagramm der a-Si:H(p)/c-Si(n) Heterokontaktsolarzelle für eine a-Si:H-Schicht mit einer Bandlücke von 1.8 eV im Dunkeln (durchgezogene Linie) und bei V_{OC} -Bedingungen (AM1.5 Beleuchtung und $j = 0$) (gestrichelte Linie). Für die c-Si-Dotierung von $1.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ergibt sich der Abstand zwischen Fermi-niveau und VB von 0.2 eV. Für die a-Si:H(p)-Schicht wurde ein Fermi-niveau von 0.6 eV oberhalb des VBs angenommen. Die Bandstruktur wurde mit AFORS-HET berechnet, wobei die a-Si:H-Defektverteilung entsprechend dem Defekt-Pool-Modell Gl. (3.3) für $E_{VBT0} = 50 \text{ m eV}$ berechnet wurde.

Für die Emitterschichten haben sich Dicken von 10 bis 15 nm durchgesetzt, während i-Pufferschichten typischerweise 3 nm bis 10 nm dick sind. Da an der Rückseite die parasitäre Absorption nicht ins Gewicht fällt, können dort Dicken bis zu 30 nm eingesetzt werden. Während die Zelle an der Rückseite vollflächig über ein Metall (z. B. Aluminium) kontaktiert werden kann, muss an der Vorderseite eine transparente leitende Schicht eingesetzt wie z. B. Zinkoxid (ZnO) oder Indiumzinnoxid (ITO) bzw. allgemein eine TCO-Schicht (transparent conducting oxid). Diese TCO-Schicht zwischen Emitter und Kontaktgitter ist aufgrund der geringen Querleitfähigkeit der amorphen Schichten nötig. Zellstruktur sowie Banddiagramm im Dunkeln und unter V_{OC} -Bedingungen (AM1.5, $j = 0$) sind in Abb. 3.9 am Beispiel der a-Si:H(p)/a-Si:H(i)/c-Si(n) -Zelle gezeigt. Als besonders kritisch in Hinblick auf die Leerlaufspannung wurde in mehreren experimentellen Studien die Grenzflächenrekombination zwischen Absorber und Emitter identifiziert [93, 96, 97]. Auch Simulationsstudien zeigen, dass diese Grenzfläche die Zellparameter massgeblich bestimmt und somit die Grenzflächenpassivierung der Schlüssel zu Rekordzellen ist [42, 43, 102]. Auch die experimentell gefundenen höheren Effizienzen der a-Si:H(p)/a-Si:H(i)/c-Si(n) Zelle gegenüber der inversen Struktur konnten im Rahmen von Simulationsstudien erklärt werden. Das höhere V_{OC} -Potential wurde mit dem die Dunkelbandverbiegung mitbestimmenden VB-Offset erklärt. Zusätzlich ist zu beachten, dass auch unter V_{OC} -Bedingungen eine Restbandverbiegung bestehen bleibt (siehe Abb. 3.9), die wiederum die Grenzflächenrekombination beeinflusst. In Abb. 3.10 werden Simulationsstudien von Stangl präsentiert, in denen der Einfluss der Offsets mit und ohne Grenzflächendefekten un-

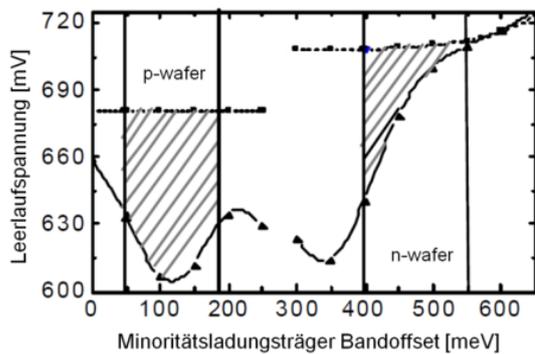


Abbildung 3.10: Simulationsstudie von Stangl et al. zur Abhängigkeit der Leerlaufspannung vom Minoritätsladungsträgeroffset ohne (Quadrate) und mit Grenzflächendefekten (Dreiecke). Es wird deutlich, dass der größere Minoritätsladungsträgeroffset der a-Si:H(p)/c-Si(n)-Struktur einen inhärenten Vorteil besitzt und bei Vorhandensein von Grenzflächendefekten zusätzlich, im Vergleich zur inversen Struktur, die Rekombination gering hält. In dieser Studie wurde eine konstante Defektdichte von 10^{12}cm^{-3} angenommen. (Abbildung aus [43])

tersucht wird. Auch in dieser Studie wird also das Zusammenspiel von Feldeffekt- und Defektpassivierung deutlich, welches in dieser Arbeit genauer untersucht werden soll. Ebenfalls finden Stangl et al., dass sich die höheren Mobilitäten der Minoritäten (Elektronen) vorteilhaft für den Kurzschlussstrom der a-Si:H(p)/a-Si:H(i)/c-Si(n) Struktur auswirken, da es so möglich ist auch einige im a-Si:H-generierten Ladungsträger zu trennen [43]. Die Notwendigkeit, in Simulationen auch den Tunnelprozess zu berücksichtigen, ist noch umstritten. Während experimentelle Untersuchungen von Dunkel-j-V-Kurven Tunnelsignaturen finden [98–100], existieren sowohl Simulationsstudien, die ihre Wichtigkeit für die Simulation von Solarzellenparametern abstreiten [103], als auch welche, die diese betonen [8].

Neben den a-Si:H-Emitter und BSF-Schichten muss auch der Einfluss der TCO-Kontaktschicht und der Metallisierung beachtet werden. Auch hier ist es notwendig, die Bandanpassung zu optimieren, wie im Laufe der Arbeit noch diskutiert werden wird. In einer Simulationsstudie von Kanevce et al. wird beispielsweise darauf hingewiesen, dass bei ungünstiger Bandanpassung ein Tunneltransport zwischen a-Si:H- und ZNO- bzw. ITO-Schicht ausschlaggebend ist [8]. Neben der Minimierung der Rekombination müssen Rekordzellen auch in Hinblick auf ihre optischen Eigenschaften optimiert werden. Dazu werden die Siliziumwafer vor der a-Si:H-Abscheidung typischerweise texturet, so dass sich eine pyramidenartige Oberfläche mit Strukturgrößen von bis zu 50 nm ausbildet. In Rahmen dieser Arbeit steht allerdings die elektronische Optimierung im Vordergrund und die Untersuchungen werden an planaren Referenzsystemen durchgeführt.

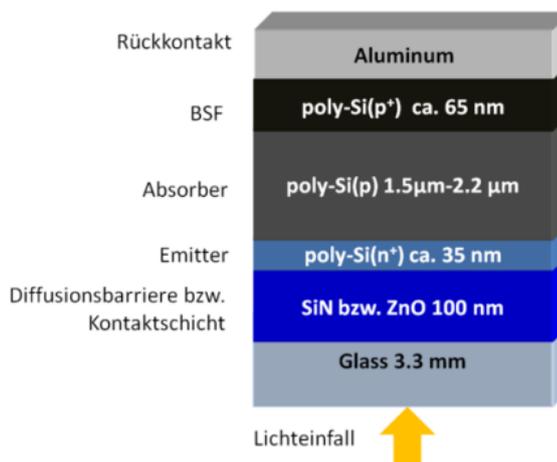
3.2.2. Polykristalline Dünnschicht solarzelle

Die Optimierung von poly-Si-Schichten für Solarzellen hat am HZB eine lange Tradition und es erfolgt hier nur eine sehr knappe Zusammenfassung der aktuellen Prozessschritte.⁶ [46] Bei der Herstellung der poly-Si-Zellen wird zunächst mittels PECVD oder Elektronenstrahlverdampfung (e-Beam) eine amorphe Schicht auf einem Glassubstrat abgeschieden. Dabei kann eine n-Typ-Dotierung bei der e-Beam-Abscheidung mittels einer Bor-Effusionszelle erreicht werden.⁷ Anschließend kön-

⁶Details finden sich in der Doktorarbeit von Sontheimer, die gleichzeitig mit der vorliegenden Arbeit angefertigt wurde. [46]

⁷eBeam: Depositionsrate 300 nm/min oder 600 nm/min, Substrattemperatur 300°C

Abbildung 3.11: HZB poly-Si-Zellen in Superstratkonfiguration. Das Konzept auf SiN erfordert eine Punktkontaktierung der Emitterschicht per Laserscribe von der BSF-Seite aus, die bei CSG Solar durchgeführt wird. Das Konzept auf ZnO ermöglicht eine ganzflächige Kontaktierung des Emitters.



nen diese Schichten durch Festphasenkristallisation (solid phase cristallisation, SPC) durch Aufheizen zu polykristallinem Material kristallisiert werden[104].⁸ Alternativ kann die Kristallisation über eine flüssige Phase erfolgen, wobei man das Aufschmelzen mittels eines Laser- oder Elektronenstrahls erreichen kann. Während das PECVD-Verfahren schon etabliert ist und Rekordwirkungsgrade von 10.5 % erreicht wurden [3, 105], bietet das e-Beam-Verfahren den Vorteil 20mal höherer Abscheideraten und ist somit besonders vielversprechend für die industrielle Anwendung. Aktuelle Rekordergebnisse von am HZB mit dem e-Beam-Verfahren hergestellten Zellen betragen 6.7 % [106]. Die polykristallinen Schichten haben eine hohe Defektdichte, die zum einen durch Defekte an Korngrenzen und Versetzungen und zum anderen durch Dotieratome auf Zwischengitterplätzen hervorgerufen wird. Eine Nachbehandlung zur Passivierung dieser Defekte ist somit essentiell, um hohe Wirkungsgrade erreichen zu können. Dazu wird zunächst ein kurzes thermisches Erhitzen durchgeführt (rapid thermal annealing, RTA)[89]⁹ und danach eine Wasserstoffpassivierung (HP) [90].¹⁰

Die im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Zellen haben eine Superstrat-Konfiguration,¹¹ wobei als Substrat ein ZnO- oder SiN-beschichtetes Glas verwendet wird. Die SiN-Schicht wird als Diffusionsbarriere gegen Verunreinigungen im Glas eingesetzt, hat aber aufgrund ihrer Ladung auch einen Einfluss auf die Bandstruktur der Zelle. Am HZB wird als Alternative eine ZnO-Schicht auf dem Glassubstrat eingesetzt, die eine ganzflächig Kontaktierung des Emitters ermöglicht. Auf das so beschichtete Glas wird eine (n+)-Emitterschicht mit einer Dotierung von ca. 10^{20} cm^{-3} und einer Dicke von ca. 35 nm mittels PECVD abgeschieden. Anschließend wird mittels e-Beam-Abscheidung eine (p)-Absorberschicht mit einer Dotierung von $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ bis $4 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ und einer Dicke von 1.5 µm bis 2.2 µm sowie eine (p+)-BSF-Schicht mit einer Dotierung zwischen $8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ und $1.5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ und einer Dicke von ca. 65 nm abgeschieden. Danach folgen die Passivierprozesse RTA und HP und die

⁸SPC Prozess: 45h bei 200°C

⁹RTA Prozess: 1min bei 950°C-1000°C

¹⁰HP Prozess: Wasserstoffplasma 10min bei 600°C

¹¹Superstrat-Konfiguration: Das Substrat, auf dem die Schichtabscheidung erfolgt, ist auf der Seite, von der im Solarzellenbetrieb das Licht einfällt.

Kontaktierung. Die Kontaktierung der Zellen auf SiN erfolgt von der BSF-Seite mittels eines Verfahrens, das im Rahmen der industriellen Forschung von CSG Solar entwickelt wurde [3]. Dabei werden per Laserscribe Punktkontakte zum Emitter hergestellt und Gräben zur Trennung der Zellen erzeugt.

Untersuchungen der poly-Si-Schichten zeigen, dass Korngrößen von $1\ \mu\text{m}$ bis $4\ \mu\text{m}$ auftreten und dass die Körner kolumnar wachsen, so dass die Korngrenzen in der Regel parallel zum Ladungsträgertransport im Absorber verlaufen [107]. Während das Verständnis der a-Si:H/c-Si -Zelle in Hinblick auf die effizienzlimitierenden Defekte schon weit fortgeschritten ist, steht man bei der poly-Si-Zelle noch weit am Anfang. In der a-Si:H/c-Si sind die Materialparameter recht gut erforscht und es existieren Modelle für Defektdichten und -Verteilungen, mit denen zumindest die Leerlaufspannung gut erklärt und simuliert werden kann. In den poly-Si-Zellen sind die Phänomene wesentlich komplexer, und es ist zu vermuten, dass hier nicht die Rekombination an den Grenzflächen limitierend ist, sondern die Rekombination im Absorber selber. Wie in den Grundlagen zur Materialphysik diskutiert wurde, ist zu erwarten, dass a-Si:H-artige Defektverteilungen an Korngrenzen auftreten sowie bandkanten nahe Defekte in Regionen mit Versetzungen, deren Rekombinationsaktivität von der Verunreinigung mit Metallatomen abhängt. In welcher Dichte Hochenergie-Korngrenzen auftreten, wird also sehr stark von der Optimierung des Kristallisierungsprozesses abhängen, und die Rekombinationsaktivität der Defekte in den Versetzungen wird stark von der Reinheit beeinflusst werden, die bei der Prozessierung erreicht werden kann. Auch die Defekte, die mit der Dotierung der Schichten verknüpft sind, könnten eine Rolle spielen. Da bis jetzt nicht klar ist, welche Defekte die Effizienz limitieren, muss man sich für Simulationen zunächst auf stark vereinfachende Modelle zurückziehen.

4. Experimentelle Methoden

In diesem Kapitel werden die quasi-statischen und transienten Photoleitfähigkeitsmethode (quasi-static photoconductance QSSPC, photoconductance decay PCD) zur Bestimmung von Ladungsträgerlebensdauern und die Messung der Oberberflächenbandverbiegung (SPV) zur Messung von Dunkelbandverbiegung und Ladungsträgerlebensdauern vorgestellt. Neben einer kurzen Darstellung von bereits etablierten Methoden, wird in diesem Kapitel beschrieben, wie die experimentellen Aufbauten optimiert wurden, und es werden neue Methoden der Datenauswertung eingeführt.

So wurde ein PCD-Messaufbau¹ auf die Eignung zur Ladungsträgerlebensdauer-messungen an dünnen Absorberschichten untersucht. Dies beinhaltete die Ausrüstung des Messplatzes mit einem leistungsfähigerem Oszilloskop, einer provisorischen Bias-Lichtquelle und die Entwicklung einer neuen Labview-Messaufbau-Software.²

Weiterhin wurde im Rahmen der Arbeit eine Mathematica-Software entwickelt, mit deren Hilfe die Rechnungen zur Auswertung der SPV-Messungen durchgeführt wurden.³ Besonders detailliert werden ein neu entwickeltes numerisches Verfahren und eine analytische Näherung zur Berechnung von Ladungsträgerlebensdauern aus SPV-Transienten diskutiert. Diese Verfahren wurden an SiO/Si und a-Si:H/c-Si -Proben getestet und mit PCD-Messungen verglichen. Der SPV-Messplatz wurde außerdem mit Hilfe einer neuen Lichteinkopplung optimiert und auf einen neuen Impedanzwandler umgerüstet.⁴ In Zuge dessen hat der Autor die Entwicklung einer neuen Labview-Messaufbau-Software für den SPV-Messplatz begleitet.

4.1. Photoleitfähigkeit zur Bestimmung der Ladungsträgerlebensdauer

Wie bereits in den theoretischen Grundlagen diskutiert wurde, lässt sich der für Solarzellen kritische Verlustmechanismus der Rekombination durch Messung der Ladungsträgerlebensdauer untersuchen. Darüber hinaus wurde auch schon erläutert, wie sich aus der Ladungsträgerlebensdauer bei AM1.5-Beleuchtung ein direkter Rückschluss auf implizite Leerlaufspannungen ziehen lässt. Im Folgenden wird beschrieben, wie sich die Ladungsträgerlebensdauer mittels der quasi-statischen und transienten Photoleitfähigkeitsmethode (QSSPC, PCD) kontaktlos messen lässt. Dabei wird zunächst ein kommerziell erhältlicher Aufbau vorgestellt, der sich für die Charakterisierung von a-Si:H/c-Si -Strukturen etabliert hat und an Forschungsinstituten sowie in der

¹Entworfen von K. Kliefoth und H. Franke [108]

²Diese Arbeiten wurden in Zusammenarbeit mit den Masterstudenten F. Rieboldt und A.-M. Teodoreanu durchgeführt [109, 110]

³Diese Arbeiten wurden in Zusammenarbeit mit dem Masterstudenten Rieboldt durchgeführt [109]

⁴Der Impedanzwandler wurde von K. Kliefoth und D. Schaffarzik entworfen [111]. Der Umbau war aufgrund eines Defekts im ursprünglichen Aufbau nötig.

Industrie weit verbreitet eingesetzt wird. Nachfolgend wird dann ein hochempfindlicher Eigenbau für PCD-Messungen (HS-PCD) vorgestellt, mit dem es auch möglich ist, Ladungsträgerlebensdauern von Ladungsträgern in poly-Si-Dünnschichtabsorbern zu bestimmen.

4.1.1. Quasi-statische/transiente Photoleitfähigkeit (QSSPC/PCD)

Der kommerzielle Aufbau: „WCT-100 Sinton Lifetime Tester“ wurde von R. Sinton entwickelt und seine Eignung zur Messung von injektionsabhängigen Ladungsträgerlebensdauern sowie impliziten Leerlaufspannungen wurde bereits in vielen Untersuchungen bestätigt [112–114].

Messaufbau und Funktionsprinzip

Die wesentlichen Komponenten des Messaufbaus sind eine Xenon-Blitzlampe, ein elektrischer Schwingkreis und eine Photodiode (siehe Abb. 4.1).

Das Funktionsprinzip der Leitfähigkeitsmessung beruht auf der induktiven Kopplung der Ladungsträger in der Probe an eine Spule in einem elektrischen Schwingkreis. Durch die periodische Änderung des Stroms im Schwingkreis wird in der Spule ein zeitlich variierendes Magnetfeld erzeugt. Die Magnetfeldstärke folgt einer Sinuskurve und induziert in der Probe einen periodischen Kreisstrom der freien Ladungsträger. Entsprechend der Lenzschen Regel erzeugen diese Kreisströme ein dem Spulenfeld entgegengesetztes magnetisches Feld. Dabei ist der in der Probe induzierte Kreisstrom abhängig von der mittleren Leitfähigkeit σ_{av} und der Dicke W der Probe. Das Magnetfeld der Spule wird folglich in Abhängigkeit der Leitfähigkeit gedämpft, was zu einer Bedämpfung des Detektorschwingkreises führt. Über einen Widerstand kann die Detektorspannung U_{PC} abgegriffen werden, die idealerweise proportional zum Produkt aus Leitfähigkeit und Probendicke $\sigma \times W$ ist. Für den WCT-100-Aufbau wird eine Kalibrierkurve $U_{PC} = f(\sigma_{av} \times W)^5$ aufgenommen, die mit Hilfe von Wafern bekannter Leitfähigkeit bestimmt wird. Das Signal U_{PC} wird an ein Oszilloskop weitergeleitet, so dass es möglich ist, ohne Probenkontaktierung und in hoher zeitlicher Auflösung die Leitfähigkeit $\sigma_{av}(t)$ zu bestimmen.

Die Probe kann mit einem Xenon-Blitzlicht in zwei verschiedenen Modi beleuchtet werden. Für den QSS-Modus wird ein Blitz verwendet, dessen Intensität mit der Zeitkonstante $\tau \approx 200 \mu\text{s}$ exponentiell abfällt. Proben mit Ladungsträgerlebensdauern über $200 \mu\text{s}$ sind somit zu jedem Beleuchtungszeitpunkt im quasi-Gleichgewicht. Proben mit höheren Ladungsträgerlebensdauern müssen im transienten Modus mit einem sehr kurzen Blitz gemessen werden (siehe Abb. 4.2(a)). Es wird ein Infrarotfilter benutzt, um das Licht mit Wellenlängen unter 900 nm zu blockieren und so ein möglichst homogenes Ladungsträgerprofil zu gewährleisten. Zusätzlich befindet sich auf dem Messaufbau eine Photodiode, aus deren Photostrom I_{FD} nach Kalibrierung die mittlere Generationsrate G_{av} in der Probe bestimmt werden kann.

⁵Die Funktion, die die Kalibrierkurve beschreibt, wird als Polynom zweiten Grades angenommen.

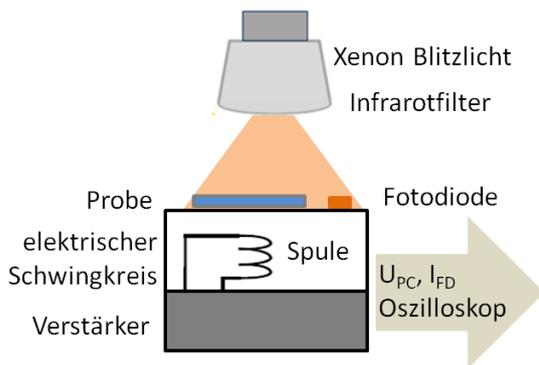


Abbildung 4.1: Aufbauskizze des QSSPC/PCD-Messaufbaus „WCT-100 Sinton Lifetime Tester“. Die Probe ist induktiv an eine Spule in einem elektrischen Schwingkreis gekoppelt. So kann die Leitfähigkeit kontaktlos gemessen werden. Mit Hilfe einer Photodiode kann die mittlere Generationsrate in der Probe bestimmt werden.

Berechnung der effektiven Ladungsträgerlebensdauer

Um die effektive Ladungsträgerlebensdauer zu bestimmen, muss zunächst aus der Leitfähigkeit die Überschussladungsträgerkonzentration berechnet werden:

$$\sigma_{av}^{PC} = e\mu_n n_{av} + e\mu_p p_{av}. \quad (4.1)$$

Zur Auswertung hat sich folgende Näherung etabliert [112–114]:

$$\Delta\sigma_{av}^{PC} \approx e(\mu_n(\Delta n_{av}) + \mu_p(\Delta n_{av}))\Delta n_{av}, \quad (4.2)$$

wobei Δn_{av} die über die Probe gemittelte Überschussladungsträgerkonzentration ist. Dabei werden insbesondere Trappingeffekte vernachlässigt, so dass $\Delta n_{av} = \Delta p_{av}$ angenommen werden kann. Es muss beachtet werden, dass die Mobilitäten in Hochinjektion aufgrund der Ladungsträger-Ladungsträgerstreuung von der Überschussladungsträgerkonzentration abhängen. Die implizite Gleichung Gl. (4.2) mit einem Mobilitätsmodell für $\mu(n)$ von Pang und Rohatgi [57] muss numerisch nach der Überschussladungsträgerkonzentration Δn_{av} gelöst werden. So erhält man die Ladungsträgerlebensdauer aus der QSS-Messung mit Gl. (2.60) und der PCD Messung mit Gleichung Gl. (2.55). Es ist insbesondere im Überlappbereich der Methoden ($\tau \approx 200\mu s$) besser, eine generalisierte Auswertung nach Gl. (2.53) durchzuführen [33]:

$$\tau_{av}(\Delta n_{av}) = \frac{\Delta n_{av}(t)}{G_{av}(t) - \frac{\partial \Delta n_{av}(t)}{\partial t}}. \quad (4.3)$$

Die Messfehler dieses Aufbaus wurden im Detail von McIntosh und Sinton untersucht [115]. Der Fehler ist abhängig von der untersuchten Probe und vom Messmodus [115]. Die Fehleranalyse wird erschwert durch den impliziten Zusammenhang zwischen Leitfähigkeit und Überschussladungsträgerdichte, der durch das Mobilitätsmodell gegeben ist. Eine prinzipieller Fehler entsteht durch eben dieses Mobilitätsmodell, das als parametrisierte Beschreibung von experimentellen Daten selbst fehlerbehaftet ist. Im Folgenden wird für alle Messungen der von McIntosh als maximal angegebene relativen Fehler von 11 % verwendet. In Abb. 4.2 sind Photoleitfähigkeits- und Photodiodensignal Abb. 4.2(a) und die daraus berechnete injektionsabhängige Ladungsträgerlebensdauer ($\tau(\Delta n)$ -Kurve) Abb. 4.2(b) für die transiente PCD- und die quasi-stationäre QSSPC-Messung zu sehen. Bei der Probe handelt es sich um

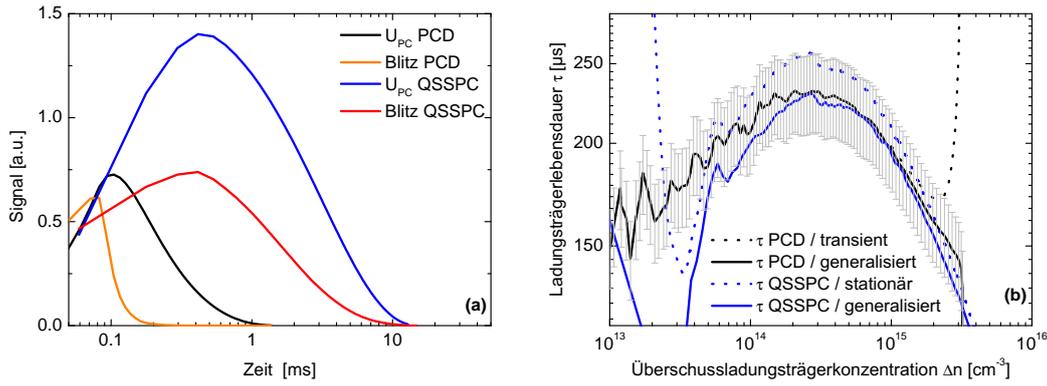


Abbildung 4.2.: Pholeitfähigkeits- und Photodiodensignal (a) und daraus berechnete injektionsabhängige Ladungsträgerlebensdauer ($\tau(\Delta n)$ -Kurve) (b) für transiente PCD und quasi-stationäre QSSPC Messung einer symmetrischen a-Si(n)/c-Si(p)/a-Si(n)-Probe mit einer Ladungsträgerlebensdauer von $\tau \approx 200 \mu\text{s}$. In (b) wird weiterhin transiente (Gl. (2.55)) und stationäre Auswertung (Gl. (2.60)) jeweils mit der generalisierten Auswertung (Gl. (2.53)) verglichen.

eine symmetrische a-Si(n)/c-Si(p)/a-Si(n)-Struktur, die mit einer Ladungsträgerlebensdauer von $\approx 200 \mu\text{s}$ genau im Überlappbereich von PCD- und QSSPC-Messung liegt. In Abb. 4.2(b) wird die transiente (Gl. (2.55)) und die stationäre Auswertung (Gl. (2.60)) jeweils mit der generalisierten Auswertung (Gl. (2.53)) verglichen. Es wird deutlich, dass insbesondere in den Randbereichen mit hoher und niedriger Injektionsdichte nur die generalisierte Auswertung sinnvolle Ergebnisse liefert. Bei generalisierter Auswertung sind die Ergebnisse beider Methoden im Bereich zwischen $5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ und $3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ im Rahmen der Fehler in Übereinstimmung. Daten in diesem Messbereich werden im Laufe der Arbeit genutzt, um $\tau(\Delta n)$ -Kurven im Detail zu analysieren.

4.1.2. Hochsensitive PCD für dünne Schichten (HS-PCD)

Der hochsensitive PCD-Aufbau (HS-PCD) erlaubt aufgrund einer optimierten Elektronik und die Beleuchtung mit einem Laser die Messung von Ladungsträgerlebensdauern in dünnen Schichten ($1.5 \mu\text{m}$). Das Funktionsprinzip entspricht im wesentlichen dem kommerziellen QSSPC/PCD-Aufbau. Das Design des Schwingkreises ist hier jedoch auf eine höhere Sensitivität und einen linearen Zusammenhang zwischen Detektorspannung U_{PC} und Probenleitfähigkeit σ_{av} hin optimiert.⁶ Zur Optimierung des Signal-zu-Rausch-Verhältnisses wird vor der Signalverstärkung ein Bandpass eingesetzt, der Frequenzen mit Periodendauern unter 100 ns und über 100 ms herausfiltert bevor das Signal verstärkt wird. Als verstärktes Signal kann somit nicht die Leitfähigkeit selbst, sondern nur deren zeitliche Änderung $\frac{\partial \sigma}{\partial t}$ dienen. Die Sensitivität wird weiter erhöht, indem über 500 Messungen bei ca. 10 min Messzeit gemittelt wird. Neben der erhöhten Sensitivität, die Voraussetzung für die Messung von dünnen Schichten ist, muss auch ein Laser mit einem Rechteckpuls eingesetzt werden, so

⁶Details zu der Elektronik finden sich in der HZB-Aufbaubeschreibung von Kliefoth und Franke [108], die den Aufbau nach Ideen von Curtis und Verkuil [116] entwickelt haben.

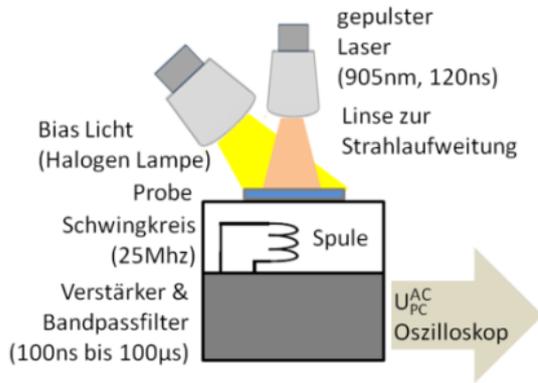


Abbildung 4.3: Aufbauskitze des hochsensitiven PCD-Messaufbaus. Im Gegensatz zum kommerziellen Aufbau wird hier mittels eines aufgeweiteten Laserstrahls beleuchtet und das Messsignal durchläuft einen Bandpass, so dass nur AC-Signale aufgenommen werden. Somit sind nur PCD-Messungen möglich. Zusätzlich kann die Probe durch mit einer Halogenlampe beleuchtet werden.

dass auch bei sehr kleinen Ladungsträgerlebensdauern noch eine Trennung zwischen der Phase der Generation und der Phase des transienten Abklingens der Überschussladungsträgerkonzentration gegeben ist. Der eingesetzte Laser hat eine Wellenlänge von 905 nm um ein möglichst homogenes Ladungsträgerprofil zu gewährleisten. Die laterale Homogenität ist nur beschränkt gegeben, da der über eine Linse aufgeweitete Laser ein gaußförmiges Strahlprofil aufweist. Neben dem Laser wird als konstante Lichtquelle (Bias-Licht) eine Halogenlampe eingesetzt, deren Intensität mit Hilfe eines Filtersatzes variiert werden kann. So kann das Injektionsniveau in der Probe in einem gewissen Bereich eingestellt werden.

Da nur die Leitfähigkeitsänderung aufgenommen wird, ist eine Kalibrierung und Auswertung, wie sie für den QSSPC/PCD-Aufbau üblich ist, nicht möglich. Somit muss die lineare Beziehung zwischen Detektorspannung U_{PC} und Probenleitfähigkeit σ_{av} ausgenutzt werden, und die Mobilitäten müssen als näherungsweise konstant angenommen werden. Die Annahme konstanter Mobilitäten ist im kristallinen Silizium für Ladungsträgerdichten unter $n < 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ gut erfüllt [12] (Seite 567). In polykristallinen Materialien können Korngrenzen jedoch zu einer Barriere führen, die die Mobilität beeinflusst. Da die Höhe von Potentialbarrieren an Korngrenzen von der Injektionsdichte abhängt, könnte sich so eine injektionsabhängige Mobilität ergeben. Wie im Folgenden noch gezeigt wird, ist die Ladungsträgerbewegung bei der HS-PCD Messung allerdings klein im Vergleich zur Korngröße, so dass dieser Effekt vernachlässigt werden kann. Somit lässt sich die injektionsabhängigen Ladungsträgerlebensdauer nach Gl. (2.55) berechnen:

$$U_{PC} \propto \Delta\sigma_{av} \propto \Delta n_{av}$$

$$\Rightarrow \tau(t) = -\frac{U_{PC}(t)}{\frac{\partial U_{PC}(t)}{\partial t}} = -\left(\frac{\partial}{\partial t} \ln U(t)\right)^{-1}. \quad (4.4)$$

Damit lässt sich aus der Transiente des Messsignals die injektionsabhängige Ladungsträgerlebensdauer bestimmen, allerdings kann diese nicht direkt einer Überschussladungsträgerkonzentration zugeordnet werden. Zumindest die maximale Überschussladungsträgerdichte wird jedoch im Folgenden durch Berechnung der Generationsrate abgeschätzt.

Im Abschnitt 2.3 wird beschrieben, dass eine inhomogene Ladungsträgerverteilung zu Transienten führt, die einen initialen schnellen Abfall zeigen, der durch die

Phase der Ladungsträgerhomogenisierung beeinflusst wird. Es ist folglich nicht auszuschließen, dass die mit dem HS-PCD-Aufbau bestimmte Ladungsträgerlebensdauer im Hochinjektionsbereich zu geringe Werte ergibt, die durch die Homogenisierung der Ladungsträger in der Probe bestimmt werden.

Maximale Ladungsträgerkonzentration bei der HS-PCD-Messung

Da eine Bestimmung der Ladungsträgerdichte mit dem HS-PCD-Aufbau nicht möglich ist, wird die Ladungsträgergeneration während des Laserpulses berechnet, um die maximale Ladungsträgerkonzentration direkt nach dem Puls abzuschätzen. Die Generationsrate berechnet sich nach dem Lambert–Beer-Gesetz Gl. (2.65). Die Reflexion $R = 40\%$ des Glas/SiN-Schichtsystems wurde mittels eines Spektrometers bestimmt und in der poly-Si-Schicht wird eine Absorptionskonstante bei 905 nm von $\alpha_{905\text{ nm}} = 277.72\text{ cm}^{-1}$ wie für kristallines Silizium angenommen. Die mittlere Generationsrate in der Probe einer Dicke $W = 1.5\text{ }\mu\text{m}$ berechnet sich dann wie folgt:

$$G_{av} = \Phi_{\lambda}(1 - R_{\lambda})\alpha_{\lambda}\frac{1}{W}\int_0^W e^{-\alpha_{\lambda}x}dx. \quad (4.5)$$

Die Laserintensität $P_{laser} \approx 0.1W$ wurde mittels einer schnellen Photodiode mit bekannter spektraler Empfindlichkeit vermessen. Dabei wird hier eine obere Grenze berechnet, da die Photodiode nur eine aktive Fläche von $A_{FD} = 0.5\text{ mm}^2$ hat, der Laserstrahl aber durch eine Linse auf eine Gaußprofil aufgeweitet wird, um die ganze Probe mit $A_S = 2\text{ cm}^2$ zu beleuchten. Die Inhomogenität der Beleuchtung zum Rande der Probe hin wird somit vernachlässigt. Als oberes Limit für den Photonfluss ergibt sich:

$$\Phi_{\lambda} = \frac{P_{laser}}{E_{\lambda}}. \quad (4.6)$$

Dabei ist die Photonenergie E_{λ} durch $E_{\lambda} = hc/\lambda$ gegeben. Die Ladungsträgerrekombination während der kurzen Pulsdauer von $t_{puls} = 120\text{ ns}$ wird vernachlässigt, so dass sich mit Gl. (4.5) und Gl. (4.6) eine obere Grenze für die Ladungsträgerdichte ergibt:

$$\begin{aligned} \Delta n_{av} &\approx t_{puls} \times G_{av} = t_{puls} \frac{P_{laser}\lambda}{hc} (1 - R_{\lambda}) \frac{1}{W} (1 - e^{-\alpha_{\lambda}W}), \\ \Delta n_{av} &\approx 8.9 \times 10^{14}\text{ cm}^{-3}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Ladungsträgerschwingung bei der HS-PCD-Messung

Wie bereits diskutiert wurde, beruht die Auswertung der HS-PCD-Messung auf der Linearität zwischen HS-PCD-Signal und Ladungsträgerdichte. Diese Bedingung beinhaltet die Annahme von konstanten Mobilitäten $\mu(n) = \mu$, die für kristallines Silizium im Messbereich ($n < 10^{16}\text{ cm}^{-3}$) gegeben ist [12]. In diesem Abschnitt wird diskutiert, ob in poly-Si-Proben eine Streuung an Korngrenzen stattfindet, die zu

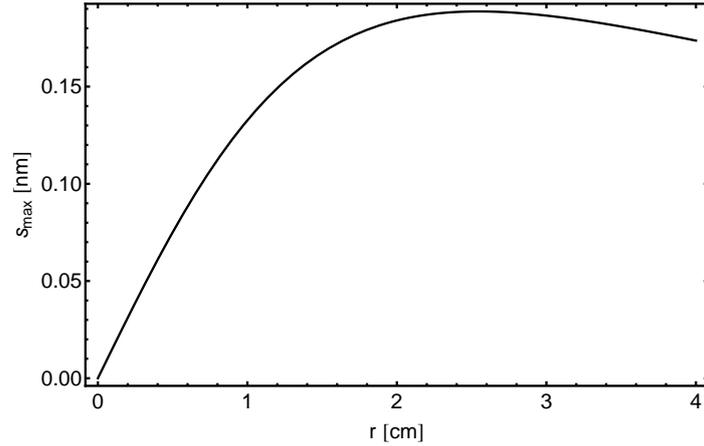


Abbildung 4.5: Ladungsträgerbewegung im HS-PCD-Aufbau in Abhängigkeit vom Abstand zur Spulenachse. Es ergeben sich als obere Grenze Weglängen $< 2\text{Å}$, die wesentlich kleiner als die mittlere Korngröße von $2\text{ }\mu\text{m}$ sind.

demodells als gedämpft Beschleunigung [118], so gilt mit Gl. (4.10) die Bewegungsgleichung:⁷

$$\begin{aligned} \ddot{s}(t) + k\dot{s}(t) &= F_r(r)\omega \cos(\omega t), \\ k &= \frac{e}{m^* \mu_{n,p}}, \\ F_r(r) &= I_0 \frac{\mu_0 e}{2m^*} \left(\frac{r_c}{r} - \frac{r_c^2}{r(r^2 + r_c^2)^{\frac{1}{2}}} \right). \end{aligned} \quad (4.11)$$

Diese Differentialgleichung mit den Anfangsbedingungen $s(r, 0) = 0$ und $\dot{s}(r, 0) = 0$ hat die Lösung:

$$s(r, t) = \frac{F_r(r)}{k^2 + \omega^2} (\omega \exp(-kt) - \omega \cos(\omega t) + k \sin(\omega t)), \quad (4.12)$$

wobei der Exponentialterm, der das Anklingen der Bewegung beschreibt, hier vernachlässigt werden kann. Daraus lässt sich die maximale Wegstrecke s_{max} berechnen, die die Ladungsträger in einer Halbschwingung zurücklegen. In Abb. 4.5 ist $s_{max}(r)$ für die Bewegung der Elektronen mit $\mu = 1100 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$, $m^* = 0.92 \times 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$, einem Spulenradius $r_c = 2 \text{ cm}$ mit $n = 4$ Windungen und einem Schwingkreisstrom von 5 mA zu sehen. Es ergibt sich für den HS-PCD-Aufbau insbesondere auch aufgrund der hohen Frequenz von 25MHz eine Ladungsträgerschwingungen mit Amplituden im Angström-Bereich. Da die mittlere Korngröße in den untersuchten poly-Si-Proben $2 \text{ }\mu\text{m}$ beträgt, kann bei der HS-PCD-Messung die Streuung an Korngrenzen in erster Näherung vernachlässigt und ein Mobilitätsmodell wie im kristallinen Silizium verwendet werden.

Vergleich von HS-PCD- und QSSPC/PCD-Aufbau

In Abb. 4.6 sind PCD-Messung mit dem WTC-100 und dem HS-PCD-Aufbau einer a-Si:H(n)/c-Si(p) Probe zu sehen. Bereits bei der Betrachtung der Signaltransien-

⁷Für die Abschätzung wird hier das Drudemodell verwendet obwohl es für die Ladungsträgerbewegung in Halbleitern nur eine Näherung darstellt.

te in Abb. 4.6 (a) ist zu erkennen, dass mit dem HS-PCD-Messplatz eine geringere Ladungsträgerlebensdauer gemessen wird. Dies zeigt sich auch in Abb. 4.6 (b), in der die $\tau(\Delta n)$ -Kurve zu sehen ist. Dabei wird die Transiente des QSSPC/PCD-Messplatzes, wie oben beschrieben, mit Hilfe der Kalibrierkurve $U_{PC} = f(\sigma_{av} \times W)$, dem Mobilitätsmodell $\mu(\Delta n)$, und Gl. (2.56)) ausgewertet. Die Transiente des HS-PCD-Messplatz wird mit Gl. (4.4) ausgewertet, wobei zunächst eine Glättung des Signals und der Ableitung durchgeführt wird (siehe Abb. A.1). Die Ladungsträgerdichte des HS-PCD-Aufbaus direkt nach dem Laserpuls berechnet sich für den 200 μm dicken Siliziumwafer mit Gl. (4.7) zu $\Delta n_{av} \approx 2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. Mit Gleichung Gl. (2.49) und $\tau = (200 \pm 100) \mu\text{s}$ ergibt sich nur eine grobe Abschätzung für $\Delta n(t)$ und damit ein großer Δn -Fehler in Abb. 4.6(b).

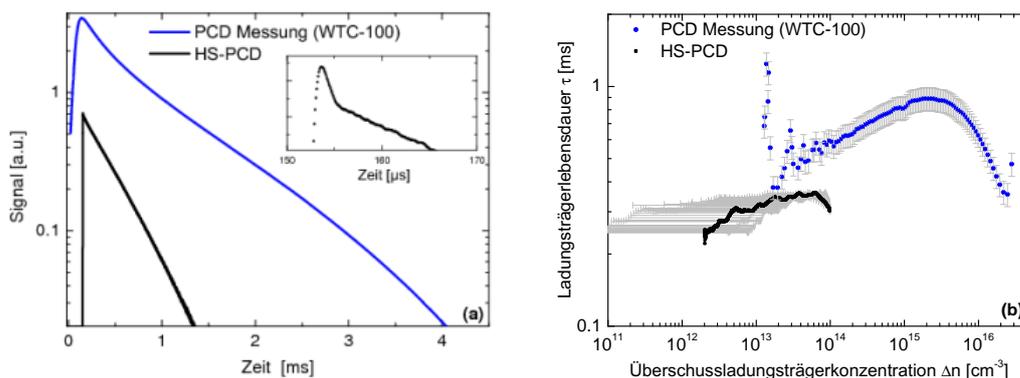


Abbildung 4.6.: PCD-Messung mit dem WTC-100 und dem HS-PCD-Aufbau einer a-Si:H(n)/c-Si(p) Probe. Bereits die Signaltransiente in (a) zeigen, dass mit dem HS-PCD-Messplatz eine geringere Ladungsträgerlebensdauer gemessen wird. Dies wird auch in (b), in der die $\tau(\Delta n)$ -Kurve zu sehen ist, deutlich und lässt sich mit dem Messbereich der HS-PCD-Methode erklären, der weiter im Niedrinjektionsbereich liegt.

Diese Auswertung macht deutlich, dass die geringere Ladungsträgerlebensdauer, die im HS-PCD-Aufbau bestimmt wird, mit der geringeren Überschussladungsträgerkonzentration erklärt werden kann. Die $\tau(\Delta n)$ -Kurve des QSSPC/PCD Aufbaus zeigt einen deutlichen Trend zu geringeren Ladungsträgerlebensdauern bei geringerer Überschussladungsträgerdichte. Dieser Trend wird von der $\tau(\Delta n)$ -Kurve des HS-PCD-Aufbaus fortgesetzt, und es wird deutlich, dass der HS-PCD-Aufbau eine höhere Sensitivität besitzt und so auch Messungen für niedrigere Injektionsdichten möglich sind. Im Überlappbereich der beiden Messaufbauten ist aufgrund des starken Rauschens der QSSPC/PCD- $\tau(\Delta n)$ -Kurve kein direkter Vergleich möglich. Trotzdem deutet sich eine Abweichung an. Insbesondere da die HS-PCD- $\tau(\Delta n)$ -Kurve im Bereich um 10^{14} cm^{-3} eine Abnahme der Ladungsträgerlebensdauer mit Δn zeigt, während dies in der $\tau(\Delta n)$ -Kurve nicht zu sehen ist. Diese Abweichung könnte damit zusammenhängen, dass die Ladungsträgerverteilung nach der Anregung nicht homogen ist, so dass es in der Phase direkt nach dem Laserpuls zu einer Ladungsträgerdiffusion kommt, die das Signal verfälscht. Dieses Phänomen wurde im Rahmen dieser Arbeit allerdings nicht weiter untersucht. Die HS-PCD-Methode wird zur Un-

tersuchung von a-Si:H/c-Si -Proben nicht weiter eingesetzt und die Kurvenform wird nicht quantitativ ausgewertet. Aufgrund der höheren Sensitivität ermöglicht die Methode aber die Messung an Dünnschichtproben, die auf dem QSSPC/PCD-Aufbau kein Signal zeigen. Die HS-PCD-Methode wird deshalb in Kapitel 7 eingesetzt um die Ladungsträgerlebensdauer der dünnen poly-Si-Absorber abzuschätzen und die Form der $\tau(\Delta n)$ -Kurve wird qualitativ diskutiert.

4.2. Oberflächenphotospannung (SPV)

An Halbleiteroberflächen tritt typischerweise eine Bandverbiegung zur Oberfläche hin auf. Diese kann z. B. von Oberflächendipolen, Ladungen in Oberflächendefekten, Festladungen in der oxidierten Oberfläche oder im Fall von Solarzellenproben auch von einer dünnen Emitterschicht herrühren. Die Methode der Oberflächenphotospannung (surface photo voltage, SPV) ist geeignet, diese Oberflächenbandverbiegung zu bestimmen, wobei eine Vielzahl von unterschiedlichen Messmethoden entwickelt wurden, die von Kronik und Shapira im Überblick dargestellt werden [119]. Neben der Messung mit Hilfe einer Kelvin-Sonde, kann die Oberflächenbandverbiegung mit Hilfe der Kontaktierung über einen Metall-Isolator-Halbleiterkontakt (metal insulator semiconductor, MIS) gemessen werden. Diese MIS-Kontaktmessung, die auch in der vorliegenden Arbeit zum Einsatz kommt, wurde am HZB bereits 1974 von Heilig eingeführt, um Siliziumoberflächen zu charakterisieren [120].

4.2.1. Messaufbau und Funktionsprinzip

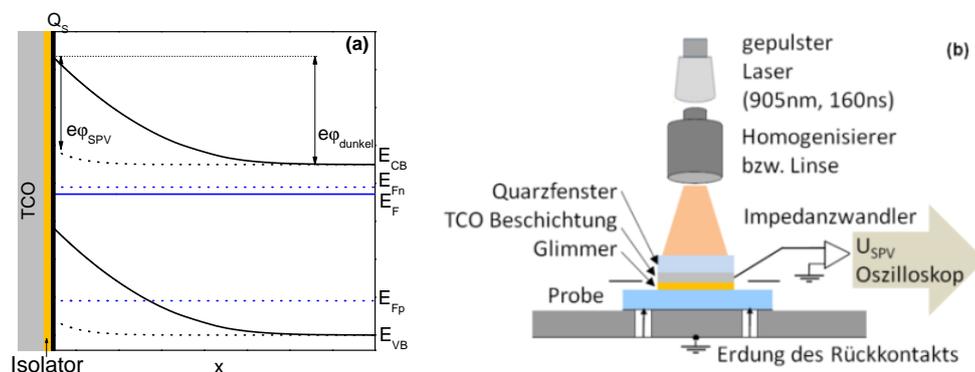


Abbildung 4.7.: Oberflächenbandverbiegung im Gleichgewicht (durchgezogene Linie) und unter Beleuchtung (gepunktete Linie) und daraus sich ergebend das SPV-Signal $e\varphi_{SPV}$ (a). Aufbauskiizze des SPV-Messplatzes (b). Die MIS-Struktur wird durch ein TCO-beschichtetes Quarzglas, den isolierenden Glimmer und die Halbleiterprobe gebildet. Die Beleuchtung erfolgt mit einem gepulsten 905 nm-Laser mit Strahlaufweitung.

Das Messprinzip beruht darauf, dass die Oberflächenbandverbiegung unter Beleuchtung aufgrund der erhöhten Ladungsträgerkonzentration verkleinert wird (siehe Abb. 4.7 (a) und Gl. (2.10)) und diese Änderung über den MIS-Kontakt detektiert wird. Abb. 4.7 (b) zeigt den HZB-SPV-Messaufbau. Der MIS-Kontakt wird von einem

TCO-beschichtetem Quarzfenster ($\varnothing = 1 \text{ cm}$), einem dünnen isolierenden Glimmer (Dicke $\approx 2 \mu\text{m}$) und der Halbleiterprobe gebildet. Auf der Rückseite ist die Probe über zwei metallische Nadeln geerdet.⁸ Durch das Quarzfenster kann die Probe mit einem gepulsten Laser beleuchtet werden. Der Laser mit einer Pulsdauer von 160 ns bzw. 130 ns wird durch eine Linse bzw. einen Homogenisierer aufgeweitet, um eine möglichst homogene Beleuchtung der aktiven Fläche zu gewährleisten. Im ursprünglichen HZB-SPV-Aufbau wird der Laser (160 ns Puls) durch eine Lichtfaser zum Aufbau geführt und dort durch eine Linse aufgeweitet. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde ein neuer Laser (130 ns) mit Strahlaufweitung aufgebaut. Zur Strahlaufweitung wird hier keine einfache Linse eingesetzt, sondern ein Homogenisierer, der aus einem Strahlkollimator und zwei Linsenarrays besteht, um über Interferenzeffekte eine Ebene mit homogener Ausleuchtung zu ermöglichen, und einer Linse zur Einstellung der Spotgröße (1 cm^2 oder 2 cm^2) und des Arbeitsabstandes.⁹ Im Anhang Abb. A.4 ist der Laserstrahl ohne Homogenisierer, nach Durchgang durch den Homogenisierer und nach Durchgang durch Homogenisierer und TCO-beschichtetes Quarzglasfenster im SPV-Aufbau zu sehen. Mit Homogenisierer bleiben die Intensitätsschwankungen unterhalb von 10% und die Beleuchtungsintensität der Probe konnte um den Faktor 2 gesteigert werden. Beide Laser haben eine Wellenlänge von 905 nm. Die Potentialänderung an der Probenoberfläche bei Beleuchtung wird am TCO abgenommen und unverstärkt über einen schnellen Impedanzwandler an ein Oszilloskop weitergegeben. Es ist so möglich das Signal in hoher zeitlicher Auflösung aufzunehmen und auch den zeitlichen Abfall der Bandverbiegung, der sich bei Abnahme der Überschussladungsträgerkonzentration in der Probe ergibt, zu detektieren (siehe Abb. 4.8). Im Laufe der Arbeit wird diskutiert, wie sich aus dieser SPV-Transienten Informationen über die effektive Ladungsträgerlebensdauer gewinnen lassen.

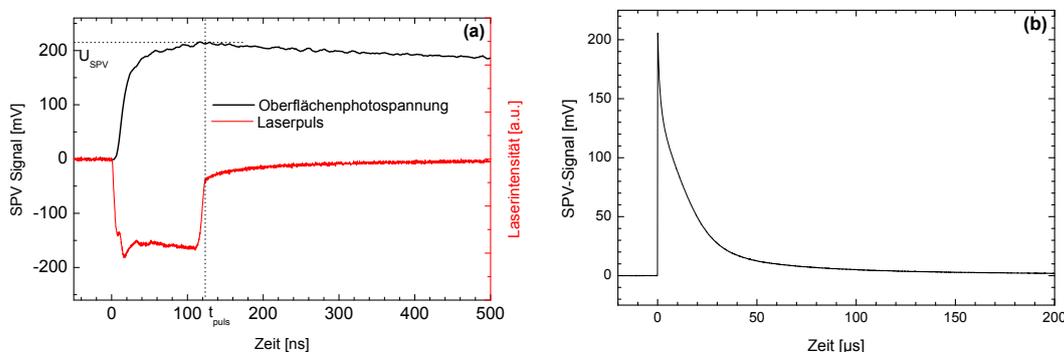


Abbildung 4.8.: SPV Transiente und Laserpuls in hoher Zeitauflösung (a) und Darstellung der gesamten SPV-Transiente (b). Das SPV-Signal zur Bestimmung der Oberflächenbandverbiegung ist $U_{SPV}(t = t_{Puls})$. Im Laufe der Arbeit wird diskutiert, wie aus der SPV-Transienten die effektive Ladungsträgerlebensdauer berechnet werden kann.

⁸Es besteht auch die Möglichkeit über den Rückkontakt eine Hochspannung bis 1000 V an die Probe anzulegen, um die Oberflächenbandverbiegung einzustellen. Dies wird in dieser Arbeit jedoch nicht eingesetzt.

⁹Der Homogenisierer wurde von der Firma Bayerisches Laserzentrum GmbH entwickelt.

Das SPV-Signal muss unter Berücksichtigung der Isolator­kapazität des MIS-Kontakts und der Eingangskapazität des Impedanzwandlers korrigiert werden.¹⁰ Um aus dem kapazitäts-korrigierten SPV-Signal die Oberflächenbandverbiegung zu berechnen, müssen zwei Effekte berücksichtigt werden. Zum einen ergibt sich entsprechend Gl. (2.10), dass die Bänder nur für hohe Überschussladungsträgerkonzentration d. h. hohe Beleuchtungsintensität flach sind, in der Praxis wird aber oft eine Restbandverbiegung $\Delta\varphi_{laser}$ bestehen bleiben, wie in Abb. 4.7(a) angedeutet. Zum anderen entsteht in der Probe eine Demberspannung, da die Elektronen und Löcher aufgrund der inhomogenen Anregung und ihrer unterschiedlichen Mobilitäten nicht die gleiche Verteilung in der Probe haben (siehe Abschnitt 2.1.3). Die Berechnung der Bandverbiegung aus dem kapazitäts-korrigierten SPV-Signal in Abhängigkeit von der Überschussladungsträgerkonzentration und unter Berücksichtigung der Demberspannung wird im folgenden Abschnitt beschrieben.

4.2.2. SPV Datenaufbereitung

Berechnung der Dunkelbandverbiegung

Die Berechnung der Dunkelbandverbiegung $\Delta\varphi_{EQ}$ aus dem SPV-Signal $\Delta\varphi_{SPV}$ geht auf Überlegungen von Heilig zurück [120]. Wesentliche Voraussetzungen sind zum einen, dass die initiale Ladungsträgerdichte Δn_{laser} nach dem Laserpuls bekannt ist und zum anderen die Annahme, dass sich die Oberflächenladung Q_S , die die Bandverbiegung erzeugt, während des Laserpulses nicht ändert, d. h. in dieser Zeit wird eine mögliche Defektumladung an der Grenzfläche vernachlässigt. Dazu muss die Gleichung für die Ladungsdichte in der Raumladungszone $Q_{SCR}(\Delta n, \Delta p, \Delta\varphi_S)$ Gl. (2.10) betrachtet werden. Unter Vernachlässigung der Umladung und bei der Annahme $\Delta n = \Delta p$ gilt mit der Neutralitätsbedingung:

$$-Q_S = Q_{SCR}(\Delta n = 0, \Delta\varphi_{EQ}) = Q_{SCR}(\Delta n_{laser}, \Delta\varphi_{laser}^*). \quad (4.13)$$

Durch Einsetzen von Gl. (2.10) in Gl. (4.13) und mit $\Delta\varphi_Q = \Delta\varphi_{laser}^* - \Delta\varphi_{EQ}$ kann die Dunkelbandverbiegung berechnet werden [120]:

$$\begin{aligned} \varphi_{EQ}(\Delta\varphi_Q, \Delta n_{laser}) &= \frac{1}{e\beta} \ln \left(a - \operatorname{sgn}(\Delta\varphi_Q) \sqrt{a^2 + 2b^2} \right) \quad \text{mit} \\ a &= \frac{1}{c} \left(\left(\frac{1}{\lambda} - \lambda \right) e\beta\Delta\varphi_Q + \frac{2\Delta n_{laser}}{n_i} \right), \\ b &= \frac{1}{c} \left(\lambda - \left(\lambda + \frac{\Delta n_{laser}}{n_i} \right) \exp(-e\beta\Delta\varphi_Q) \right), \\ c &= 2 \left(\left(\frac{1}{\lambda} + \frac{\Delta n_{laser}}{n_i} \right) \exp(-e\beta\Delta\varphi_Q) - \frac{1}{\lambda} \right), \\ \lambda &= \frac{n_i}{n_0}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Zusätzlich zu der Änderung der Bandverbiegung $\Delta\varphi_Q$ die durch die Oberflächenladung hervorgerufen wird, kann es durch ein tiefenabhängiges Anregungsprofil zu

¹⁰Details zur Bestimmung und Korrektur der Impedanzwandlerkapazität finden sich in der Masterarbeit von Rieboldt, die im Rahmen dieser Doktorarbeit betreut wurde [109].

einer Demberspannung $\Delta\varphi_D$ (Gl. (2.22)) kommen (siehe Abschnitt 2.1.3). Bei der Berechnung der Demberspannung nach Gl. (2.22) wurde angenommen, dass die Ladungsträgerkonzentration an der Rückseite auf den Wert im Gleichgewicht abgefallen ist. Dies ist insbesondere bei der SPV-Messung gerechtfertigt, weil die Probenrückseite in der Regel unpassiviert ist und eine hohe Oberflächenrekombination aufweist. Die tatsächliche Messgröße $\Delta\varphi_{SPV}$ ergibt sich damit zu:

$$\Delta\varphi_{SPV} = \Delta\varphi_Q + \Delta\varphi_D. \quad (4.15)$$

Durch Einsetzen von Gl. (4.15) in Gl. (4.14) mit Gl. (2.22) für die Demberspannung lässt sich die Dunkelbandverbiegung in Abhängigkeit des SPV-Signals berechnen (siehe Abb. 4.9). Während die Bänder mit zunehmender Ladungsträgerdichte immer flacher werden, nimmt die Demberspannung zu und führt so auch in Hochinjektion zu einer Abweichung zwischen SPV-Signal und Dunkelbandverbiegung. In Hochinjektion wird somit die Verschiebung der Kurve in Abb. 4.9 (rote Linie) bis auf den Bereich an den Rändern durch die Demberspannung bestimmt. Es lässt sich erkennen, dass der Betrag des SPV-Signals durch die Demberspannung für die n-dotierten Probe höher und für die p-dotierten Probe kleiner ist als der Betrag der Dunkelbandverbiegung. Bei Niedriginjektion ist die Demberspannung vernachlässigbar klein und an der rot gepunkteten Linie in Abb. 4.9 lässt sich erkennen, dass der Betrag des SPV-Signals dann immer kleiner ist als der Betrag der Dunkelbandverbiegung. Eine hohe Ladungsträgerkonzentration ist jedoch in jedem Fall vorteilhaft, da sich so über weite Bereiche eine lineare Beziehung zwischen SPV-Signal und Dunkelbandverbiegung ergibt.

Diese Überlegungen machen deutlich, dass die Kenntnis der Überschussladungsträgerkonzentration entscheidend ist, um das SPV-Signal fehlerfrei in die Dunkelbandverbiegung umzurechnen. Im folgenden Abschnitt wird diskutiert, wie sich die Überschussladungsträgerkonzentration für eine p-dotierte Probe zu $\Delta n_{laser} = 1.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ bestimmen lässt, was in erster Näherung als Aufbaukonstante angenommen wird. Im Anhang Abb. A.3 findet sich eine exemplarische Fehlerabschätzung für die Dunkelbandverbiegung bei einer Unsicherheit in $\Delta n_{laser} = (0.5 \text{ bis } 5) \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Da die Fehler stark von der Probe und der vorliegenden Bandverbiegung abhängen, werden sie im Folgenden für jede Messung einzeln berechnet.

Abschätzung der Überschussladungsträgerkonzentration

Zur Abschätzung der Überschussladungsträgerkonzentration wird ebenfalls eine Methode von Heilig et. al eingesetzt [120]. Dazu betrachte man zunächst die Gl. (4.14) für die Dunkelbandverbiegung $\Delta\varphi_{EQ}(\Delta\varphi_Q, \Delta n)$ und setzt $\Delta\varphi_Q = \Delta\varphi_{SPV} - \Delta\varphi_D$ und Gl. (2.22) für die Demberspannung ein. Gleichung Gl. (4.14) lässt sich dann numerisch nach $\Delta\varphi_{SPV}$ lösen.

In Abb. 4.10 ist diese Rechnung exemplarisch für den Fall $\varphi_{EQ} = 0.1 \text{ eV}$ dargestellt. Es wird deutlich, wie sich das SPV-Signal $\Delta\varphi_{SPV}(\Delta\varphi_{EQ} = 0.1 \text{ eV}, \Delta n)$ in Abhängigkeit der Überschussladungsträgerkonzentration Δn aus der Demberspannung $\Delta\varphi_D$ und der Potentialänderung $\Delta\varphi_Q$ zusammensetzt. Dabei kann das SPV-Signal von p-dotierten Proben aufgrund des unterschiedlichen Vorzeichens von $\Delta\varphi_D$ und $\Delta\varphi_Q$ ein Minimum durchlaufen. Im Folgenden wird gezeigt, wie sich durch Messung des SPV-Signals an diesem Minimum $\Delta\varphi_{SPV}^{min}(\Delta n^{min})$ und des SPV-Signals bei bei maxima-

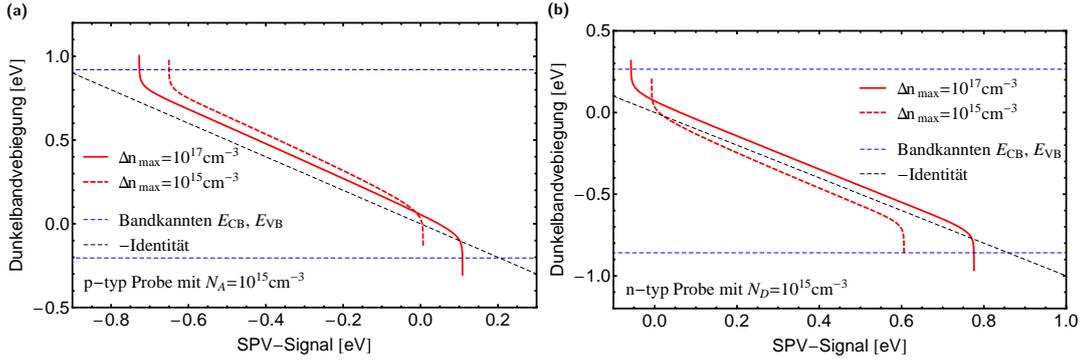


Abbildung 4.9.: Zusammenhang zwischen SPV-Signal und Dunkelbandverbiegung für einen p-Typ (a) und einen n-Typ Siliziumwafer (b) mit einer Dotierung von 10^{15} cm^{-3} und einer Überschussladungsträgerkonzentration von $\Delta n_{\text{laser}} = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (rote durchgezogene Linie) und $\Delta n_{\text{laser}} = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (rot gepunktet). Zur Orientierung sind die Bandkanten blau und die Funktion $f(x) = -x$ schwarz gestrichelt eingezeichnet.

ler Laserleistung $\Delta\varphi_{SPV}^{max}(\Delta n^{max})$ die Ladungsträgerkonzentration Δn^{max} bestimmen lässt.¹¹

Zunächst wird eine Gleichung für $\Delta\varphi_Q^{min}(\Delta n^{min})$ hergeleitet. Dazu wird Gl. (4.13) nach der Überschussladungsträgerkonzentration abgeleitet. Im Minimum gilt:

$$0 = \frac{\partial}{\partial \Delta n} \Delta\varphi_{SPV} \Big|_{\Delta n^{min}} = \frac{\partial}{\partial \Delta n} \Delta\varphi_Q \Big|_{\Delta n^{min}} + \frac{\partial}{\partial \Delta n} \Delta\varphi_D \Big|_{\Delta n^{min}}. \quad (4.16)$$

Die Ableitung der Demberspannung ergibt sich direkt aus Gl. (2.22):

$$\frac{\partial}{\partial \Delta n} \Delta\varphi_D = \frac{1}{e\beta} \frac{B - 1}{\Delta n + B(n_0 + \Delta n) + p_0}. \quad (4.17)$$

Durch Ableitung von Gl. (4.13) und Auflösen nach $\frac{\partial}{\partial \Delta n} \Delta\varphi_Q$ erhält man:

$$0 = \frac{\partial}{\partial \Delta n} Q_{SCR}(\Delta n, \Delta\varphi_Q + \Delta\varphi_{EQ}), \quad (4.18)$$

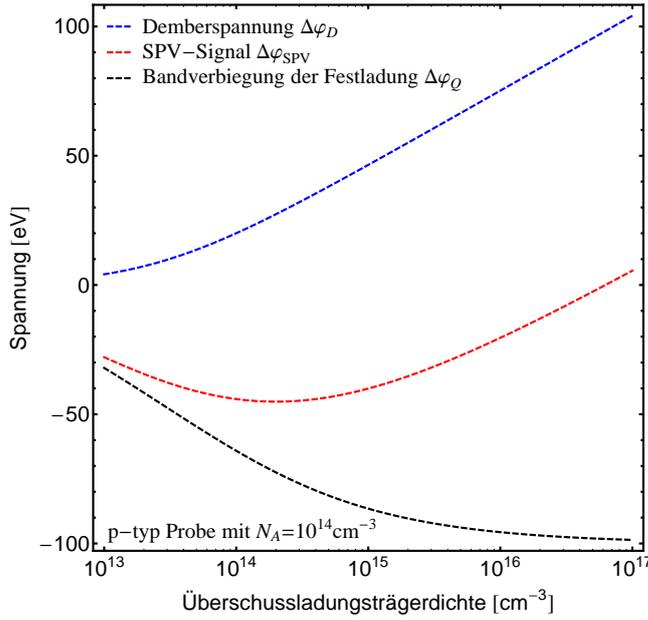
$$\frac{\partial}{\partial \Delta n} \Delta\varphi_Q = -\frac{1}{e\beta} \frac{\exp(e\beta\Delta\varphi_Q + \Delta\varphi_{EQ})}{\Delta n + \exp(e\beta\Delta\varphi_Q + \Delta\varphi_{EQ}) + (\Delta n + n_0) + p_0}.$$

Durch Einsetzen von Gl. (4.17) und Gl. (4.18) in Gl. (4.16) erhält man die Bandverbiegung im Minimum als Funktion der Dunkelbandverbiegung und des Mobilitätsverhältnisses:

$$\Delta\varphi_Q^{min} = \frac{1}{e\beta} \ln(B) - \Delta\varphi_{EQ}. \quad (4.19)$$

Für die nun folgenden Rechenschritte können keine analytischen Lösungen gefunden werden. In einem ersten Schritt wird Gl. (4.19) in das Gleichungssystem aus Gl. (4.13)

¹¹Da $\Delta\varphi_D$ und $\Delta\varphi_Q$ bei n-dotierten Proben das gleiche Vorzeichen haben und somit kein Minimum auftritt, kann diese Methode nur bei p-dotierten Proben eingesetzt werden.

**Abbildung 4.10:**

Das SPV-Signal $\Delta\varphi_{SPV}(\Delta\varphi_{EQ}, \Delta n)$ (rot) setzt sich in Abhängigkeit von der Überschussladungsträgerkonzentration Δn aus der Demberspannung $\Delta\varphi_D$ (blau) und der Spannung $\Delta\varphi_Q$ (schwarz) zusammen. Für p-Typ Wafer kann sich aufgrund der unterschiedlichen Vorzeichen von $\Delta\varphi_D$ und φ_Q ein Minimum ergeben. Die Grafik zeigt eine numerische Rechnung für einen p-Typ Wafer mit einer Dotierung von 10^{14}cm^{-3} , einer Dunkelbandverbiegung von $\Delta\varphi_{EQ} = 0.1\text{V}$ und dem Mobilitätsverhältnis $B = 2.9$.

und Gl. (4.15) am Minimum eingesetzt, das numerisch nach den beiden Unbekannten Δn_{min} und $\Delta\varphi_{EQ}$ gelöst werden kann:¹²

$$Q_{SCR}(\Delta n = 0, \Delta\varphi_{EQ}) = Q_{SCR}\left(\Delta n^{min}, \frac{1}{e\beta} \ln(B)\right), \quad (4.20)$$

$$\Delta\varphi_{SPV}^{min} = \frac{1}{e\beta} \log(B) - \Delta\varphi_{EQ} + \Delta\varphi_D(\Delta n^{min}).$$

Hier geht die Messgröße $\Delta\varphi_{SPV}^{min}$ ein. In einem zweiten Schritt wird dasselbe Gleichungssystem bei maximaler Laserleistung nach den Unbekannten Δn^{max} und $\Delta\varphi_Q^{max}$ gelöst:

$$Q_{SCR}(\Delta n = 0, \Delta\varphi_{EQ}) = Q_{SCR}\left(\Delta n^{max}, \Delta\varphi_Q^{max} + \Delta\varphi_{EQ}\right), \quad (4.21)$$

$$\Delta\varphi_{SPV}^{max} = \Delta\varphi_Q^{max} + \Delta\varphi_D(\Delta n^{max}).$$

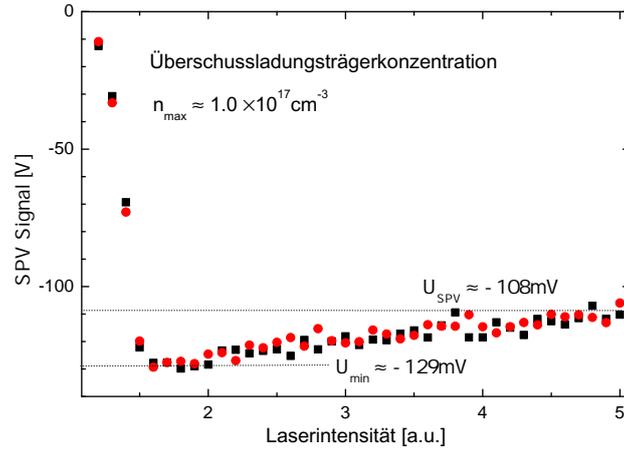
Hier geht die Messgröße $\Delta\varphi_{SPV}^{max}$ ein und die im ersten Rechenschritt bestimmte Dunkelbandverbiegung $\Delta\varphi_{EQ}$.

In Abb. 4.11 ist eine Messung zu sehen, die nach dieser Methode ausgewertet wurde, um die Überschussladungsträgerkonzentration zu bestimmen. Die so bestimmte Überschussladungsträgerkonzentration $\Delta n_{laser} = \Delta n^{max} = 1 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$ wird im Folgenden als Aufbaukonstante betrachtet. Durch eine nur ungenau bekannte Überschussladungsträgerkonzentration ist die Dunkelbandverbiegung in der Regel fehlerbehaftet (siehe Anhang Abb. A.3).

In dem ursprünglichen HZB-SPV-Aufbau wird das Laserlicht durch eine Lichtfaser zur Probe geführt und dort durch eine Linse aufgeweitet. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde ein neuer Laser und eine Strahlaufweitung aufgebaut. Da

¹²Um die Stabilität der Numerik zu erhöhen, wird die Größe $f = \frac{n_i}{n_0}$ eingeführt, über die sich die Ladungsträgerkonzentrationen im Gleichgewicht ausdrücken lassen ($n_0 = \frac{n_i}{f}$ und $p_0 = n_i f$).

Abbildung 4.11: Bestimmung der Überschussladungsträgerkonzentration bei der SPV-Messung mit maximaler Laserleistung. Die Ladungsträgerdichte, bei der das SPV-Signal minimal ist (U_{\min}), wird durch Variation der Laserleistung eingestellt. Bei maximaler Laserleistung wird U_{SPV} gemessen.



die neue Optik ohne Lichtfaser konstruiert wurde, konnte die Beleuchtungsintensität vergrößert und die Ladungsträgerkonzentration damit um den Faktor zwei auf $\Delta n_{\text{laser}} = 2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ erhöht werden (siehe Anhang, Abb. A.1).

4.2.3. Bestimmung der Ladungsträgerlebensdauer aus SPV-Transienten

Die Berechnung der Ladungsträgerlebensdauer aus SPV-Transienten wurde im Rahmen dieser Arbeit neu entwickelt.¹³ Um die Ladungsträgerlebensdauer zu bestimmen, muss die Bandverbiegung zunächst in die Überschussladungsträgerdichte umgerechnet werden. Unter der Annahme, dass die Oberflächenladung während der gesamten Transiente konstant bleibt, ist dies wiederum durch numerisches Lösen des Gleichungssystems aus Gl. (4.13) und Gl. (4.15) nach der Überschussladungsträgerkonzentration möglich:

$$\begin{aligned} Q_{\text{SCR}}(\Delta n = 0, \Delta \varphi_{\text{EQ}}) &= Q_{\text{SCR}}(\Delta n(t), \Delta \varphi_{\text{Q}}(t) + \Delta \varphi_{\text{EQ}}) \\ \Delta \varphi_{\text{SPV}}(t) &= \Delta \varphi_{\text{Q}}(t) + \Delta \varphi_{\text{D}}(\Delta n(t)) \end{aligned} \quad (4.22)$$

Aus der Messung bei maximaler Anregung wird zunächst mit Gl. (4.14) die Dunkelbandverbiegung $\Delta \varphi_{\text{EQ}}$ bestimmt. Weiterhin geht die gemessene SPV-Transiente $\Delta \varphi_{\text{SPV}}(t)$ ein. Die Variablen, nach denen gelöst wird, sind Δn und $\Delta \varphi_{\text{Q}}$, so dass man $\Delta \varphi_{\text{Q}}(\varphi_{\text{SPV}}(t))$ und $\Delta n(\Delta \varphi_{\text{SPV}}(t))$ erhält. Mit Gl. (2.55) für die Ladungsträgerlebensdauer im transienten Fall kann dann die $\tau(\Delta n)$ -Kurve bestimmt werden. Bevor diese Methode angewendet wird, um experimentelle Daten auszuwerten, sollen zunächst einige theoretische Überlegungen angestellt werden.

Theoretische Vorüberlegungen

Um ein besseres Verständnis für die SPV-Transienten zu entwickeln, werden zunächst berechnete Transienten diskutiert. Insbesondere soll hier der Einfluss der Dember-

¹³Die Berechnung erfolgt nach einem Ansatz, der von Kliefoth und Korte vorgeschlagen wurde. Erste Untersuchungen an SPV-Transienten von a-Si:H/c-Si -Strukturen wurden von Korte publiziert [121].

spannung für verschiedene Dotierungen der Probe untersucht werden. Um den Zusammenhang zwischen SPV-Transiente und Ladungsträgerlebensdauer zu verdeutlichen, wird des weiteren eine analytische Näherung erarbeitet, die eine direkte Berechnung

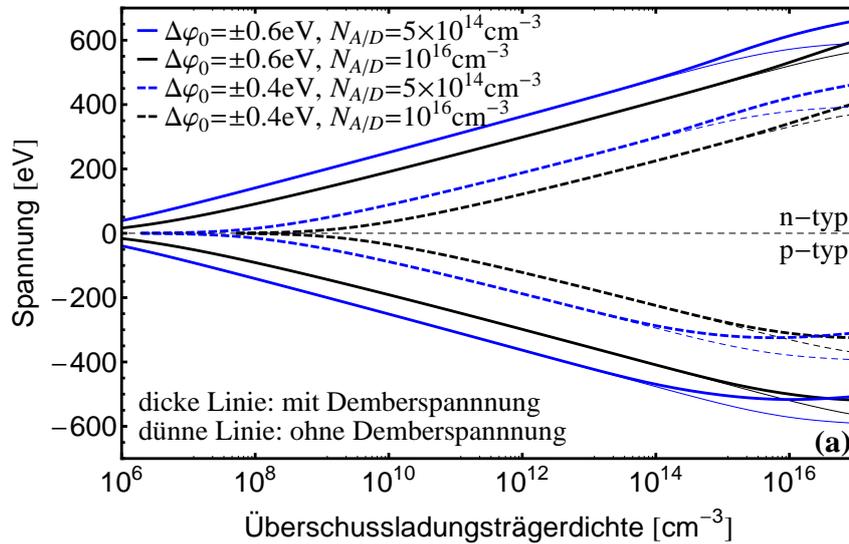


Abbildung 4.12.: Mit Gl. (4.22) berechnete Bandverbiegung in Abhängigkeit der Überschussladungsträgerkonzentration. Die dicken Linien geben den Verlauf bei Berücksichtigung der Demberspannung an, während die dünnen Linien den Verlauf ohne Demberspannung zeigen.

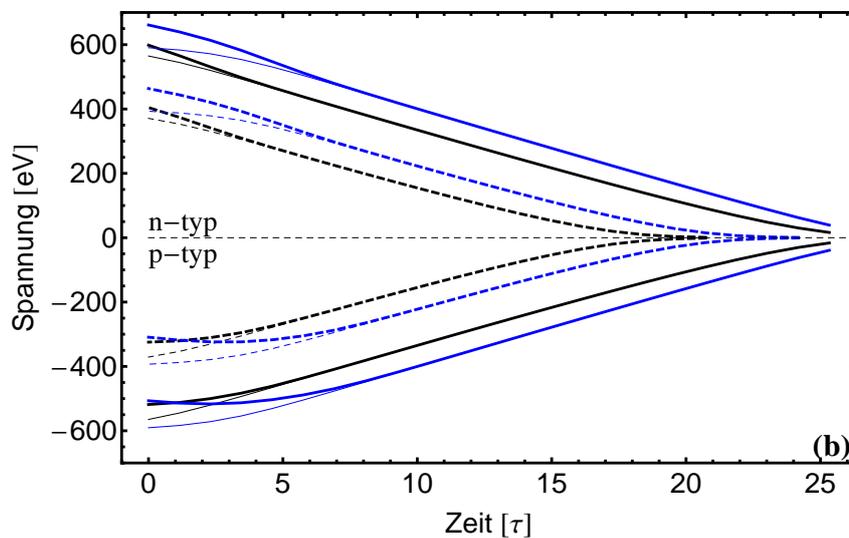


Abbildung 4.13.: SPV-Transienten bei Annahme einer konstanten Ladungsträgerlebensdauer. Berechnet aus der injektionsabhängigen Bandverbiegung in Abb. 4.12. Die dicken Linien geben den Verlauf bei Berücksichtigung der Demberspannung an, während die dünnen Linien den Verlauf ohne Demberspannung zeigen. Es ist zu erkennen, dass die Transienten bei konstanter Ladungsträgerlebensdauer über weite Bereiche linear mit der Zeit abfallen.

der Lebensdauer ohne numerische Verfahren ermöglicht.

Es ist in Abb. 4.12 ein berechnetes SPV-Signal $\Delta\varphi_{SPV}(\Delta n)$ zu sehen. Für diese Grafik wurde das Gleichungssystem Gl. (4.22) bei vorgegebenen Δn numerisch nach $\Delta\varphi_{SPV}$ einmal mit und einmal ohne Berücksichtigung der Demberspannung gelöst. Bei Annahme einer konstanten Ladungsträgerlebensdauer kann die Überschussladungsträgerkonzentration Δn mit Gl. (2.49) in die Zeit umgerechnet werden, so dass die SPV-Transiente dargestellt werden kann (Abb. 4.13). In beiden Abbildungen Abb. 4.12 und Abb. 4.13 sind die Lösungen mit Demberspannung (dicke Linien) und ohne (dünne Linien) zu sehen. Es wird deutlich, dass die Demberspannung bei hohen Injektionsdichten einen entscheidenden Einfluss hat, so dass die Transiente in Abhängigkeit von den Probenparametern ein Minimum durchlaufen kann. Ist die Überschussladungsträgerkonzentration klein gegen die Majoritätsladungsträgerdichte, $\Delta n \ll n_0$ bzw. p_0 , ergibt sich bei konstanter Ladungsträgerlebensdauer über weite Bereiche ein linearer Zusammenhang zu $\log(\Delta n)$ bzw. zu t , bevor die Transiente nichtlinear gegen 0 konvergiert.

Um den Zusammenhang zwischen SPV-Transiente und Ladungsträgerlebensdauer besser zu verstehen, wird im Folgenden eine analytische Näherung unter Vernachlässigung der Demberspannung erarbeitet. Dies wird dadurch gerechtfertigt, dass die Demberspannung nur bei hohen Injektionsdichten relevant ist und eine korrekte Berechnung der Demberspannung in der Praxis kaum möglich ist. Bei einer exakten Berechnung müsste die Überschussladungsträgerdichte auch an der Probenrückseite bekannt sein. Für die den Rechnungen in Abb. 4.12 wurde $\Delta n = 0$ an der Rückseite angenommen, was allerdings bei Proben mit passivierter Rückseite keine gute Näherung sein könnte. Somit ist der Bereich $\Delta n \geq n_0$ bzw. p_0 nicht genau definiert und es lassen sich nur Rückschlüsse auf Ladungsträgerlebensdauern in Niedriginjektion $\Delta n \ll n_0$ bzw. p_0 ziehen.

In dem Bereich, in dem der Einfluss der Demberspannung auf die SPV-Transiente vernachlässigt werden kann ($\Delta\varphi_D(\Delta n(t)) = 0$), kann das Gleichungssystem Gl. (4.22) analytisch nach $\Delta n(t)$ gelöst werden:

$$\Delta n(t) = \frac{(e^{y(t)} - e^{y(t)+y_0})n_0 + (e^{-y(t)} - e^{-y(t)-y_0})p_0 - y(t)(p_0 - n_0)}{e^{-y(t)-y_0} + e^{y(t)+y_0} - 2} \quad (4.23)$$

mit $y(t) = e\beta\Delta\varphi_{SPV}(t)$ und $y_0 = e\beta\Delta\varphi_0$.

Die Ladungsträgerlebensdauer ergibt sich dann mit Gl. (2.55) zu:

$$\tau(t) = F(y(t), y_0) \left(\frac{\partial y(t)}{\partial t} \right)^{-1} \quad \text{mit}$$

$$F(y, y_0) = \frac{(e^y - e^{y+y_0})n_0 + (e^{-y} - e^{-y-y_0})p_0 - y(p_0 - n_0)}{n_0 B_n(y, y_0) + p_0 B_p(y, y_0)}, \quad (4.24)$$

$$B_{n/p}(y, y_0) = \pm \frac{\pm y (e^{\mp(y+y_0)} + 1) + e^{\mp y} + e^{\pm y_0} + e^{\mp(y+y_0)} - 3}{1 - e^{\mp(y+y_0)}}.$$

Unter Beachtung des Vorzeichenwechsels von y und y_0 beim Wechsel von n-dotierten zu p-dotierten Proben, ergeben sich mit Gl. (4.24) für beide Typen die gleichen Ladungsträgerlebensdauern. Der Vorfaktor $F(y, y_0)$ ist im Bereich $|0.2\Delta\varphi_0| < |\Delta\varphi_{SPV}| <$

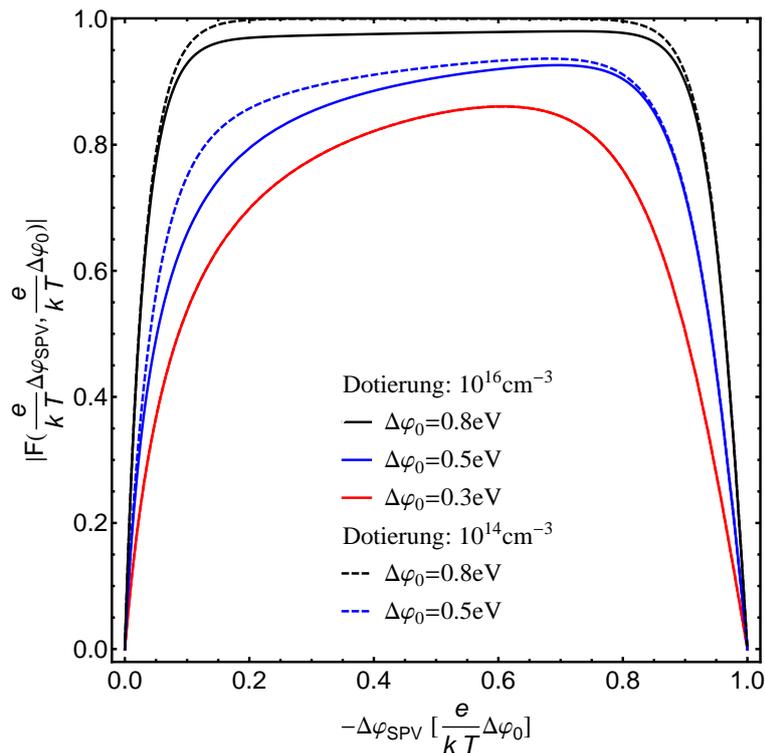


Abbildung 4.14.: Der Faktor $F(y, y_0)$ zur Berechnung der Ladungsträgerlebensdauer aus der SPV-Transienten als Funktion des SPV-Signals in Einheiten der Dunkelbandverbiegung $[-e/kT\Delta\varphi_0]$. Der Faktor ist im Bereich $|0.2\Delta\varphi_0| < |\Delta\varphi_{SPV}| < |0.8\Delta\varphi_0|$ näherungsweise konstant und nahe eins. Dieses Verhalten ist um so ausgeprägter, je höher die Dunkelbandverbiegung ist und je kleiner die Dotierung ist. Der Bereich bei halb abgefallener Bandverbiegung eignet sich somit besonders, um die effektive Ladungsträgerlebensdauer der Proben abzuschätzen.

$|0.8\Delta\varphi_0|$ für hohe Dunkelbandverbiegungen näherungsweise konstant und nahe eins (siehe Abb. 4.14), so dass sich die Ladungsträgerlebensdauer näherungsweise aus der reziproken Ableitung des Signals nach der Zeit ergibt. Dieses Verhalten ist um so ausgeprägter, je höher die Dunkelbandverbiegung und je kleiner die Dotierung ist.

Hier wird ein prinzipieller Unterschied zur Messung der Ladungsträgerlebensdauer mittels der transienten Photoleitfähigkeit deutlich, bei der sich die Ladungsträgerlebensdauer aus der Ableitung des Logarithmus des Signals ergibt. Das bedeutet, dass bei konstanter Ladungsträgerlebensdauer die SPV-Transiente in weiten Bereichen linear mit der Zeit abfällt (siehe auch Abb. 4.13), während sich bei der transienten Photoleitfähigkeit ein exponentielles Abklingen ergibt. Dadurch ergibt sich ein Vorteil der SPV-Messung bei der Bestimmung von Ladungsträgerlebensdauern in Niedrinjektion. Diese theoretischen Überlegungen sollen nun an experimentellen Daten überprüft werden.

Untersuchung von SPV-Transienten an SiO/Si-Strukturen

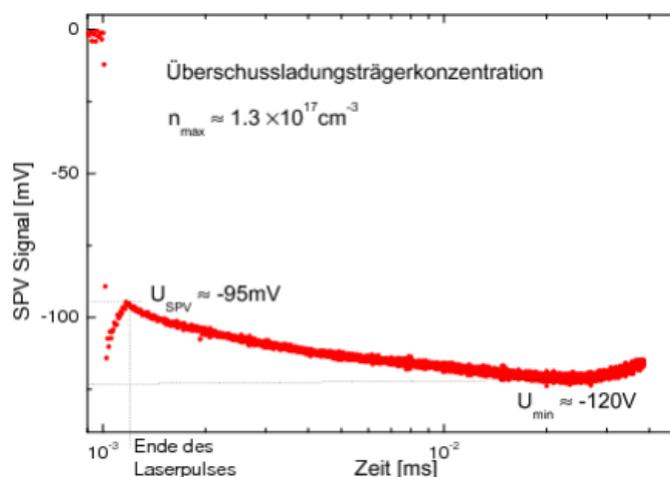
Einfluss der Demberspannung auf die SPV-Transienten

In Abb. 4.15 ist die Transiente einer p-dotierten Probe mit $N_A = 10^{14}\text{cm}^{-3}$ zu sehen.

Die Bandverbiegung an der Vorderseite wird durch eine Festladung in einem thermisches Oxid hervorgerufen. Die Rückseite der Probe ist unpassiviert, so dass $\Delta n = 0$ für die Überschussladungsträgerkonzentration an der Rückseite ein sinnvoller Ansatz zur Berechnung der Demberspannung ist. In Abb. 4.15(b) ist zu erkennen, dass durch das Zusammenspiel von Demberspannung und Bandverbiegung tatsächlich ein Minimum in $U_{SPV}(t)$ auftritt wie es theoretisch für niedrig dotierten p-Typ Proben vorhergesagt wird (siehe Abb. 4.12 und Abb. 4.13). Als Konsistenzprüfung wird hier entsprechend dem in Abschnitt 4.2.2 vorgestellten Verfahren aus dem SPV-Signal bei maximaler Anregung und dem SPV-Signal im Minimum die maximale Überschussladungsträgerkonzentration bestimmt. Der Wert für $\Delta n_{max} = 1.3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ entspricht im Rahmen der Fehler dem Wert, der mit der Methode bei Variation der Anregungsintensität bestimmt wurde.

Abbildung 4.15:

SPV-Transiente einer niedrig-dotierten ($N_A = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$) p-Typ Probe. Wie theoretisch vorhergesagt (Abb. 4.12), durchläuft die Transiente aufgrund der Demberspannung ein Minimum. Aus dem SPV-Signal direkt nach der Anregung und dem Signal im Minimum lässt sich die Überschussladungsträgerkonzentration in der Probe bestimmen.



Bestimmung der Ladungsträgerlebensdauer

Bei höher dotierten Proben tritt das durch die Demberspannung erzeugte Minimum in der SPV-Transiente nicht mehr auf. In Abb. 4.16 (a) sind SPV-Transienten von drei einseitig oxid-passivierten n-Typ Waferproben mit unterschiedlicher Passivierqualität zu sehen (Details zu den Proben in Tab. 4.1). In Abb. 4.16(b) ist die mit Gl. (4.22) bestimmte Überschussladungsträgerdichte und injektionsabhängige Bandverbiegung sowie in Abb. 4.16 die daraus mit Gl. (2.55) bestimmte Ladungsträgerlebensdauer zu sehen. Die Auswertung wurde hier unter Berücksichtigung der Demberspannung durchgeführt. Im Vergleich mit den PCD-Messungen derselben Proben wird deutlich, dass die Ladungsträgerlebensdauer nur bereichsweise in der gleichen Größenordnung liegen. Die SPV-Transienten zeigen nach dem Puls ein schnelles Abklingen, das zu einer starken Injektionsabhängigkeit der Ladungsträgerlebensdauer führt (Bereich A), bis diese einen konstanten Wert annimmt. Dieser konstante Wert (Bereich B) entspricht von der Größenordnung her dem der PCD-Messung (siehe auch Tab. 4.1). Dabei bleibt der Trend zu höheren Ladungsträgerlebensdauern bei höherer Passivierqualität erhalten. Der Bereich B der SPV-Transiente eignet sich also zur groben Abschätzung der Ladungsträgerlebensdauer. Zur Niedriginjektion hin steigt die SPV-Ladungsträgerlebensdauer stark an (Bereich C), wobei dieser Trend für die Probe mit

der schlechtesten Passivierqualität und der höchsten Bandverbiegung besonders stark ausgeprägt ist. Aufgrund des limitierten Messbereichs der PCD-Messung ist im Niedriginjektionsbereich kein Vergleich möglich. Die starke Injektionsabhängigkeit der La-

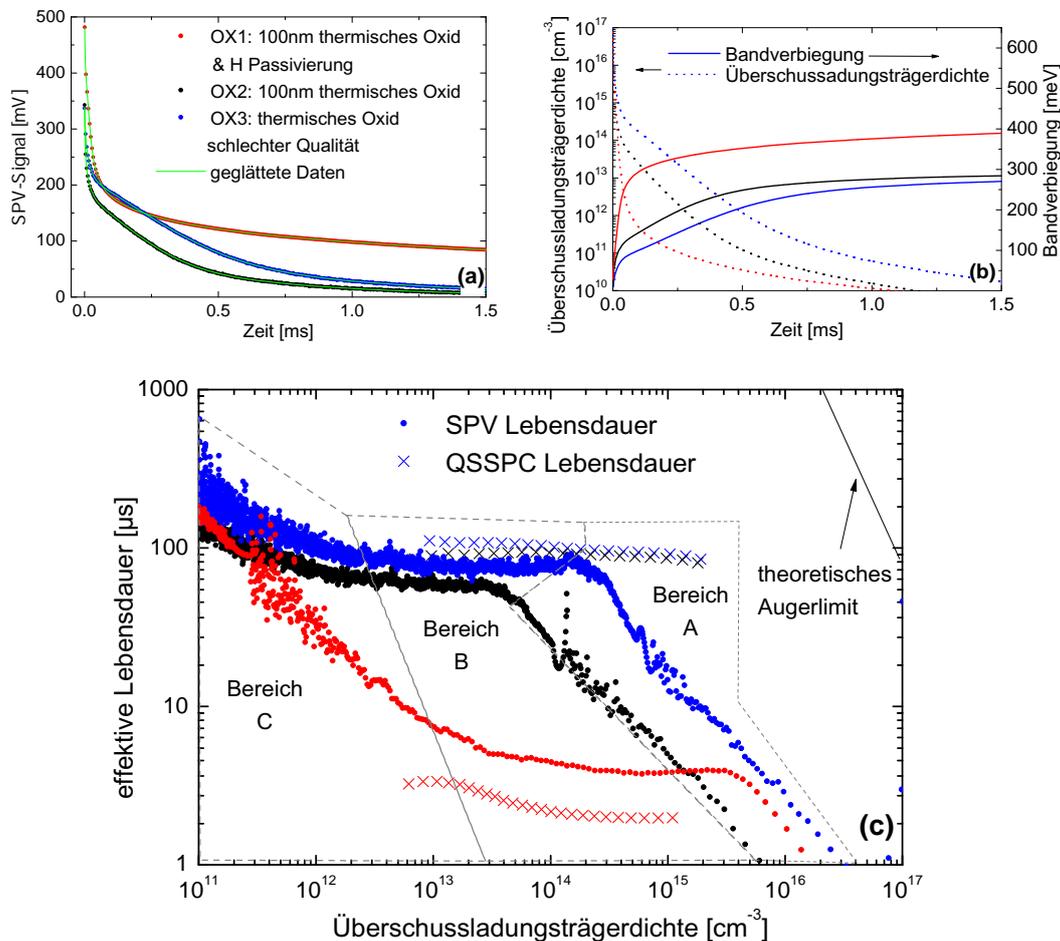


Abbildung 4.16.: SPV Transienten von drei SiO/Si-Proben mit variierender Passivierqualität (a). In (b) sind die mit Gl. (4.22) berechnete Bandverbiegung und Injektionsdichte zu sehen. In (c) sind die daraus mit Gl. (2.55) berechneten SPV-Ladungsträgerlebensdauern im Vergleich zu PCD-Messungen dargestellt. Um zu verdeutlichen, dass die starke Injektionsabhängigkeit der SPV-Ladungsträgerlebensdauern nicht durch die Auger-Rekombination erklärt werden kann, ist das theoretische Augerlimit nach Gl. (2.29) für die Proben OX1 und OX2 eingezeichnet.

dungsträgerlebensdauer im Bereich A steht im Widerspruch zu den PCD-Messungen und lässt sich auch mit den üblichen Rekombinationsmodellen nicht erklären. So macht das in Abb. 4.16 eingezeichnete Augerlimit für die Ladungsträgerlebensdauer deutlich, dass die Auger-Rekombination dieses Verhalten nicht erklären kann. Es kann vermutet werden, dass auch hier wieder die Dynamik der Ladungsträgerverteilung, das initiale Verhalten nach dem Puls verfälscht. Um ein genaueres Verständnis der SPV-Transienten zu entwickeln, sollten in Zukunft transiente Rechnungen mit AFORS-HET durchgeführt werden. Dies erlaubt die Berücksichtigung der Dynamik

der Ladungsträgerverteilung $\Delta n(x, t)$ und $\Delta p(x, t)$ nach dem Laserpuls zu untersuchen. In dieser Arbeit konnte dies allerdings nicht genauer analysiert werden, da die Untersuchung von Solarzellenproben im Vordergrund stehen soll. Im Bereich B ergibt sich eine gute Übereinstimmung. Es sei darauf hingewiesen, dass es sich dabei auch um den Bereich handelt, bei dem der Vorfaktor $F(y, y_0)$ einen linearen Verlauf zeigt (Abb. 4.14), und die Auswertung damit nicht so fehleranfällig ist, da die Ladungsträgerlebensdauer im Wesentlichen durch die Ableitung des Signals nach der Zeit bestimmt wird und kaum durch die Absolutwerte der Bandverbiegung.

Tabelle 4.1.: Vergleich von SPV und PCD Ladungsträgerlebensdauer von SiO/Si-Proben

| Probenname | Dicke [μm] | N_D [cm^{-3}] | Passivierqualität | $\tau_{PCD}@10^{13} \text{ cm}^{-3}$ [μs] | $\tau_{SPV}@10^{13} \text{ cm}^{-3}$ [μs] |
|------------|-------------------------|----------------------------|----------------------------------|--|--|
| OX1 | 500 | 1.1×10^{15} | 100 nm Ox. mit HP ^a | 110 | 81 |
| OX2 | 500 | 1.1×10^{15} | 100 nm Ox. keine HP ^a | 97 | 67 |
| OX3 | 250 | 6.2×10^{15} | schlechte Qualität | 3.3 | 7.5 |

^a HP: Defektpassivierung mittels eines Wasserstoffplasmaprozesses (Hydrogen plasma)

Ladungsträgerlebensdauer aus SPV-Transienten von a-Si:H/c-Si -Strukturen

In der im Rahmen dieser Arbeit betreuten Masterarbeit von F. Rieboldt [109], wurde das Verfahren zur Bestimmung der effektiven Ladungsträgerlebensdauer aus SPV-Transienten an weiteren SiO/Si- und an a-Si:H/c-Si -Proben überprüft, und die Ergebnisse wurden mit QSSPC/PCD-Messungen verglichen. Es zeigt sich, dass bei der Untersuchung von SiO/Si- und a-Si:H/c-Si -Proben ein prinzipielles Problem auftritt. In der Regel besteht das Ziel darin, die Passivierqualität der SiO/Si- bzw. a-Si:H/c-Si -Grenzfläche zu bestimmen. Da die effektive Ladungsträgerlebensdauer bei SPV-Proben allerdings stark durch die unpassivierte Rückseite beeinflusst wird, ist diese i. Allg. nicht geeignet, um die Qualität der Grenzflächen zu beurteilen. Auf der anderen Seite eignen sich beidseitig passivierte Proben nicht zu SPV-Messungen, da auf beiden Seiten eine Bandverbiegung auftritt und sich so undefinierte Transienten ergeben. Als sinnvolle Anwendung erscheint jedoch die Bestimmung von effektiven Ladungsträgerlebensdauern von a-Si:H/c-Si -Solarzellenstrukturen mit Emitter und BSF. Diese Struktur ist für SPV-Messungen geeignet, da die Rückseite durch die a-Si:H-BSF-Schicht passiviert ist und da an dem n/n+- bzw. p/p+-Übergang nur eine geringe Bandverbiegung auftritt, die in erster Näherung vernachlässigt werden kann. Zudem ist die so bestimmte Ladungsträgerlebensdauer direkt relevant für die Solarzelle. Ein Vergleich von Ladungsträgerlebensdauern an einer solchen a-Si:H/c-Si -Solarzellenstruktur, die mit QSSPC/PCD Messungen und aus SPV-Transienten bestimmt wurden, ist in Abb. 4.17 dargestellt. Im Anhang Abb. A.2 finden sich die zugehörigen SPV-Transienten.

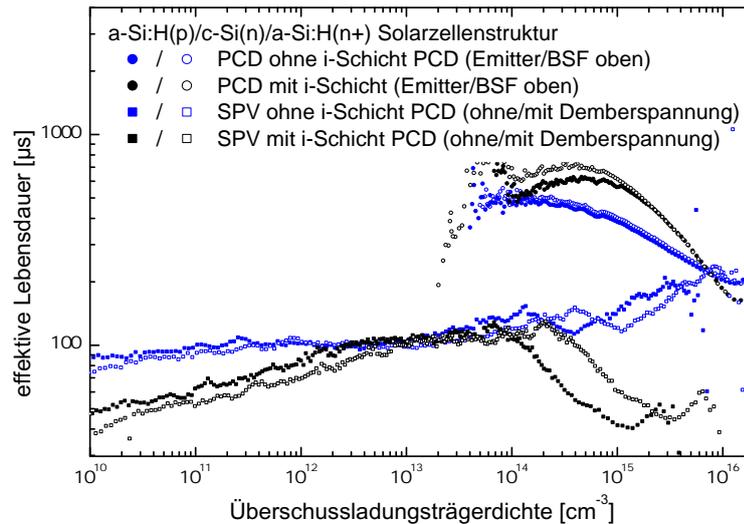


Abbildung 4.17.: Ladungsträgerlebensdauern aus PCD-Messungen und aus SPV-Transienten von a-Si:H/c-Si-Solarzellenproben mit Emitter und BSF. Verglichen wird eine Probe mit und eine Probe ohne i-Schicht. Da hier eine unsymmetrische Probe untersucht wurde, wurden die PCD-Messungen einmal mit der Emittenseite und einmal mit der BSF-Seite oben durchgeführt. Die SPV-Transienten wurden einmal unter Berücksichtigung der Demberspannung und einmal unter Vernachlässigung der Demberspannung ausgewertet. Es ergeben sich unabhängig von der Probenorientierung und der Auswertung der SPV-Transiente grobe Unterschiede zwischen der PCD- und der SPV-Methode.

Verglichen wird eine Probe mit und eine Probe ohne i-Schicht. Da hier eine asymmetrische Probe untersucht wurde, wurden die PCD-Messungen mit beiden Probenorientierungen relativ zur Detektorspule des Aufbaus durchgeführt. Weiterhin wurden die SPV-Transienten einmal unter Berücksichtigung der Demberspannung und einmal unter Vernachlässigung der Demberspannung ausgewertet. Es ergeben sich unabhängig von der Probenorientierung und der Auswertung der SPV-Transiente große Unterschiede zwischen der PCD und der SPV Methode. Die SPV-Methode ist somit ungeeignet, um effektive Lebensdauern in a-Si:H/c-Si-Strukturen zu bestimmen. Weiterhin zeigen die PCD-Messungen für die Probe mit i-Schicht eine höhere Ladungsträgerlebensdauer, während dies bei den SPV Messungen nicht der Fall ist. Auch bei dem Vergleich von effektiven Lebensdauern von verschiedenen Proben kann die SPV-Methode somit zu falschen Ergebnissen führen. Sie wird im Rahmen der Arbeit nicht weiter zur Bestimmung von Lebensdauermessungen eingesetzt.

Als mögliche Ursache für die Abweichungen kommt die Annahme einer konstanten Oberflächenladung in Frage. Wie detailliert beschrieben wurde, beruht die Auswertung der SPV-Messung auf der Annahme, dass die Bandverbiegung durch eine Festladung erzeugt wird, die sich während der gesamten Dauer der SPV-Transiente nicht ändert. In Kapitel 5 wird gezeigt, dass diese Annahme im a-Si:H/c-Si-System nicht korrekt ist, sondern dass sich die Defekte in der a-Si:H-Schicht und die Defekte an der Grenzfläche umladen. In Kapitel 5 wird ein Modell entwickelt, mit dem sich diese Umladung berechnen lässt. Es wäre in der Zukunft interessant, dieses Modell mit der hier vorgestellten Auswertung von SPV-Transienten zu koppeln. Sollte dies

gelingen, könnte es so möglich sein, injektionsabhängige Lebensdauern und injektionsabhängige Bandverbiegungen zu untersuchen. Da die Methode sehr sensitiv ist und Messungen bei niedrigen Injektionsdichten ermöglicht, erscheint es sinnvoll, diese Methode weiterzuverfolgen. Auch die Anwendbarkeit zur Bestimmung von Ladungsträgerlebensdauern in Proben mit dünnen Absorberschichten erscheint aufgrund der hohen Sensitivität vielversprechend.

4.3. Zusammenfassung der Ergebnisse

QSSPC/PCD Messungen

Die Bestimmung der effektiven Ladungsträgerlebensdauer mittels des QSSPC/PCD-Aufbaus WTC-100 wurden in der Literatur detailliert untersucht und die Fehler der Methode wurden quantifiziert. Diese Methode wurde in diesem Kapitel als Referenzmessung eingesetzt und sie wird in späteren Kapiteln eingesetzt, um $\tau(\Delta n)$ -Kurve von a-Si:H/c-Si-Proben quantitativ zu analysieren. Es zeigt sich jedoch, dass dieser Aufbau nicht die nötige Sensitivität besitzt, um dünne poly-Si-Absorberschichten zu untersuchen.

Im Vergleich zur WCT-100 besitzt der HS-PCD-Eigenbau eine höhere Sensitivität. Es wird in späteren Kapiteln gezeigt, dass die Messung von Lebensdauern von dünnen poly-Si-Absorberschichten möglich ist. Die Ladungsträgerlebensdauer ergibt sich als reziproke Ableitung des Logarithmus des PCD-Signals nach der Zeit. Die Lebensdauer kann allerdings i. Allg. nicht einem Injektionsniveau zugeordnet werden. Das maximale Injektionsniveau konnte jedoch zu $\Delta n \approx 8 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ abgeschätzt werden. Für die Auswertung ist der lineare Zusammenhang zwischen PCD-Signal und Ladungsträgerdichte entscheidend $U_{PCD} \propto \Delta n$. Die Linearität $U_{PCD} \propto \Delta n$ setzt insbesondere eine konstante Mobilität $\mu(n) = \mu$ voraus. Zumindest die Korngrenzen sollten keinen großen Einfluss auf die Mobilität haben, da die Amplitude der Ladungsträgerschwingung bei der Messung auf $< 2 \text{ \AA}$ beschränkt ist, während die Korngröße der poly-Si-Absorberschichten ca. $2 \mu\text{m}$ beträgt.

Da für die Ladungsträgerlebensdauer einer a-Si:H/c-Si-Testprobe keine eindeutige Übereinstimmung zwischen dem HS-PCD- und dem QSSPC/PCD Aufbau festgestellt werden konnte, werden die HS-PCD-Messungen im Rahmen dieser Arbeit nur eingesetzt, um dünne poly-Si-Absorberschichten zu untersuchen. Bei der Untersuchung der poly-Si-Absorberschichten wird die Methode nur genutzt, um die Größenordnung der Ladungsträgerlebensdauer abzuschätzen und grobe Trends der $\tau(\Delta n)$ -Kurve qualitativ zu diskutieren.

SPV Messungen

Der SPV-Messplatz wurde mit Hilfe einer neuen Lichteinkopplung optimiert und auf einen neuen Impedanzwandler umgerüstet. Es wurde erläutert, wie aus dem SPV-Signal unter Berücksichtigung der Demberspannung die Dunkelbandverbiegung berechnet werden kann. Diese Berechnung hängt entscheidend von der maximalen Überschussladungsträgerdichte nach dem Laserpuls ab und ist für höhere Überschussladungsträgerkonzentrationen weniger fehleranfällig. Die Überschussladungsträgerdichte wurde bei der Einkopplung über eine Lichtleiterfaser zu $\Delta n_{laser} = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ abgeschätzt und konnte mit Hilfe einer neuen Lichteinkopplung um den Faktor 2

erhöht werden.

Es wurde eine neue Methode zur numerischen Berechnung der Ladungsträgerlebensdauer aus der SPV-Transiente entwickelt. Unter Vernachlässigung der Demberspannung konnte weiterhin eine analytische Lösung hergeleitet werden. Es wurde gezeigt dass bei halb abgefallener Bandverbiegung die Ladungsträgerlebensdauer in Näherung durch die reziproke Ableitung des SPV Signals nach der Zeit gegeben ist. Der Injektionsbereich, bei dem die Bandverbiegung auf die Hälfte abgefallen ist, wird als besonders günstig zur Berechnung der Ladungsträgerlebensdauer identifiziert, da hier weder der Absolutwert der Bandverbiegung noch die Überschussladungsträgerkonzentration in die Rechnung eingeht.

In diesem Bereich stimmen die mit der SPV und der PCD Methode bestimmten Lebensdauern von einseitig passivierten SiO/Si-Proben in der Größenordnung überein. Für die a-Si:H/c-Si -Solarzellenstrukturen mit Emitter und BSF ergeben sich jedoch größere Abweichungen zwischen den beiden Methoden. Es wird vermutet, dass der Grund dafür in der injektionsabhängigen Umladung der a-Si:H-Defekte liegt. Diese Umladung könnte in Zukunft mit dem Modell, das in Kapitel 5 entwickelt wird, abgeschätzt werden. Ein großen Vorteil bietet die höhere Sensitivität der SPV-Methode, die Messungen bei niedrigeren Injektionsniveaus ermöglicht und sich somit potentiell auch bei dünnen Schichten einsetzen ließe.

5. Modelle zur Berechnung der effektiven Ladungsträgerlebensdauer

In diesem Kapitel wird ein semi-analytisches Modell zur Berechnung von injektionsabhängigen effektiven Ladungsträgerlebensdauern von symmetrisch passivierten Siliziumwafern vorgestellt. Ziel ist, es ein möglichst einfaches Modell zu entwickeln, um schnell und automatisiert $\tau(\Delta n)$ -Kurven zu analysieren und nach Möglichkeit Rückschlüsse auf Materialparameter wie Grenzflächendefektdichte und Grenzflächenladung zu ziehen. Bei der Modellentwicklung wird besonderen Wert darauf gelegt, genau zu analysieren, welche physikalischen Prozesse solch ein Modell beinhalten muss, um valide Ergebnisse zu erzielen. Es wird diskutiert, in welchen Bereichen einfachere, aus der Literatur bekannte Modelle [32] ihre Gültigkeit verlieren. Darüber hinaus wird das neu entwickelte Modell durch Vergleiche mit dem numerischen Solarzellensimulator AFORS-HET validiert. Abschließend wird eine Simulationsstudie durchgeführt, um den Einfluss der Struktur- und Materialparameter auf die $\tau(\Delta n)$ -Kurve und die implizite Leerlaufspannung von Solarzellen zu diskutieren. Die vorgestellten Ergebnisse wurden teilweise in [27, 122] veröffentlicht.

5.1. Semi-analytische Berechnung von Ladungsträgerlebensdauern

Zur Analyse von Lebensdauermessungen wurde im Rahmen dieser Arbeit das ELiFAnT Programm (Effective Lifetime Analysis Tool) entwickelt.¹ Ziel ist es, ein Modell zur Analyse von Lebensdauermessungen zu entwickeln, das wie z. B. die Diodenmodelle für die Strom-Spannungs-Kennlinie eine schnelle Auswertung ermöglicht, um die entscheidenden Material- bzw. Strukturparameter zu bestimmen. Das entwickelte Modell berücksichtigt sowohl die relevanten Rekombinationsprozesse im Volumen (Shockley-Read-Hall (SRH) und Auger) als auch die Rekombination über verteilte DB-Defekte an der Grenzfläche. Es wird ein Konzept vorgestellt, um den Ladungszustand der a-Si:H-Defekte in Abhängigkeit von den Fermienergieebenen zu bestimmen, um die Berechnung der injektionsabhängigen Bandverbiegung zu ermöglichen und deren Einfluss auf die Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit (SRV) mit zu berücksichtigen. Weiterhin wird diskutiert, inwieweit die Ladungsträgerdiffusion zur Grenzfläche einen Einfluss hat, und es wird eine Gleichung zur Berechnung der effektiven Lebensdauer im Gleichgewicht unter Berücksichtigung dieser Diffusion hergeleitet. Primäres Ziel ist hier die Berechnung der Lebensdauer, es können allerdings weitere injektionsabhängige Größen bestimmt werden, von denen die wichtigsten in der folgenden Tabelle zusammengefasst sind:

¹Programmiert mit Mathematica 7.0 von Wolfram Research.

Tabelle 5.1.: Ausgabegrößen von ELifAnT

| | |
|---|--|
| Lebensdauer | $\tau(\Delta n_{av})$ |
| Bandverbiegung | $\Delta\varphi(\Delta n_{av})$ |
| Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit | $S(\Delta n_{av})$ |
| implizite Leerlaufspannung | $V_{oc}^{imp}(\Delta n_{av})$ |
| Ladungszustand von a-Si:H-Schicht und Grenzfläche | $Q_{aSi}(\Delta n_{av}), Q_S(\Delta n_{av})$ |

Bei der Modellentwicklung wird der Ansatz verfolgt, alle Größen als Funktion der über den Siliziumwafer gemittelten Überschussladungsträgerdichte Δn_{av} auszudrücken, die typischerweise bei Lebensdauermessungen bestimmt wird. Dies beinhaltet die Annahme, dass die gleiche Anzahl von Elektronen und Löchern vorliegt $\Delta n_{av} = \Delta p_{av}$. Weiterhin wird angenommen, dass die gemittelte Ladungsträgerdichte der Ladungsträgerdichte im Volumen entspricht $\Delta n_{av} = \Delta n$.² Eine weitere Voraussetzung der Gültigkeit des Modells ist, dass symmetrische Bedingungen vorherrschen. Das heißt an beiden Grenzflächen müssen identische Bedingungen vorliegen und die Ladungsträgerverteilung muss symmetrisch zur Wafermitte sein. Weiterhin wird bei der Berechnung der Rekombinationsraten und der Ladung der Defekte eine Besetzungsfunktion unter Gleichgewichtsbedingungen angenommen. Diese Annahmen werden in einem folgenden Abschnitt durch Vergleich mit AFORS-HET validiert und Abweichungen werden gesondert diskutiert. Insbesondere bei Dünnschichtproben und in Niedriginjektion wird der Fall $\Delta n_{av} \neq \Delta n$ auftreten, der ebenfalls detailliert diskutiert wird. Zunächst sollen hier die Gleichungen, die dem Modell zugrunde liegen vorgestellt werden.

5.1.1. Oberflächenrekombination

Wie in den Grundlagen zur Materialphysik Kapitel 3 diskutiert wurde, muss an den Waferoberflächen eine Defektverteilung angenommen werden. Dabei müssen insbesondere die DB-Defekte berücksichtigt werden, die aufgrund ihrer energetischen Lage nahe der Mitte der Bandlücke besonders rekombinationsaktiv sind. Die energetische Verteilung der DB-Defekte kann durch zwei Gaußkurven Gl. (3.2) angenähert oder mit dem Defekt-Pool-Modell Gl. (3.3) berechnet werden. Die Rekombinationsrate, die mit einer Defektverteilung verbunden ist, kann unter der Annahme berechnet werden, dass die Defekt untereinander nicht wechselwirken. Für amphotere Defekte ergibt sich mit Gl. (2.42):

$$R_S^{db}(n_S, p_S) = (n_S p_S - n_i^2) v_{th}^2 \int_{E_V}^{E_C} D^{db}(E) \frac{c_n^+ c_p^0 P^- + c_n^0 c_p^- N^+}{N^+ P^- + P^0 P^- + N^+ N^0} dE \quad (5.1)$$

Dieser Ansatz der Beschreibung der Grenzflächenrekombination über korrelierte amphotere Defekte wird in aktuellen Publikationen eingesetzt [26, 27, 123] und wird

²Volumen meint hier wieder den Bereich des Wafers, in dem die Bandverbiegung abgefallen ist und $\Delta n(x)$ einen konstanten Wert annimmt.

im Folgenden durch ein Modell zur Beschreibung der injektionsabhängigen Bandverbiegung ergänzt. Auch einige numerische Simulatoren zur Berechnung von a-Si:H-Solarzellen nutzen diese Gleichung zur Beschreibung von korrelierten amphoteren Defekten [74].

Für DB-Defekte, die in Näherung als unkorrelierte Defekte behandelt werden ergibt sich mit Gl. (2.36):

$$R_S^{\text{db}}(n_S, p_S) = (n_S p_S - n_i^2) \int_{E_V}^{E_C} D^{\text{donor}}(E) \frac{c_p^0 c_n^+}{c_n^+ n + e_n^0 + c_p^0 p + e_p^+} dE \\ + (n_S p_S - n_i^2) \int_{E_V}^{E_C} D^{\text{acceptor}}(E) \frac{c_p^- c_n^0}{c_n^0 n + e_n^- + c_p^- p + e_p^0} dE \quad (5.2)$$

In diesem Fall werden die Defektverteilungen $D(E)$ durch Gaußfunktionen beschrieben, wobei die Gaußfunktion der Akzeptoren um die Korrelationsenergie zu höheren Energien verschoben ist. Für die Integrale Gl. (5.1) und Gl. (5.2) lassen sich keine analytischen Lösungen finden, so dass sie numerisch berechnet werden müssen. Diese Näherung zur Berechnung der Grenzflächenrekombination ist aus einigen Arbeiten zur Modellierung der SiO/Si-Struktur bekannt [30, 31]

Es ist besonders darauf zu achten, dass bei beiden Ansätzen die Ladungsträgerdichten $n_S(\Delta n, \Delta \varphi)$ und $p_S(\Delta n, \Delta \varphi)$, die Ladungsträgerdichten an der Grenzfläche sind, die i. Allg. aufgrund von Oberflächenbandverbiegungen $\Delta \varphi$ von den Werten im Volumen abweichen und sich nach Gl. (2.6) berechnen. Somit muss zur Bestimmung der SRV die Oberflächenbandverbiegung bekannt sein.

Bandverbiegung

In Abschnitt 2.1.1 wurde ein Zusammenhang zwischen der Bandverbiegung und der Ladung in der Raumladungszone des Siliziumwafers Q_{cSi} hergeleitet Gl. (2.10). Wie auch schon in Abschnitt 4.2 bei der Diskussion der SPV-Transiente erläutert wurde, kann mit Hilfe der Neutralitätsbedingung die injektionsabhängige Bandverbiegung $\Delta \varphi$ im Falle einer Oberflächenfestladung Q_{fix} berechnet werden:

$$Q_{\text{cSi}}(\Delta n, \Delta \varphi) + Q_{\text{fix}} = 0 \quad (5.3)$$

Diese Gleichung lässt sich nicht analytisch nach $\Delta \varphi(\Delta n)$ lösen, so dass hier ein numerisches Lösungsverfahren angewendet werden muss. Dieser Ansatz zur Berechnung der Bandverbiegung ist in der Literatur weit verbreitet [30–32, 124]. Allerdings wurde vom Autor gezeigt, dass *eine* Festladung die Bandverbiegung im Allgemeinen nicht über den gesamten Injektionsbereich richtig beschreiben kann [27]. Deshalb wurde im Rahmen dieser Arbeit ein genaueres Modell zur Berechnung der injektionsabhängigen Bandverbiegung vorgeschlagen, bei dem die Umladung der Defekte an der a-Si:H/c-Si -Grenzfläche Q_S und im a-Si:H-Volumen Q_{aSi} mit berücksichtigt wird. Die Neutralitätsbedingung für diesen Fall nimmt dann folgende Form an:

$$Q_{\text{cSi}}(\Delta n, \Delta \varphi) + Q_S(\Delta n, \Delta \varphi) + Q_{\text{aSi}}(\Delta n, \Delta \varphi) = 0 \quad (5.4)$$

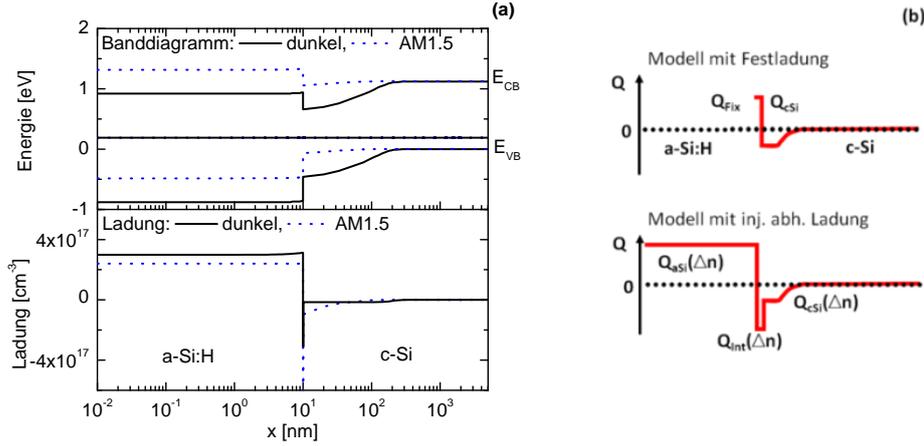


Abbildung 5.1.: In Abb. (a) sind Banddiagramm und Ladung berechnet mit AFORS-HET im Dunkeln (schwarze Linie) und bei Beleuchtung mit AM1.5 (blau gepunktet) dargestellt. In Abb. (b) ist eine Schemazeichnung der beiden Modelle zur semi-analytischen Berechnung der Ladung mit ELifAnT dargestellt. Die Ortsachse ist hier zur besseren Visualisierung logarithmisch skaliert.

Zur Verdeutlichung ist in Abb. 5.1(a) eine exemplarische AFORS-HET Berechnung des Banddiagramms und der Ladung in einer a-Si:H/c-Si -Struktur zu sehen. Dabei wird deutlich, dass sich andere Ladungen in der a-Si:H-Schicht und in der Grenzfläche als bei Beleuchtung ergeben. In Abb. 5.1(b) ist schematisch das semi-analytische Modell zur Berechnung der Ladung mit einer Festladung Gl. (5.3) und das neu entwickelte Modell zur Berechnung einer injektionsabhängigen Ladung Gl. (5.4) zu sehen. Um die injektionsabhängigen Ladungen in der a-Si:H-Schicht und der Grenzfläche zu berechnen, ist insbesondere der Ladungszustand der Defekte entscheidend. Dieser lässt sich wiederum durch Integration über die Bandlücke berechnen. Für amphotere Defekte ergibt sich mit Gl. (2.43):

$$Q^{\text{db}}(n, p) = + \int_{E_V}^{E_C} D^{\text{db}}(E) \left(F^+(n, p) - F^-(n, p) \right) dE \quad (5.5)$$

Für SRH-Defekte ergibt sich mit Gl. (2.37):

$$Q^{\text{acceptor}}(n, p) = - \int_{E_V}^{E_C} D^{\text{acceptor}}(E) f(n, p) dE \quad (5.6)$$

$$Q^{\text{donor}}(n, p) = + \int_{E_V}^{E_C} D^{\text{donor}}(E) (1 - f(n, p)) dE$$

Dabei gehen die Besetzungsfunktionen der amphoteren Defekte $F^+(n, p)$ und $F^-(n, p)$ Gl. (2.40) bzw. die Besetzungsfunktion der SRH-Defekte $f(n, p)$ Gl. (2.35) ein, für deren Berechnung die lokale Ladungsträgerdichte bekannt sein muss. Die Berechnung der Ladung in der Grenzfläche erfolgt analog zur Berechnung der Grenzflächenrekomb-

binationsrate. Bei der Beschreibung als amphotere Defekte ergibt sich mit Gl. (2.37):

$$Q_S(n_S, p_S) = \int_{E_V}^{E_C} D^{\text{db}}(E) \left(F^+(n_S, p_S) - F^-(n_S, p_S) \right) dE. \quad (5.7)$$

Mit den Ladungsträgerdichten an der Grenzfläche $n_S(\Delta n, \Delta\varphi)$ und $p_S(\Delta n, \Delta\varphi)$, die mit Gl. (2.6) berechnet werden können. Die Defektverteilung wird hier mit Hilfe des Defekt-Pool-Modells berechnet oder als Gaußfunktion angenähert. Wie bei der Berechnung der Rekombinationsrate können alternativ auch unkorrelierte Defekte mit Gl. (5.6) berechnet werden.

Zur Berechnung der a-Si:H-Ladung müssen die Ladungsträgerdichten in der Schicht bekannt sein. Um diese im Rahmen eines semi-analytischen Modells berechnen zu können, müssen folgende Annahmen gemacht werden:

- Die quasi-Ferminiveaus der Elektronen und Löcher nehmen in der gesamten Struktur inklusive der amorphen Schicht den gleichen Wert an.
- Die gesamte Bandverbiegung fällt in der kristallinen Schicht ab. In der a-Si:H-Schicht sind die Bänder flach.

Unter diesen Vereinfachungen ergibt sich die Ladung in der a-Si:H-Schicht der Dicke W zu:

$$Q_{\text{aSi}}(n_{\text{aSi}}, p_{\text{aSi}}) = W \cdot (p_{\text{aSi}} - n_{\text{aSi}} + N_D - N_A + Q_D(n_{\text{aSi}}, p_{\text{aSi}})). \quad (5.8)$$

Effektiv bedeutet dieser Ansatz, dass die a-Si:H-Defekte auf die Grenzfläche projiziert werden. In Abb. 5.1(a) ist exemplarisch gezeigt, dass dies eine sinnvolle Annahme ist und in detaillierteren Studien wird noch gezeigt werden, dass die Ladung in dünnen Schichten so auch im Allgemeinen gut approximiert werden kann. Die Ladung in Defekten Q_D macht dabei einen entscheidenden Anteil aus und setzt sich aus der Ladung in den Bandausläufern Q_{bt} und den DB-Defekten Q_{db} im a-Si:H-Volumen zusammen:

$$Q_D(n_{\text{aSi}}, p_{\text{aSi}}) = Q_{\text{bt}}(n_{\text{aSi}}, p_{\text{aSi}}) + Q_{\text{db}}(n_{\text{aSi}}, p_{\text{aSi}}). \quad (5.9)$$

Die Berechnung der Ladung in den Bandausläufern erfolgt mit Gl. (5.6) und den Defektverteilungen Gl. (3.1), die die exponentielle Zunahme der Defektdichte zu den Bandkanten hin beschreiben. Die Berechnung der Ladung in den DB-Defekten erfolgt analog zu der für die Grenzfläche entweder mit Gl. (5.5) für amphotere Defekte oder mit Gl. (5.6) für die Näherung als unkorrelierte Defekte. Bei der Berechnung der Besetzungsfunktionen der Defekte gehen die Ladungsträgerdichten im a-Si:H, n_{aSi} und p_{aSi} , ein, die neben der Bandverbiegung auch noch von den Bandoffsets abhängen und im Rahmen der eingeführten Näherung wie folgt berechnet werden:

$$\begin{aligned} n_{\text{aSi}}(\Delta n, \Delta\varphi) &= N_C^{\text{aSi}} \exp\left(\beta \left(E_C^{\text{cSi}} + \Delta E_C - E_{\text{Fn}} - e\Delta\varphi \right)\right) \\ &= (n_0 + \Delta n) \frac{N_c^{\text{aSi}}}{N_c^{\text{cSi}}} \exp(\beta (e\Delta\varphi - \Delta E_C)), \\ p_{\text{aSi}}(\Delta n, \Delta\varphi) &= N_V^{\text{aSi}} \exp\left(\beta \left(E_V^{\text{cSi}} - \Delta E_V - E_{\text{Fp}} - e\Delta\varphi \right)\right) \\ &= (p_0 + \Delta n) \frac{N_v^{\text{aSi}}}{N_v^{\text{cSi}}} \exp(\beta (\Delta E_V - e\Delta\varphi)). \end{aligned} \quad (5.10)$$

Durch die Darstellung von n_S , p_S , n_{aSi} und p_{aSi} als Funktion von Δn und $\Delta\varphi$ erhält man auch die Ladungen Q_S und Q_{aSi} als Funktion von Δn und $\Delta\varphi$. So dass sich mit der Neutralitätsbedingung Gl. (5.4) bei einer vorgegebenen Überschussladungsträgerkonzentration Δn die Bandverbiegung $\Delta\varphi$ numerisch berechnen lässt. Bei bekannter Bandverbiegung kann dann mit Gl. (5.1) bzw. Gl. (5.2) die SRV berechnet werden. Im Vergleich zu der Annahme einer Festladung ist die Berechnung der Bandverbiegung nach Gleichung Gl. (5.4) bedeutend langsamer, da bei der numerischen Lösung nach $\Delta\varphi$ die Integrale zur Berechnung der Ladung numerisch gelöst werden müssen.

Defektverteilung

Wie bereits diskutiert wurde, gehen in die Berechnung der Rekombination die Defektverteilung an der Grenzfläche ein und in die Berechnung der Bandverbiegung die Defektverteilung an der Grenzfläche und im a-Si:H-Volumen.

Die a-Si:H-Defektverteilung im Volumen wurde in Abschnitt 3.1.2 diskutiert. Sie besteht aus den Bandausläufern und den DB-Defekten. Die Verteilung der DB-Defekte kann entweder über das Defekt-Pool-Modell berechnet oder als Gaußfunktion angenähert werden. Bei der Berechnung mit dem Defekt-Pool-Modell ist zu beachten, dass die DB-Defektdichte entscheidend von der Lage des Fermi-niveaus und der Valenzbandausläufer-(VBT)-Urbachenergie bei der Glasktemperatur abhängt. Die Verteilung wird also nach Gl. (3.3) bei der Glasktemperatur bestimmt und das a-Si:H-Fermi-niveau bei Raumtemperatur lässt sich dann numerisch mit Gl. (5.4) bestimmen. Soll im Modell das Fermi-niveau bei Raumtemperatur vorgegeben werden, ist ein iterativer Prozess nötig, um das Fermi-niveau bei der Glasktemperatur und damit die Defektverteilung zu bestimmen. Der korrekte Einsatz des Defekt-Pool-Modells setzt also das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Modell für die injektionsabhängige Bandverbiegung voraus.

Die Details der Defektverteilung an der Grenzfläche sind noch nicht abschließend geklärt. Es liegt allerdings nahe, anzunehmen, dass die Bindungen des Silizium-Wafers an der Oberfläche nicht vollständig durch die a-Si:H-Schicht abgesättigt werden und somit auch hier DB-Defekte vorliegen. Die Annahme einer Gaußverteilung für Grenzflächendefekten hat sich auch zur Beschreibung von SiO/Si-Strukturen [30, 31] und von Korngrenzen in Poly-Si [80, 85] etabliert. Obwohl eine direkte Messung von Grenzflächendefektdichten schwierig ist, geben auch SPV-Messungen einen Hinweis darauf, dass die Defekte an der a-Si:H/c-Si -Grenzfläche einer breiten Verteilung folgen [125]. Aufgrund dieser Befunde wird im Rahmen der Arbeit (und in Publikationen des Autors [27, 126]), sowie in anderen aktuellen Publikationen [68, 123] auch für die a-Si:H/Si-Grenzfläche angenommen, dass die Defekte über die Energie verteilt sind. Bei der Beschreibung der Grenzfläche als energetisch verteilte DB-Defekte stellt sich wiederum die Frage nach den Details der Verteilung. In der Literatur findet sich der Ansatz, das Defekt-Pool-Modell auch an der Grenzfläche einzusetzen [123]. Es wird auch diskutiert, dass ein Tunnelprozess beteiligt sein könnte, der die a-Si:H-Defekte an das c-Si koppelt [45].³

³Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden diverse Tunnelprozess implementiert, allerdings ist das Modell zur Beschreibung des Band-zu-Defekt-Tunnels an einer Heterogrenzfläche noch nicht funktionsfähig und soll deshalb hier nicht diskutiert werden. Erste Ergebnisse deuten jedoch an,

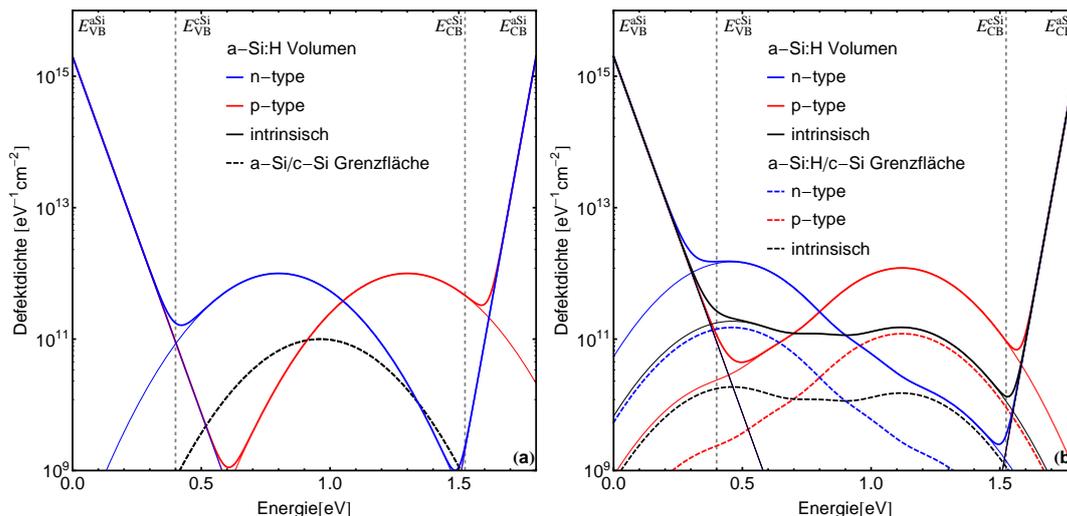


Abbildung 5.2.: Projizierte a-Si:H-Volumendefektdichten und Grenzflächendefektdichten berechnet als einfache Gaußfunktionen (a) und mit dem Defekt-Pool-Modell (b). Die Verteilungen in (a) ergeben sich aus den Parametern in Tab. 3.2 und mit der Annahme für die energetische Position der Gaußfunktion bei $E_{DB} = 0.8$ für n-Typ und bei $E_{DB} = 1.3$ für p-Typ a-Si:H. Die Gaußfunktion der Grenzflächendefekte wird hier zentriert in der c-Si-Bandlücke angenommen. Für die Defektdichte im a-Si:H-Volumen wurde hier exemplarisch $N_{DB} = 10^{18} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$ angenommen, so dass sich bei einer a-Si:H-Schichtdicke von 10 nm eine projizierte Flächendichte von $N'_{DB} = 10^{12} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ ergibt. Die Verteilung in (b) ist mit dem Defekt-Pool-Modell Gl. (3.3) berechnet (Defekt-Pool Parameter: siehe Abschnitt 3.1.2 oder [59]). Als Fermi-niveau wurde hier exemplarisch für das p-Typ a-Si:H-0.7 eV und für n-Typ 1.1 eV angenommen. Die projizierte Defektdichte ergibt sich wiederum durch Multiplikation mit der a-Si:H-Schichtdicke von 10 nm. Die Grenzflächendefekte ergeben sich aus der Annahme, dass die grenzflächennahen a-Si:H-Defekte (bis 1 nm Abstand) als Grenzflächendefekte wirksam sind. Weitere Parameter sind: a-Si:H-Bandlücke $E_G^{aSi} = 1.8 \text{ eV}$, VB-Urbachenergie $E_{VB} = 0.04 \text{ eV}$, CB-Urbachenergie $E_{CB} = 0.02 \text{ eV}$ und VB-Offset $E_{VB} = 0.4 \text{ eV}$.

In der vorliegenden Arbeit werden zwei Ansätze zur Beschreibung der Defektverteilung verfolgt. In der einfachen Version des Modells wird im Volumen und an der Grenzfläche eine Gaußverteilung für die DB-Defekte angenommen, Abb. 5.2(a). In einer Weiterentwicklung des Modells wird die Defektverteilung im Volumen mit dem Defekt-Pool berechnet, Abb. 5.2(b), und die Grenzflächendefekte ergeben sich aus der Annahme, dass die grenzflächennahen a-Si:H-Defekte bis zu einem gewissen Abstand Rekombinationszentren für Ladungsträger im c-Si darstellen. Zur Berechnung der injektionsabhängigen Defektladung müssen die Defektdichten im a-Si:H-Volumen in beiden Ansätzen entsprechend Gl. (5.8) mit der Schichtdicke multipliziert werden, weshalb in Abb. 5.2 Defektflächendichten in cm^{-2} dargestellt sind. Die gezeigten Defektdichten dienen hier allgemein zur exemplarischen Verdeutlichung des Ansatzes. Darüber hinaus werden die Verteilungen in Abb. 5.2(a) später eingesetzt, um das semi-analytische Modell mit dem numerischen Solarzellensimulator AFORS-HET zu vergleichen.

Damit wurden alle Details zur Berechnung der SRV diskutiert. Aus der SRV und der Volumenlebensdauer lässt sich die effektive Lebensdauer berechnen, wie im Folgenden

dass dieser Tunnelprozess zumindest bei der Berechnung der Strom-Spannungs-Kennlinie relevant ist.

beschrieben wird.

5.1.2. Effektive Lebensdauer

Die Berechnung der Volumenlebensdauer wurde in Abschnitt 2.3 diskutiert. Im Siliziumwafer muss die Augerlebensdauer entsprechend Gl. (2.29) berücksichtigt werden und die SRH-Rekombination nach Gl. (2.36). Wie in Abschnitt 3.1.1 diskutiert, wird dabei zur Modellierung der Waferqualität ein Defekt in der Bandmitte angenommen. Wie in den Grundlagen gezeigt wurde, kann die strahlende Band-Band-Rekombination in Silizium vernachlässigt werden. Die Volumenlebensdauer τ_b ergibt sich aus Auger- und SRH-Rekombination entsprechend Gl. (2.48). Die effektive Lebensdauer ergibt sich wiederum aus der Volumenlebensdauer und der Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit (SRV) S . Im transienten Fall gilt allgemein für symmetrische Proben Gl. (2.59) und in der Näherung kleiner SRVs gilt Gl. (2.58):

$$\tau_{\text{eff}} = \left(\frac{1}{\tau_b} + \frac{2S}{W} \right)^{-1} \quad \text{für} \quad \frac{S \cdot W}{D_n} < \frac{1}{4}. \quad (5.11)$$

Effektive Lebensdauer im Gleichgewicht

In einer Literaturrecherche konnte keine detaillierte Herleitung der effektiven Lebensdauer im Gleichgewicht gefunden werden, weshalb die entsprechenden Rechnungen im Rahmen dieser Arbeit durchgeführt wurden. Ausgangspunkt ist die Kontinuitätsgleichung für die Überschussladungsträger Gl. (2.51):

$$G(x) - \frac{\Delta n(x)}{\tau_b} + D \frac{\partial^2 \Delta n(x)}{\partial^2 x} = 0 \quad (5.12)$$

mit den Randbedingungen

$$\pm D \frac{\partial \Delta n(x)}{\partial x} \Big|_{\mp \frac{W}{2}} = S \Delta n \left(\mp \frac{W}{2} \right). \quad (5.13)$$

Als Lösung dieser Differentialgleichung erhält man das Profil der Überschussladungsträgerkonzentration $\Delta n(x)$. Im Allgemeinen muss Gl. (5.12) numerisch gelöst werden. Bei Annahme einer konstanten, nicht von der Ortskoordinate abhängigen Generation $G(x) = G$ kann jedoch eine analytische Lösung gefunden werden:

$$\Delta n(x) = G \tau_b \left(1 - \frac{S \tau_b \cosh \left(\frac{x}{\sqrt{\tau_b D_n}} \right)}{S \tau_b \cosh \left(\frac{L}{2\sqrt{\tau_b D_n}} \right) + \sqrt{\tau_b D_n} \sinh \left(\frac{L}{2\sqrt{\tau_b D_n}} \right)} \right). \quad (5.14)$$

Aus dem Ladungsträgerprofil aus Gl. (5.14) und Gl. (2.60) für die Lebensdauer lässt sich dann die effektive Ladungsträgerlebensdauer im Gleichgewicht berechnen:

$$\tau_{\text{eff}} = \int_{-\frac{W}{2}}^{+\frac{W}{2}} \frac{\Delta n(x)}{G} dx = \tau_b - \frac{2S \tau_b^2 D_n}{L \left(S \sqrt{\tau_b D_n} \coth \left(\frac{L}{2\sqrt{\tau_b D_n}} \right) + D_n \right)}. \quad (5.15)$$

So kann die Lebensdauer auch unter Berücksichtigung der Diffusion bei hohen SRVs berechnet werden. Entwickelt man Gl. (5.15) für kleine S , so ergibt sich wieder Gl. (5.11):

$$\tau_{\text{eff}} = \left(\frac{1}{\tau_b} + \frac{2S}{L} + O(S^2) \right)^{-1} \quad (5.16)$$

Besonders bei niedrigen Injektionsdichten⁴ treten weitere Effekte auf, die im Folgenden diskutiert werden.

Effekte in Niedriginjektion

Zunächst soll der Fall diskutiert werden, in dem die Annahme $\Delta n_{\text{av}} = \Delta n$ ungültig ist. Bereits in Abschnitt 2.1.1, in dem die Poissongleichung im Halbleiter diskutiert wurde, wurde darauf hingewiesen, dass die Überschussladungsträgerkonzentration in Niedriginjektion stark durch die Ladungsträger im Bereich der Raumladungszone bestimmt werden kann (siehe Abb. 2.2). Hier kommt ein Effekt zum Tragen, der in der Literatur unter dem Namen DRM-Effekt (depletion region modulation⁵) diskutiert wird [127–129]. Die Änderung der Bandverbiegung geht mit einer Abnahme der Breite und einer Änderung der lokalen Überschussladungsträgerkonzentrationen in der Raumladungszone einher. Für den Fall, dass die Überschussladungsträgerkonzentration in der Raumladungszone groß gegen die im Halbleitervolumen ist, hat dies einen entscheidenden Einfluss auf die mit Photoleitfähigkeit gemessene Ladungsträgerlebensdauer. Dies liegt daran, dass bei der Messung die gemittelte Überschussladungsträgerkonzentration Δn_{av} bestimmt wird, die mit Gl. (2.13) berechnet werden kann:

$$\begin{aligned} \Delta n_{\text{av}}(\Delta n) &= \frac{2}{W}(\Delta N_{\text{SCR}}(\Delta n) - \Delta N_{\text{SCR}}(0)) + \Delta n, \\ \Delta p_{\text{av}}(\Delta n) &= \frac{2}{W}(\Delta P_{\text{SCR}}(\Delta n) - \Delta P_{\text{SCR}}(0)) + \Delta n. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Die Größen $\Delta N_{\text{SCR}}(\Delta n)$ und $P_{\text{SCR}}(\Delta n)$ können mit Gl. (2.12) berechnet werden.⁶ Wie im Folgenden noch gezeigt wird, führt dieser Effekt dazu, dass für $\Delta n_{\text{av}}/\Delta n \gg 1$ stark erhöhte Lebensdauern in Niedriginjektion bestimmt werden. Da dieser Effekt von der Probendicke W abhängt, muss er insbesondere bei der Untersuchung der poly-Si-Dünnschichtproben berücksichtigt werden, wie später noch gezeigt wird. Oft wird der DRM-Effekt als Messartefakt diskutiert. In diesem Fall wird die echte Lebensdauer als $\tau = \frac{\Delta n}{G}$ definiert und die gemessene Lebensdauer $\tau = \frac{\Delta n_{\text{av}}}{G}$ muss bei allen Methoden, die die Lebensdauer aus der mittleren Überschussladungsträgerkonzentration bestimmen, korrigiert werden.

Ein weiterer Effekt der in Niedriginjektion auftreten kann, ist der Einfang von Ladungsträgern (Trapping-Effekt) [130, 131]. Zur Diskussion soll zwischen dem Gleichgewichts-Trapping-Effekt und dem transienten Trapping-Effekt unterschieden werden. Mit dem

⁴Der genaue Injektionsbereich hängt von den Probenparametern ab. Bei a-Si:H/c-Si -Proben mit geringer Grenzflächenrekombination liegt er bei $\Delta n < 10^{13} \text{ cm}^{-3}$.

⁵Modulation der Verarmungszone

⁶Die mathematische Herleitung des Effekts erfolgt ähnlich wie bei Bail et al. [127]. Dort wird allerdings direkt die Änderung der Photoleitfähigkeit durch den DRM-Effekt berechnet.

Gleichgewichts-Trapping-Effekt ist gemeint, dass es bei hohen Defektdichten dazu kommen kann, dass unter Beleuchtung ein Ladungsträgertyp verstärkt in Defekten eingefangen wird. Dies kann dazu führen, dass, obwohl bei der Generation pro Zeiteinheit gleich viele Elektronen und Löcher erzeugt werden, eine unterschiedliche Zahl von freien Ladungsträgern in den Bändern vorliegt ($\Delta n_{av} \neq \Delta p_{av}$). Prinzipiell wäre es möglich, diesen Effekt in das Modell zu integrieren, da der Unterschied der Ladungsträgerdichten durch die Umladung der Defekte gegeben ist ($\Delta p - \Delta n = \Delta Q_D$), der im Rahmen des Modells berechnet werden kann. Hier wird jedoch auf dieses Vorgehen verzichtet, da der numerische Mehraufwand keine großen Vorteile in der Anwendung bringt, wie noch gezeigt wird. Zudem kann dieser Effekt mit AFORS-HET simuliert werden, so dass sich der Gültigkeitsbereich des einfachen Ansatzes untersuchen lässt.

Ein weiterer Effekt, der im Rahmen dieser Arbeit jedoch nicht detailliert untersucht wurde und im Rahmen des vorgestellten semi-analytischen Modells nicht berechnet werden kann, ist der **transiente Trapping-Effekt**, wie er von Hornbeck und Haynes beschrieben wird [132]. Dabei wird diskutiert, dass die in den Defekten gefangenen Ladungsträger mit einer gewissen Zeitkonstante wieder reemittiert werden können. Bei transienten Messungen kann dies zu einer Zunahme der gemessenen Lebensdauer in Niedriginjektion führen, da die Ladungsträgerdichte durch die Reemission erhöht wird.

5.1.3. Effective Lifetime Analysis Tool (ELifAnT)

Mit ELifAnT lassen sich die vorgestellten Gleichungen kombinieren, um Modelle für die effektive Ladungsträgerlebensdauer mit verschiedener Präzision bereitzustellen. Hier wird kurz zusammengefasst, welche der vorgestellten Gleichungen und welche Modellparameter in diese Modelle eingehen.

Die Modellparameter wurden in Kapitel 3 diskutiert, in denen die Materialeigenschaften von amorphem und kristallinem Silizium vorgestellt wurden. Bei den a-Si:H/c-Si-Solarzellen mit hohen Effizienzen sind c-Si-Wafer guter Qualität mit Defektdichten $N_{tr} < 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ gebräuchlich (weitere c-Si-Parameter siehe Abschnitt 3.1.1 und Tab. 3.1). Die Parameter, die die Grenzfläche und die die a-Si:H-Schicht beschreiben, hängen stark von den Depositionsparametern ab und sind nur zum Teil bekannt (siehe Abschnitt 3.1.2 und Tab. 3.2).

Es werden im Folgende zwei Modelle unterschieden. Zum Einen das **Modell mit effektiver Festladung**, bei dem die Bandverbiegung nach dem einfachen Ansatz in Gl. (5.3) berechnet wird.

$$\tau(\Delta n, Q_{\text{eff}}, D_{\text{it}}). \quad (5.18)$$

In diesem Modell gehen neben der Festladung nur die Parameter der DB-Defekte (siehe Tab. 3.2, Tabellenabschnitt: Parameter der DB-Defekte) ein. Bei Verwendung der Literaturdaten in Tab. 3.2 bleiben als freie Parameter, die mit dem Modell bestimmt werden sollten: die Grenzflächendefektdichte D_{it} sowie die effektive Festladung Q_{eff} . Für die energetische Lage und Breite der Gaußfunktion, die die Grenzflächendefekte beschreibt, werden Annahmen gemacht, wie sie in Abschnitt 5.1.1 diskutiert wurden (siehe Abb. 5.2(a)).

Zum anderen das **Modell mit injektionsabhängiger Ladung**, bei dem die

Bandverbiegung mit Gl. (5.4) berechnet wird:

$$\tau(\Delta n, E_{F^*}^{\text{aSi}}, D_{\text{it}}). \quad (5.19)$$

Hier gehen alle Literaturdaten aus Tab. 3.2 ein, und als unbekannte Parameter bleiben jene, die die Defektverteilung im a-Si:H beschreiben und jene, die die Defektverteilung an der Grenzfläche beschreiben, sowie das Fermi-Niveau in der a-Si:H-Schicht. Die freien Parameter lassen sich nochmals durch das Defekt-Pool-Modell reduzieren, das die Defektverteilung im a-Si:H in Abhängigkeit vom Fermi-Niveau beschreibt (siehe Abschnitt 3.1.2). Es verbleiben dann als freie Parameter: die Grenzflächendefektdichte D_{it} sowie das Fermi-Niveau in der a-Si:H-Schicht $E_{F^*}^{\text{aSi}}$. Wiederum werden für die energetische Lage und Breite der Gaußfunktion, die die Grenzflächendefekte beschreibt, Annahmen gemacht, wie in Abschnitt 5.1.1 diskutiert (siehe Abb. 5.2(a)). Eine Möglichkeit besteht darin, die a-Si:H-Volumendefekte auf die Grenzfläche zu projizieren, wie in Abb. 5.2(b) gezeigt.

In beiden Modellen kann die Rekombination und der Ladungszustand der DB-Defekte mit Shockley-Read-Hall-(SRH)-Gleichungen oder mit den Gleichungen für korrelierte amphotere Defekte berechnet werden.

Es soll hier betont werden, dass es eine gewisse Unsicherheit bei den genauen Wert für die Defektdichte gibt, die mit diesen Modellen bestimmt werden kann, da nicht die Defektdichte alleine die Rekombinationsrate bestimmt, sondern das Produkt aus Defektdichte und Einfangquerschnitt $D_{\text{it}} \times \sigma_{n,p}$. Als Einfangquerschnitte werden hier Literaturdaten angenommen, wobei hier eine gewisse Unsicherheit besteht, wie in den Grundlagen zu amorphem Silizium diskutiert wurde Abschnitt 3.1.2. Eine genauere Bestimmung der Einfangquerschnitte wäre folglich wichtig, um präzisere Modellierungen durchführen zu können und den genauen Wert der Defektdichte zu bestimmen.

5.2. Numerische Simulation von Lebensdaueremessungen mit AFORS-HET

Um Referenzrechnungen für das semi-analytische Modell durchführen zu können wurde im Rahmen der Arbeit auch ein Modul zur numerischen Berechnung von Ladungsträgerlebensdauern in AFORS-HET implementiert. Dabei wird in AFORS-HET eine symmetrische Struktur a-Si:H/c-Si/a-Si:H definiert wobei die Grenzflächen als dünne (1 Å) c-Si-Schichten definiert werden können (siehe Abb. 5.3).

Da bei der Simulation von Ladungsträgerlebensdauern im Gegensatz zur Simulation von j-V-Kennlinien kein externer Strom fließt, wurden neue Randbedingungen implementiert. Die a-Si:H/Luft-Grenzfläche wird als Kontakt zu einem idealen Isolator beschrieben, wobei zusätzlich die Definition von Oberflächendefekten und einer Oberflächenladung möglich ist. Es ergeben sich dann folgende Randbedingungen ergeben:⁷

⁷Es handelt sich hier um eine Erweiterung der Randbedingung, wie sie z. B. von Selberherr diskutiert wird [7].

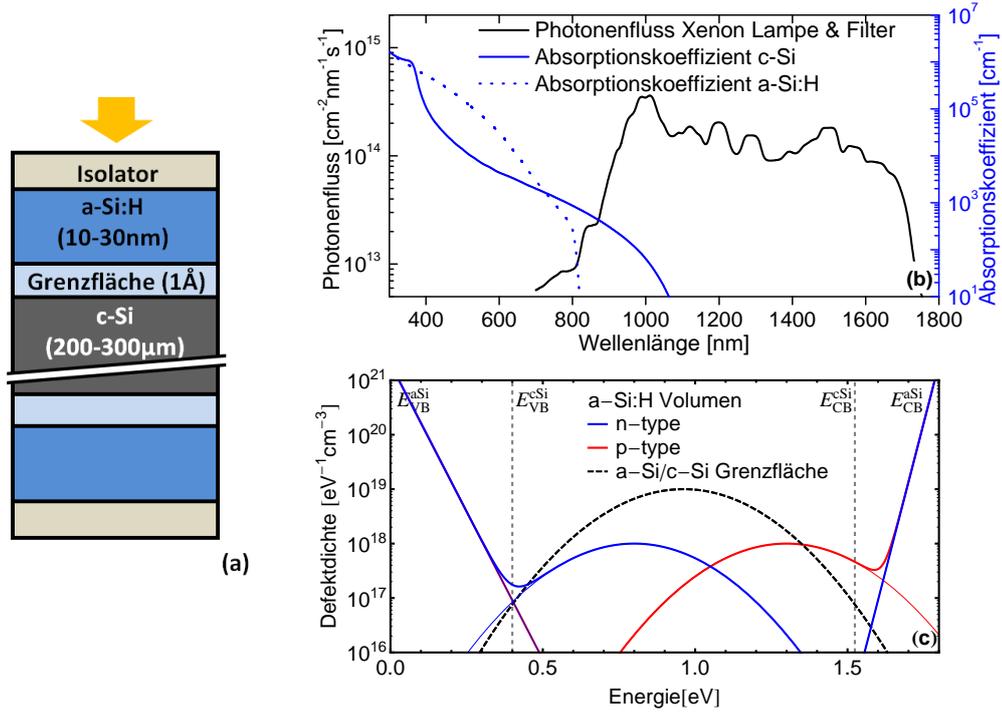


Abbildung 5.3.: Symmetrische Struktur zur Berechnung von Lebensdauern mit AFORS-HET (a) und Beleuchtungsspektrum (gemessen) und Absorptionskoeffizienten [6] (b) sowie Defektverteilungen im a-Si:H-Volumen und Grenzfläche (c). Hier sind exemplarische Defektverteilungen angenommen, die denen in Abb. 5.2(a) entsprechen. Mit einer Breite der Grenzfläche von 1Å ergibt sich aus der Volumendichte von 10^{19}cm^{-3} eine Grenzflächendichte von 10^{11}cm^{-3} .

$$\begin{aligned}
 0 &= -\epsilon_0\epsilon_r \frac{\partial\varphi(x)}{\partial x} \Big|_{x_{\text{FS}}} - e \sum_i \rho_{\text{D}}^i - eQ_{\text{fix}}, \\
 0 &= +j_{\text{n}}(x_{\text{FS}}) - \sum_i R_{\text{n}}^i(x_{\text{FS}}), \\
 0 &= -j_{\text{p}}(x_{\text{FS}}) - \sum_i R_{\text{p}}^i(x_{\text{FS}}).
 \end{aligned} \tag{5.20}$$

Der Gitterpunkt der vorderen Oberfläche ist hier mit x_{FS} bezeichnet. Für die Rückseite ergeben sich analoge Gleichungen. Bei der hier vorgestellten Randbedingung ist also die Definition von Oberflächendefekten möglich, deren Rekombinationsraten R_{n} und R_{p} und Ladung ρ_{D} sich nach Gl. (2.32) und Gl. (2.37) berechnen. Durch die Festladung Q_{fix} kann eine zusätzliche Oberflächenbandverbiegung simuliert werden.⁸

⁸Diese Randbedingungen wurden eingesetzt, um das einfache semi-analytische Modell Gl. (5.3) zu validieren. Dabei wurde ein c-Si-Wafer mit der Isolatorrandbedingung inklusive Defektverteilung und Festladung versehen, ohne dass explizit eine a-Si:H-Schicht definiert wurde. Für dieses Modellsystem ergibt sich eine perfekte Übereinstimmung zwischen AFORS-HET und dem semi-analytischen Modell. Im Rahmen dieser Arbeit wird aber nur der Vergleich zur vollständigen Struktur aus Abb. 5.3 präsentiert.

Bei dem im Rahmen der dieser Arbeit präsentierten Rechnungen werden allerdings keine zusätzlichen Defektverteilungen an der a-Si:H-Oberfläche angenommen.

Im Gegensatz zu dem semi-analytischen Modell sind mit AFORS-HET auch eventuelle Inhomogenitäten durch die einseitige Beleuchtung berücksichtigt werden. Das Spektrum der im QSSPC/PCD-Aufbau eingesetzten Xenon-Blitzlichtlampe ist in Abb. 5.3(b) zu sehen. Der eingesetzte Tiefpassfilter sorgt dafür, dass der sichtbare Bereich des Spektrums nur eine geringe Intensität hat und so ein möglichst homogenes Ladungsträgerprofil erreicht werden kann.

Die effektive Lebensdauer ergibt sich mit Gl. (2.53) zu:

$$\begin{aligned}\Delta n_{\text{av}}^i &= \frac{1}{W} \int_0^W (n_{\text{light}}^i(x) dx - n_0(x)) dx, \\ \Delta G_{\text{av}}^i &= \frac{1}{W} \int_0^W G^i(x) dx, \\ \tau_n(\Delta n_{\text{av}}^i) &= \frac{\Delta n_{\text{av}}^i}{\Delta G_{\text{av}}^i}.\end{aligned}\tag{5.21}$$

Die Strukturgröße W ist hier die Absorberdicke (c-Si-Schicht). Die Intensität wird in Schritten $i \dots N$ variiert, so dass man eine injektionsabhängige Lebensdauerkurve erhält. Eine analoge Gleichung ergibt sich für die Löcher:

$$\tau_p(\Delta p_{\text{av}}^i) = \frac{\Delta p_{\text{av}}^i}{\Delta G_{\text{av}}^i}.\tag{5.22}$$

Um Lebensdauermessungen zu simulieren, die mit der Photoleitfähigkeits-Methode gemessen werden, kann eine effektive Photoleitfähigkeits-Ladungsträgerdichte und -Ladungsträgerlebensdauer berechnet werden. Entsprechend dem Vorgehen von Cuevas wird eine Näherung für die Photoleitfähigkeit eingeführt [114]:

$$\Delta \sigma_{\text{av}}^{\text{PC}} = \int_0^W (\Delta n \cdot \mu_n + \Delta p \cdot \mu_p) dx \approx e \Delta n_{\text{av}}^{\text{PC}} (\mu_n + \mu_p) W,\tag{5.23}$$

$$\Delta n_{\text{av}}^{\text{PC}} = \frac{\Delta n_{\text{av}} \cdot \mu_n + \Delta p_{\text{av}} \cdot \mu_p}{(\mu_n + \mu_p)}.\tag{5.24}$$

Damit errechnet sich dann die Lebensdauer, die bei einer Photoleitfähigkeitsmessung bestimmt wird, wie folgt:

$$\tau_{\text{PC}}(\Delta n_{\text{av}}^{\text{PC}}) = \frac{\Delta n_{\text{av}}^{\text{PC}}}{\Delta G_{\text{av}}}.\tag{5.25}$$

In AFORS-HET werden $\tau_n(\Delta n_{\text{av}})$, $\tau_p(\Delta p_{\text{av}})$ sowie $\tau_{\text{PC}}(\Delta n_{\text{av}}^{\text{PC}})$ ausgegeben. Im folgenden findet sich ein Vergleich von $\tau(\Delta n)$ -Kurven, berechnet mit AFORS-HET und mit ELifAnT .

5.3. Simulationsstudie zum Einfluss der physikalischen Prozesse auf die effektive Lebensdauer

Es wird untersucht wie sensitiv die Ladungsträgerlebensdauer von den im vorherigen Kapitel vorgestellten physikalischen Modellen abhängt und ob diese Modelle eine korrekte Modellierung erlauben. Dabei werden die Rechnungen mit dem numerische Halbleitersimulator AFORS-HET verglichen. Die AFORS-HET Rechnungen werden als Referenz eingesetzt, um sicherzustellen das der Gültigkeitsbereich des Modells in seinen verschiedenen Ausbaustufen vor der Anwendung zur Analyse von experimentellen Daten geklärt ist.

Um einen Vergleich zu AFORS-HET zu ermöglichen, das weder die Berechnung der Rekombination über amphotere Defekte noch die Berechnung der Defektverteilung mit dem Defekt-Pool ermöglicht, wird hier die SRH-Statistik angewendet und es werden die Parameter für die Defektverteilung aus Abb. 5.2(a) angenommen. Die Auger-Rekombination wird ebenfalls nach dem einfachen Modell aus Gl. (2.28) berechnet. Die Hauptmerkmale typischer $\tau(\Delta n)$ -Kurve n werden zunächst anhand von zwei Beispielstrukturen, einmal mit einer kleinen und einmal mit einer großen Dunkelbandverbiegung, diskutiert. Dabei wird besonders die injektionsabhängige Defektumladung und der DRM-Effekt im Detail betrachtet. Anschließend werden Vergleichsrechnungen der verschiedenen Modelle in einem größeren Parameterbereich diskutiert. Dabei werden die Grenzflächendefektdichte D_{it} , die a-Si:H-Defektdichte N_{aSi} und die Festladung Q_{eff} bzw. a-Si:H-Dotierung $N_{A,D}^{aSi}$ variiert.

5.3.1. Einfluss der injektionsabhängigen Defektumladung

In Abb. 5.4 ist die effektive Lebensdauer exemplarisch für eine a-Si:H/c-Si -Struktur mit einer relativ kleinen Dunkelbandverbiegung von ca. 200 meV gezeigt. Als Wafer wird ein 200 μm p-Typ c-Si mit einer Dotierung von $1.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ angenommen. Die amorphe Schicht ist schwach dotiert und hat eine Defektverteilung wie in Abb. 5.2(a).

Die Beispielrechnung in Abb. 5.4 zeigt, dass es entscheidend ist, ein genaues Modell zur Berechnung der injektionsabhängigen Bandverbiegung zu verwenden. Um dies im Detail zu belegen, wird in Abb. 5.4(a) die injektionsabhängige Gesamtladung gezeigt, die sich aus der Ladung in der a-Si:H-Schicht und der Ladung in den Grenzflächendefekten ergibt. Diese Ladung erzeugt die in Abb. 5.4(b) zu sehende Bandverbiegung. Es wird deutlich, dass sich bei Annahme einer injektionsabhängigen Ladung und Bandverbiegung nach Gl. (5.4) eine exzellente Übereinstimmung mit den numerischen AFORS-HET Simulationen ergibt. Weiterhin wird deutlich, dass man keine effektive Festladung finden kann, die über den gesamten Injektionsbereich eine korrekte Berechnung der Bandverbiegung nach Gl. (5.3) im Rahmen eines einfacheren Modells ermöglicht. Wählt man eine effektive Festladung, so dass sich die korrekte Dunkelbandverbiegung ergibt, wird die Bandverbiegung für $\Delta n > 10^8 \text{ cm}^{-3}$ überschätzt, und wählt man eine Festladung, um die Bandverbiegung in QSSPC/PCD Messbereich ($\Delta n > 10^{13} \text{ cm}^{-3}$) richtig zu modellieren, ergeben sich Abweichungen für niedriger Injektionsdichten. Dies liegt daran, dass sich in der realen Struktur die Defekte in der a-Si:H-Schicht und in der Grenzfläche umladen, wie in Abb. 5.4(a) zu sehen ist. Die Details dieser injektionsabhängigen Defektumladung werden damit

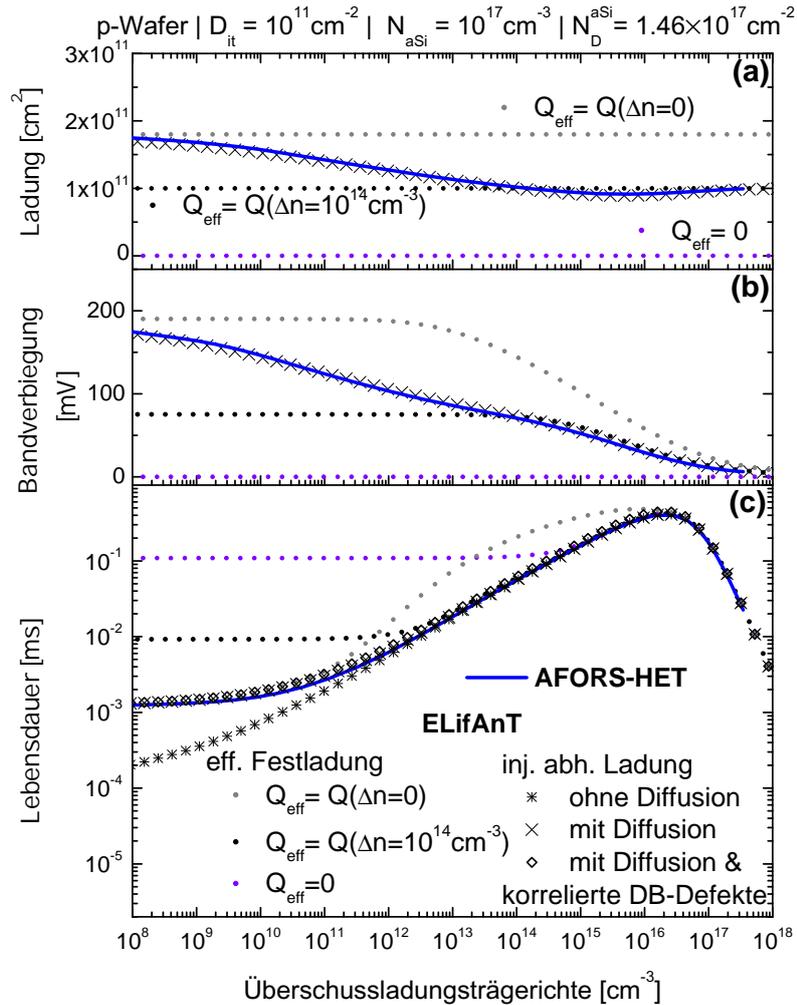


Abbildung 5.4.: Injektionsabhängige Ladung (a), Bandverbiegung (b) und Lebensdauer (c) berechnet mit effektiver Festladung nach Gl. (5.3) (Punkte) und mit injektionsabhängiger Ladung nach Gl. (5.4) (schwarze Kreuze) sowie mit AFORS-HET (blaue Linie). Weiterhin wird die effektive Lebensdauer einmal ohne Berücksichtigung der Diffusion mit Gl. (5.11) (schwarze Sterne) und mit Diffusion nach Gl. (5.15) (schwarze Kreuze) berechnet. Ebenfalls ist das Modell mit Gl. (5.1) zur Beschreibung von korrelierten DB-Defekten eingezeichnet (schwarze Raute). Für das Modell mit injektionsabhängiger Ladung und Diffusion ergibt sich eine Übereinstimmung mit AFORS-HET über den vollen Injektionsbereich. Wählt man eine effektive Festladung die der injektionsabhängiger Ladung bei $\Delta n = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ entspricht ergibt sich eine Übereinstimmung mit AFORS-HET für $\Delta n > 10^{13} \text{ cm}^{-3}$.

stark von der Defektdichte und energetischen Defektverteilung abhängen.

In Abb. 5.4(c) ist zu erkennen, dass auch die Lebensdauer stark von der korrekten Berechnung der Bandverbiegung abhängt. Dies liegt daran, dass die SRV von den lokalen Ladungsträgerdichten an der Grenzfläche abhängt, die sich nach Gl. (2.6) aus der Bandverbiegung ergeben. Auch für die Berechnung der Lebensdauer ergibt sich eine exzellente Übereinstimmung über den gesamten Injektionsbereich mit Fehlern

unter 10% zwischen dem semi-analytischen Modell mit injektionsabhängiger Berechnung der Ladung und numerischen Simulationen mit AFORS-HET.

Es ist möglich, auch mit dem einfacheren Modell mit effektiver Festladung die Lebensdauer korrekt im Messbereich der QSSPC/PCD Messungen ($\Delta n > 10^{13} \text{ cm}^{-3}$) zu berechnen. Dabei muss eine Ladung gewählt werden, die der Ladung in der a-Si:H-Schicht und Grenzfläche bei ca. $\Delta n = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ entspricht.

Weiterhin wird deutlich, dass für niedrige Ladungsträgerlebensdauern eine Berechnung unter Berücksichtigung der Diffusion nach Gl. (5.15) wichtig sein kann. Der physikalische Grund hierfür ist, dass sich bei hohen Rekombinationsraten die Ladungsträgerdiffusion zur Grenzfläche limitierend auswirken kann. Zum Vergleich ist auch die $\tau(\Delta n)$ -Kurve eingezeichnet, die sich bei Beschreibung der DB-Defekte als korrelierte amphotere Defekte ergibt. Für die hier gewählten Einfangquerschnitte ergibt sich kein Unterschied⁹.

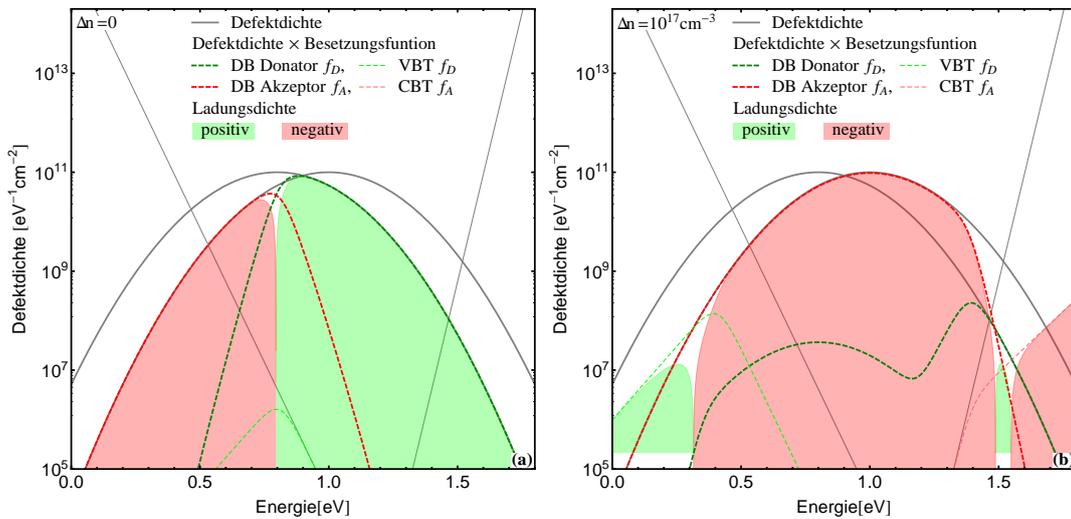


Abbildung 5.5.: Defektverteilung, projizierte Defektbesetzung und Ladungsdichte der amorphen Schicht im Dunkeln mit $\Delta n = 0$ (a) und bei starker Anregung, $\Delta n = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (b) berechnet mit ELifAnT. Im Dunkeln beträgt die integrierte Defektladung $Q_D^{\text{EQ}} = 8.49 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ und die Gesamtladung der a-Si:H-Schicht nach Gl. (5.8) $Q_{\text{aSi}}^{\text{EQ}} = -1.010 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Bei starker Anregung laden sich die Defekte um zu $Q_D = 2.52 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ und die Gesamtladung der a-Si:H-Schicht beträgt $Q_{\text{aSi}} = -1.608 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Die Ladungsänderung $\Delta Q_{\text{aSi}} = \Delta Q_D = 6.0 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ ist also durch die Änderung der Defektladung gegeben. Diese Ladungsänderung ist auch in Abb. 5.4 zu erkennen.

Es wurde gezeigt, dass es zu einer injektionsabhängigen Defektumladung kommen kann, die die Lebensdauer beeinflusst. Diese Umladung wird in Abb. 5.5 im Detail dargestellt. Es werden Defektdichten, Defektbesetzungsfunktionen und Ladungsdichte im Dunkeln bei $\Delta n = 0$ (Abb. 5.5(a)) und in Hochinjektion bei $\Delta n = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ gezeigt (Abb. 5.5(b)). Es wird deutlich, dass sich ein relevanter Anteil der DB-Defekte umlädt. Berechnet man die Umladung, so ergibt sich, dass die Änderung der Gesamtladung von $\Delta Q \approx 6.0 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ durch die Umladung der DB-Defekte gegeben ist. Im Anhang Abb. B.6 findet sich diese Rechnung auch für die amphoteren Defekte.

⁹Eine detaillierter Vergleich der beiden Statistiken findet sich in [24]. Siehe dazu auch die Diskussion in den Grundlagen Abschnitt 2.2.2.

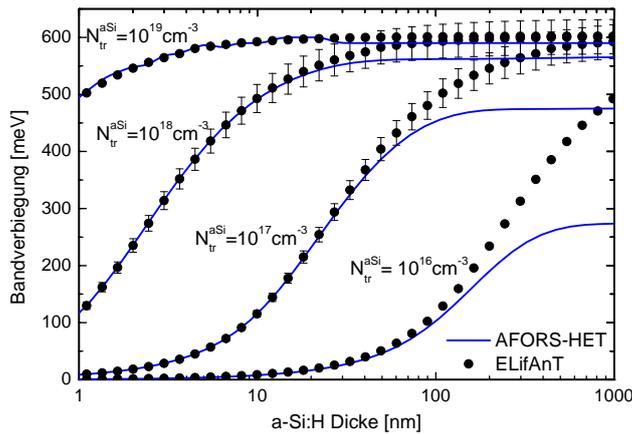


Abbildung 5.6: Dunkelbandverbiegung in Abhängigkeit der Schichtdicke bei Variation der a-Si:H-Defektdichte N_{tr}^{aSi} , berechnet mit dem semi-analytischen Modell (ELifAnT) und AFORS-HET. Die eingezeichneten Fehlerbalken geben einen 5%-Fehler an. Für die hier durchgeführte Rechnung wurde eine konstante Defektdichte von Akzeptoren in der a-Si:H-Schicht angenommen.

Es ergeben sich nur kleine Abweichungen zur SRH-Statistik, die keinen Einfluss auf die $\tau(\Delta n)$ -Kurve haben.

Die wesentliche Näherung für das Modell zur Berechnung der injektionsabhängigen Bandverbiegung besteht in den Annahmen, dass einerseits die Ferminiveaus in der a-Si:H-Schicht konstant sind und denen in der c-Si-Schicht entsprechen, und andererseits in der a-Si:H-Schicht keine Bandverbiegung auftritt. Unter diesen Bedingungen können die Defekte auf die Grenzfläche projiziert werden. Insbesondere für dicke a-Si:H-Schichten wird diese Näherung ihre Gültigkeit verlieren, was in Abb. 5.6 untersucht wird. Ein Vergleich mit AFORS-HET zeigt, dass die Näherung für Bauteilrelevante Strukturen mit einer a-Si:H-Schichtdicke bis 30 nm gute Ergebnisse mit Abweichungen unter 5% liefert und somit für die hier untersuchten Strukturen angewendet werden kann.

5.3.2. Einfluss des DRM-Effekts

Als zweites Beispiel soll eine Struktur mit einer starken Bandverbiegung diskutiert werden, bei der typischerweise neben der injektionsabhängigen Umladung der Defekte auch der DRM-Effekt einen starken Einfluss auf die Lebensdauer hat. In Abb. 5.7 sind Rechnungen für einen 260 μm n-Typ c-Si-Wafer mit einer Dotierung von $1.5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ und einer Dunkelbandverbiegung von ca. 530 meV dargestellt. Das semi-analytische Modell mit injektionsabhängiger Ladung, einerseits ohne Berücksichtigung des DRM-Effekts ($\Delta n_{av} = \Delta n$) (Punkte) und andererseits mit DRM-Effekt Gl. (5.4) (schwarze Kreuze) wird mit dem numerischen Simulator AFORS-HET (blaue Linie) verglichen. Im Injektionsbereich der QSSPC/PCD Messung, $\Delta n > 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, ergibt sich eine gute Übereinstimmung zwischen dem semi-analytischen Modell mit DRM-Effekt und AFORS-HET. Auch im Bereich $\Delta n < 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, in dem sich der DRM-Effekt stark bemerkbar macht, ergibt sich qualitativ eine gute Übereinstimmung. Der DRM-Effekt führt zu einem starken Anstieg der Lebensdauer in Niedriginjektion. Es ergibt sich eine Abweichung zwischen den Lebensdauern für Elektronen und Löcher. Es ist zu berücksichtigen, dass bei der Messung eine gemittelte Lebensdauer bestimmt wird, die in AFORS-HET über Gl. (5.25) berechnet wird. Durch die Variation der Raumladungszone kommt es zu einer künstlichen Erhöhung der lo-

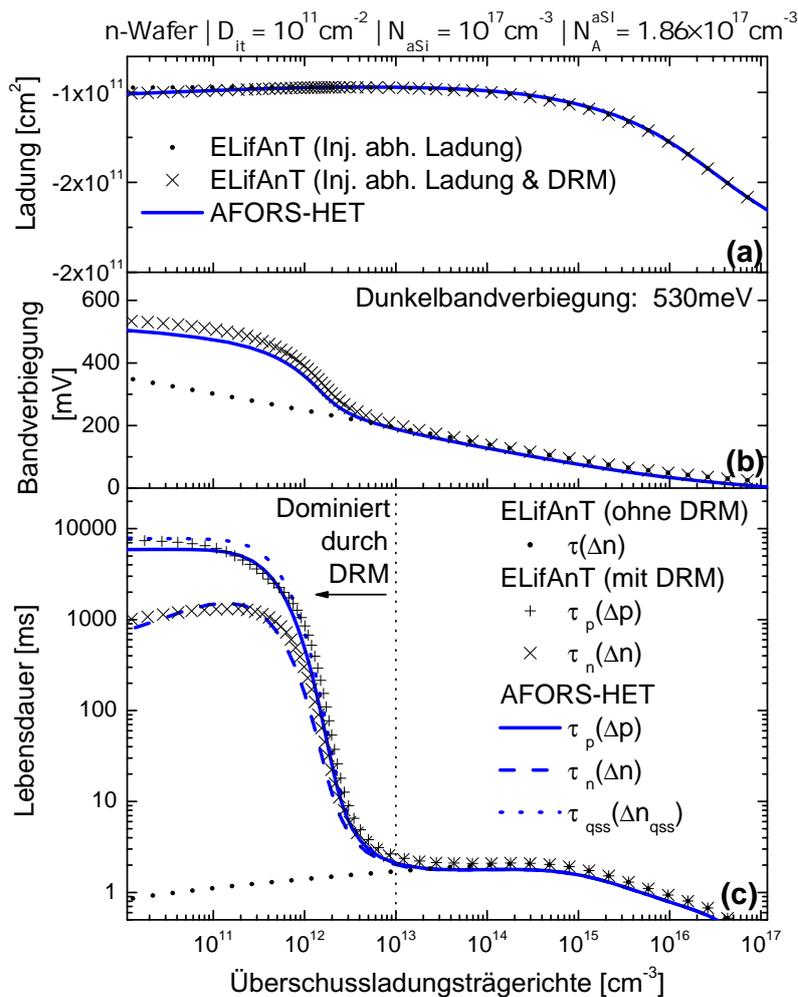


Abbildung 5.7.: Injektionsabhängige Ladung (a), Bandverbiegung (b) und Lebensdauer (c) berechnet mit injektionsabhängiger Ladung nach Gl. (5.4) ohne Berücksichtigung des DRM-Effekts ($\Delta n_{av} = \Delta n$) (Punkte) und mit DRM-Effekt Gl. (5.4) (schwarze Kreuze) im Vergleich zu numerischen Rechnungen mit AFORS-HET (blaue Linie). Es ergibt sich eine gute Übereinstimmung zwischen dem Modell mit Berücksichtigung des DRM-Effekts und AFORS-HET. Der DRM-Effekt führt zu einem starken Anstieg der Lebensdauer in Niedriginjektion.

kalen Überschussladungsträgerdichten, die in Niedriginjektion, $\Delta n < 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, die mittlere Überschussladungsträgerkonzentration in der Probe bestimmt, die mit der Photoleitfähigkeitsmethode gemessen wird. Der DRM-Effekt ist damit stark von der Änderung der Bandverbiegung abhängig und setzt somit ein detailliertes Modell für die injektionsabhängige Bandverbiegung voraus.

Es wurde also gezeigt, dass der DRM-Effekt in Niedriginjektion einen starken Einfluss auf die Lebensdauer haben kann. Die Ursache liegt in der Verteilung der Ladungsträger in der Probe. Um dies zu verdeutlichen ist in Abb. 5.8(a) das Verhältnis der mittleren Ladungsträgerdichte Δn_{av} , Δp_{av} zur Ladungsträgerdichte im Volumen Δn , Δp in Abhängigkeit von der mittleren Minoritätsladungsträgerkonzentration

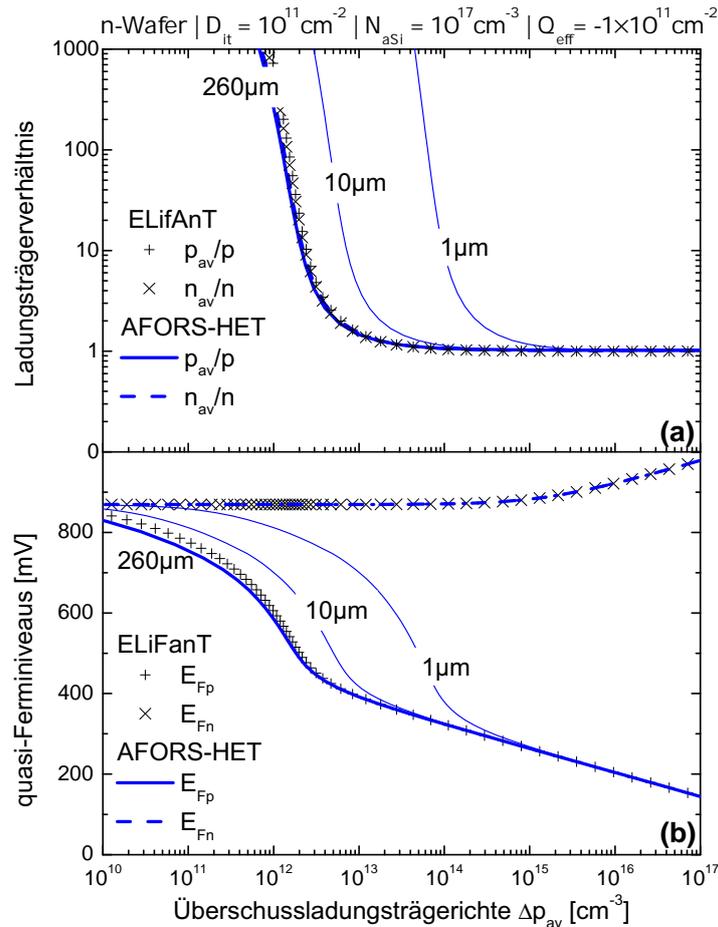


Abbildung 5.8.: Verhältnis der mittleren Ladungsträgerdichte Δn_{av} , Δp_{av} zur Ladungsträgerdichte im Volumen Δn , Δp in Fig. (a) und Aufspaltung der quasi-Fermiiveaus in Fig. (b) in Abhängigkeit der Minoritätsladungsträgerkonzentration Δp_{av} . Für die Struktur mit 260 μm dickem Wafer werden wiederum semi-analytische Rechnungen (ELiFAnT) mit AFORS-HET Rechnungen verglichen (entspricht Struktur aus Abb. 5.7). Es wird deutlich, dass die Ladungsträgerdichte für $\Delta p_{av} < 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ durch die Ladungsträger in der Raumladungszone bestimmt werden. In diesem Bereich kommt der DRM-Effekt zum Tragen, bestimmt die Lebensdauer (siehe Abb. 5.7(c)) und hebt den logarithmischen Zusammenhang zwischen Ladungsträgerdichte und impliziter Leerlaufspannung auf.

tration Δp_{av} dargestellt. Es wird deutlich, dass für niedrige Injektionsdichten die Überschussladungsträgerkonzentration und nach Gl. (2.60) damit auch die Lebensdauer im wesentlichen durch die Ladungsträger in der Raumladungszone bestimmt werden (vergleiche auch Abb. 2.2). In der hier diskutierten Struktur setzt der Effekt bei $\Delta n \approx 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ein. In Abb. 5.8 ist ebenfalls gezeigt, dass der DRM-Effekt bei dünneren Schichten schon bei höheren Injektionsdichten einsetzt. Dies liegt daran, dass der Volumenanteil Δn bei dünnen Absorberschichten einen geringeren Anteil ausmacht. In Abb. 5.8(b) ist darüber hinaus zu sehen, dass im Bereich des DRM-Effekts der logarithmische Zusammenhang zwischen V_{oc} und Δn_{av} nicht mehr gegeben ist. Es sei darauf hingewiesen, dass damit auch der Zusammenhang zwischen

Lebensdauer und impliziter Leerlaufspannung aus Gl. (2.63) nicht mehr gültig ist. Ganz im Gegenteil ergeben sich hier kleinere implizite Leerlaufspannungen bei höheren Lebensdauern.

5.3.3. Parameterstudie zur Modellvalidierung

Um den Gültigkeitsbereich der Modelle zu untersuchen, wurden für verschiedene Parameterkombinationen die injektionsabhängige Ladung, Bandverbiegung, Rekombinationsgeschwindigkeit und Lebensdauer als Funktion der mittleren Ladungsträgerdichte der Minoritäten berechnet. Verglichen werden das Modell mit der effektiven Festladung und das Modell mit der injektionsabhängigen Ladung mit und ohne DRM mit numerischen Simulationen (AFORS-HET). Der gewählte c-Si-Wafer und die a-Si:H-Parameter orientieren sich an experimentellen Ergebnissen, die in einem folgenden Kapitel präsentiert werden. Die Defektdichten an der Grenzfläche D_{it} und im a-Si:H-Volumen N_{aSi} werden einzeln variiert. Zusätzlich wird die Bandverbiegung variiert, indem verschiedene a-Si:H-Dotierungen bzw. effektive Festladungen eingestellt werden. In dem oben diskutierten Beispiel konnte festgestellt werden, dass sich die injektionsabhängige Bandverbiegung korrekt berechnen lässt, wenn man eine effektive Festladung wählt, die der a-Si:H- und Grenzflächenladung bei etwa 10^{14} cm^{-3} entspricht. Um dieses Ergebnis zu überprüfen, wird im Folgenden die a-Si:H-Dotierung immer so eingestellt, dass $Q(\Delta n = 10^{14}) = Q_{\text{eff}}$ erfüllt ist.

(n)a-Si:H/(p)c-Si-Struktur

Zunächst wird eine Struktur mit einem $260 \mu\text{m}$ n-Typ c-Si-Wafer mit einer Dotierung von $1.5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ($\cong 3 \Omega\text{cm}$) und a-Si:H- und Grenzflächendefektverteilungen wie in Abb. 5.2(a) für p-Typ a-Si:H-angenommen. Die a-Si:H-Defektdichte wird in drei Schritten variiert, $N_{aSi} = (10^{17}/10^{18}/10^{19}) \text{ cm}^{-3}$, ebenso die Grenzflächendefektdichte, $D_{it} = (10^{10}/10^{12}/10^{12}) \text{ cm}^{-2}$, und die effektive Festladung, $Q_{\text{eff}} = -(5/7, 5/10)10^{10} \text{ cm}^{-2}$. Die a-Si:H-Dotierung wurde so angepasst, dass $Q_{\text{eff}} = Q(\Delta n = 10^{14} \text{ cm}^{-3})$ gilt. Ein Teil der Studie ist in Abb. 5.9 zu sehen und die komplette Studie findet sich im Anhang Abb. B.3 und Abb. B.4.

Im Messbereich der QSSPC/PCD-Messung, $\Delta n = 10^{13} \dots 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, ergeben sich gute Übereinstimmungen zwischen den Modellen mit Abweichen zu AFORS-HET kleiner 10%. Nur für hohe a-Si:H-Defektdichten werden die Abweichungen größer. Bis zu 30% für das Modell mit injektionsabhängiger Ladung und $> 50\%$ für das Modell mit effektiver Festladung (siehe Abb. B.4(d)). Hier ist auch gut zu erkennen, dass aufgrund der hohen a-Si:H-Defektdichte eine starke Defektumladung stattfindet und sich somit bei Annahme einer effektiven Festladung eine falsche Bandverbiegung ergibt. Für Injektionsniveaus $< 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ muss bei starken Bandverbiegungen der DRM-Effekt berücksichtigt werden (siehe Abb. B.3(b)).

(p)a-Si:H/(n)c-Si-Struktur

Des weiteren wird eine Struktur mit einem $200 \mu\text{m}$ p-Typ c-Si-Wafer mit einer Dotierung von $1.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ($\cong 1 \Omega\text{cm}$) und a-Si:H- und Grenzflächendefektverteilungen wie in Abb. 5.2 für n-Typ a-Si:H. Wiederum wird die a-Si:H-Defektdichte, $N_{aSi} =$

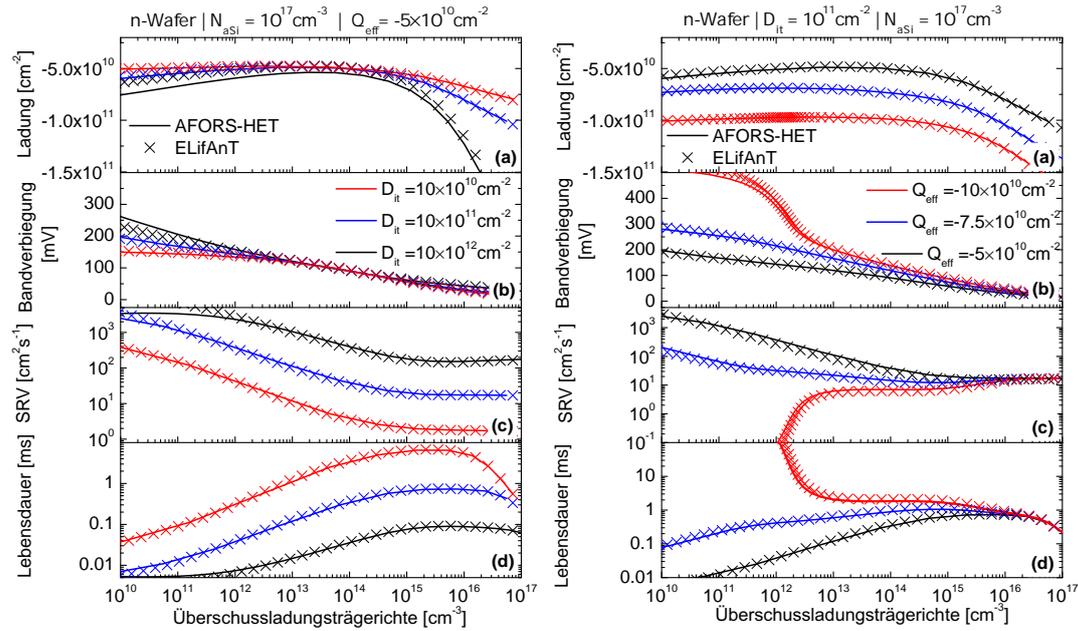


Abbildung 5.9.: Vergleich AFORS-HET und des ELifAnT Modells mit injektionsabhängiger Umladung und unter Berücksichtigung des DRM Effekts. Verglichen werden injektionsabhängige Ladung (a), Bandverbiegung (b), SRV (c) und effektive Lebensdauer (d). In der linken Spalte finden sich Rechnungen für verschiedene Grenzflächendefektdichten und in der rechten Spalte wird die Festladung bei $\Delta n = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ variiert. Dabei wurde die a-Si:H-Dotierung so angepasst, dass $Q_{\text{eff}} = Q(\Delta n = 10^{14} \text{ cm}^{-3})$ gilt. Die Defektdichte der DB-Defekte im a-Si:H Volumen ist für alle Rechnungen zu $n = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ angenommen. Es ergibt sich eine gute Übereinstimmung zwischen den Modellen und es wird deutlich, dass das ELifAnT Modell den charakteristischen Einfluss von Bandverbiegung und Defektdichte auf die Lebensdauer gut reproduzieren kann.

$(10^{17}/10^{18}/10^{19}) \text{ cm}^{-3}$, die Grenzflächendefektdichte, $D_{\text{it}} = (10^{10}/10^{12}/10^{12}) \text{ cm}^{-2}$, und die effektive Festladung, $Q_{\text{eff}} = (1/2/3) \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ variiert (siehe Abb. B.3, Abb. B.4 und Abb. B.5). Im Vergleich zu der ersten Struktur liegt hier also eine abweichende Waferdicke und -dotierung vor, sowie eine a-Si:H-Defektverteilung, die weiter in der Bandmitte liegt.¹⁰ Auch die Bandoffsets der Minoritäten bzw. Majoritäten haben gewechselt und können zu Abweichungen zwischen den beiden Strukturen führen.

Im Messbereich der QSSPC/PCD-Messung $\Delta n = 10^{13} \dots 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ergeben sich gute Übereinstimmungen zwischen den Modellen mit injektionsabhängiger Ladung und effektiver Festladung (Abweichung $< 10\%$) und Abweichen zu AFORS-HET kleiner als 30%. Die gute Übereinstimmung zwischen dem Modell mit der effektiven Festladung und dem Modell mit der injektionsabhängigen Ladung, kann mit der Defektlage begründet werden, die bei dieser Struktur im Bereich $\Delta n = 10^{13} \dots 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ nur zu vergleichsweise kleinen Umladungen führt, während bei der Struktur auf n-Typ Wafern typischerweise bereits bei $\Delta n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ eine starke Umladung ein-

¹⁰Die Lage der Defektverteilung wird festgelegt, um die Modelle für exemplarische Strukturen zu vergleichen. Eine Berechnung in Abhängigkeit der Verteilung von der a-Si:H-Dotierung mit dem Defekt-Pool-Modell geht hier nicht ein.

setzt. Der DRM-Effekt kann hier bereits bei Injektionsdichten unterhalb von $\Delta n \approx 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ einsetzen (siehe Abb. B.3(c), Abb. B.5(b)). Der DRM-Effekt kann im Rahmen des Modells nur qualitativ korrekt beschrieben werden. Eventuell könnten hier Gleichgewichts-Trapping Effekte für die Abweichung zwischen AFORS-HET und dem semi-analytischen Modell verantwortlich sein. Für niedrigere Injektionsdichten, $\Delta n < 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, zeigt das Modell mit der Festladung stärker Abweichungen zu AFORS-HET. Sowohl Bandverbiegung als auch Lebensdauer können nicht mehr korrekt berechnet werden, da in diesem Injektionsbereich eine Defektumladung stattfindet (siehe Abb. B.3(b), Abb. B.4(c), Abb. B.5(a)). In diesem Bereich ist die Berechnung der injektionsabhängigen Ladung somit entscheidend.

Die verbleibenden Abweichungen zwischen dem semi-analytischen Modell mit injektionsabhängiger Ladung (und DRM) und der numerischen Simulation mit AFORS-HET könnten darin begründet sein, dass in der amorphen Schicht flache Bänder angenommen werden. Dies könnte insbesondere bei geringer Defektdichte und geringer Dotierung zu Abweichungen führen, da die Bandverbiegung dann auch zum Teil in der amorphen Schicht abfällt. Weiterhin kann eine Abweichung auftreten, wenn die quasi-Ferminiveaus im a-Si:H nicht konstant sind, was bei besonders hohen Defektdichten unter Beleuchtung auftreten kann. Es wäre weiterhin denkbar, dass durch die einseitige Beleuchtung mit hoher Intensität ein inhomogenes Ladungsträgerprofil entsteht, und so die Berechnung der Lebensdauer mit dem semi-analytischen Modell verfälscht wird. Dies spielt allerdings offensichtlich eine untergeordnete Rolle, da die Modellrechnungen und AFORS-HET im Bereich hoher Injektionsdichten übereinstimmen. Bei niedrigen Injektionsdichten, könnten Abweichungen durch Gleichgewichts-Trappingeffekte hervorgerufen werden (siehe Abschnitt 5.1.2). Weiterhin soll hier noch einmal betont werden, dass hier weder mit dem semi-analytischen Modell noch mit AFORS-HET transiente Effekte berücksichtigt wurden.

Eine Vergleich der $\tau(\Delta n)$ -Kurven in Abb. 5.9 zeigt, dass die Kurvenform charakteristisch für bestimmte Strukturtypen ist. So hat die Bandverbiegung insbesondere einen Einfluss auf die $\tau(\Delta n)$ -Kurve in Niedriginjektion, während die Defektdichte die gesamte Kurve beeinflusst. Dies wird im Detail im nächsten Abschnitt diskutiert.

5.4. Simulationsstudie zur Untersuchung der Anwendbarkeit der CA-PCD Methode

Wie in den experimentellen Grundlagen diskutiert wurde, ist die injektionsabhängige Lebensdauer ($\tau(\Delta n)$ -Kurve) eine experimentell gut zugängliche Größe. Mit ELifAnT stehen nun Modelle bereit, die es ermöglichen, diese $\tau(\Delta n)$ -Kurve entweder unter Annahme einer effektiven Festladung als Funktion dieser Festladung und der Grenzflächendichte $\tau(\Delta n, Q_{\text{eff}}, D_{\text{it}})$ zu analysieren oder in dem weiterentwickelten Modell unter Beachtung der injektionsabhängigen Umladung und des Defekt-Pool-Modells als Funktion des Ferminiveaus bei der Glastemperatur¹¹ und der Grenzflächendefektdichte $\tau(\Delta n, E_{\text{F}^*}^{\text{aSi}}, D_{\text{it}})$. Diese im Folgenden als CA-PCD (Computergestützte PCD, computer aided PCD) bezeichnete Methode ermöglicht also die Rückführung der

¹¹Eine Umrechnung auf das Ferminiveau bei Raumtemperatur ist im Rahmen des Modells auch möglich, erfordert allerdings einen weiteren numerischen Rechenschritt.

Messgröße auf die entscheidenden Materialparameter, die bei der Solarzellenprozessierung optimiert werden müssen. Zur Anpassung der experimentellen $\tau(\Delta n)$ -Kurve wird der quadratische Fehler $(\tau_{model}(\Delta n_i) - \tau_{exp}(\Delta n_i))^2$ zwischen berechneten Punkten und einer Auswahl von Punkten auf der geglätteten experimentellen $\tau(\Delta n)$ -Kurve minimiert. Da hier ein nichtlineares und nicht differenzierbares Problem vorliegt und es entscheidend ist, ein globales Minimum zu finden, wird dafür ein evolutionärer Algorithmus¹² eingesetzt. Eine derartige Datenauswertung ist mit AFORS-HET aufgrund der hohen Rechenzeit nicht praktikabel. Desweiteren gehen die in ELifAnT implementierten Gleichungen teilweise über die Möglichkeiten von AFORS-HET hinaus, da Ladungszustand und Rekombinationsraten der DB-Defekte mit den Gleichungen für korrelierte amphotere Defekte beschrieben werden können, und eine Berechnung der Defektdichte mit dem Defekt-Pool-Modell durchgeführt werden kann. Bevor die CA-PCD Methode in Kapitel 6 zur Auswertung von Lebensdauermessungen eingesetzt wird, soll hier zunächst der Einfluss dieser Parameter auf die $\tau(\Delta n)$ -Kurve untersucht werden. In den folgenden Studien werden die Rekombinationsraten nach den besten in der Literatur zur Verfügung stehenden Modellen berechnet, d.h die DB-Defekte werden als korrelierte amphotere Defekte beschrieben Gl. (5.1) und die Augerrekombination wird nach dem Modell von Kerr und Cuevas berechnet Gl. (2.29)¹³.

5.4.1. Annahme einer effektiver Festladung

In einem ersten Schritt soll dazu eine Studie mit dem einfachen Modell $\tau(\Delta n, Q_{eff}, D_{it})$ mit effektiver Festladung durchgeführt werden. In Abb. 5.10 ist die berechnete Ladungsträgerlebensdauer symmetrischer a-Si:H/c-Si -Emitterstrukturen in Abhängigkeit von der effektiven Festladung für c-Si(n)-Wafer mit a-Si:H(p)-Emitterschicht und einen c-Si(p)-Wafer mit a-Si:H(n)-Emitterschicht gezeigt. Die Modellrechnungen in Abb. 5.10(b) und (d) zeigen, dass die Absenkung der Defektdichte D_{it} bei konstanter effektiver Festladung im gesamten Injektionsbereich zu einer Anhebung der Lebensdauer führt, so dass sich im wesentlichen eine Parallelverschiebung der $\tau(\Delta n)$ -Kurve ergibt. Der Bereich der $\tau(\Delta n)$ -Kurve für hohe Injektionsdichten ist in dieser 3D-Darstellung nicht gut zu erkennen, wird aber im Wesentlichen durch die Augerrekombination bestimmt. Die Erhöhung der Lebensdauer durch Absenkung der Defektdichte wird im Folgenden als **Defektpassivierung** bezeichnet. In Abb. 5.10(a) und (d) ist der Einfluss der Festladung auf die Lebensdauer gezeigt. Die Erhöhung des Betrages der Festladung $|Q_{eff}|$ führt typischerweise zu einer stärkeren Erhöhung der Lebensdauer je niedriger die Injektionsdichte ist, so dass sich die Form der $\tau(\Delta n)$ -Kurve ändert. Die Erhöhung der Lebensdauer erfolgt hier durch eine **Feldefektpassivierung**. Dabei wird die Grenzflächenrekombination reduziert, wenn die Bandverbiegung entsprechend Gl. (2.6) eine Absenkung der Konzentration eines Ladungsträgertyps hervorruft. Da die Bandverbiegung mit der Überschussladungsträgerkonzentration abnimmt, wird auch der Einfluss der Feldefektpassivierung mit

¹²Mathematica 7.0 von Wolfram Research, Funktion: NMinimize, Methode: DifferentialEvolution

¹³In dem vorherigen Kapitel wurde die Rekombination, wenn nicht explizit anders erwähnt, mit den SRH-Gleichungen und dem einfachen Lehrbuch-Augermodell berechnet, um einen Vergleich zu AFORS-HET zu ermöglichen.

der Injektionsdichte kleiner. Im Detail müssen drei Regionen unterschieden werden, die exemplarisch in Abb. 5.10(a) eingezeichnet sind. In Region A ist die Lebensdauer durch die Augerrekombination limitiert und eine Variation der Festladung hat keinen Einfluss mehr. In Region B führt die Feldeffektpassivierung, wie diskutiert, zu einer Erhöhung der effektiven Lebensdauer insbesondere im Bereich niedriger Injektionsdichten. In Region C durchläuft die Lebensdauer ein Minimum, bevor es wieder zu einer Erhöhung kommt, da nun die Konzentration des jeweils andern Ladungsträgers abgesenkt wird. Dieser typische Einfluss von Defekt- und Feldeffektpassivierung findet sich auch in einer umfangreicheren Parameterstudie wieder (siehe Abb. B.7 für n-Wafer und Abb. B.8 für p-Wafer). Durch den charakteristischen Unterschied im Einfluss der Defekt- und Feldeffektpassivierung auf die $\tau(\Delta n)$ -Kurve ergibt sich mit der CA-PCD-Methode die Möglichkeit, experimentelle $\tau(\Delta n)$ -Kurven zu analysieren und den Einfluss der beiden Passivierungsmechanismen zu trennen.

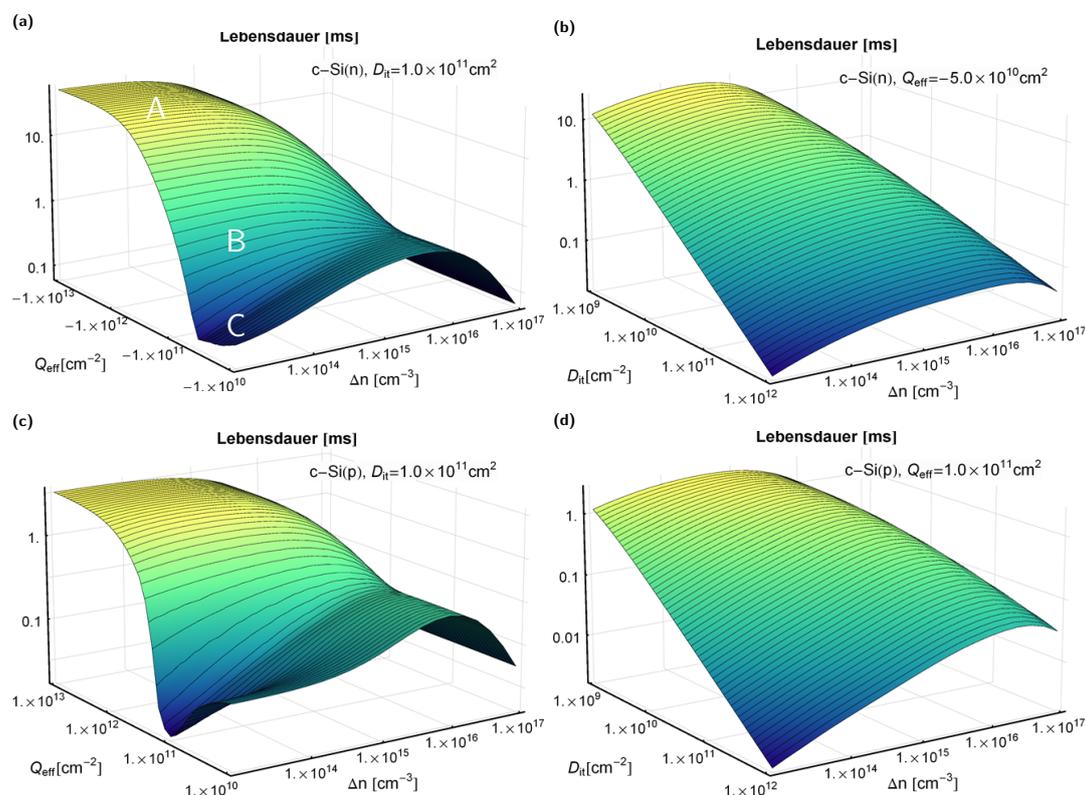


Abbildung 5.10.: Injektionsabhängige effektive Ladungsträgerlebensdauer in Abhängigkeit von der effektiven Festladung (Abb. (a) und (c)) und der Grenzflächendefektdichte (Abb. (b) und (d)). Es handelt sich hier um symmetrische a-Si:H/c-Si -Emitterstrukturen bestehend aus 3Ωcm c-Si(n)-Wafer mit a-Si:H(p)-Emitterschicht (Abb. (a) und (b)) und einen 1Ωcm c-Si(p)-Wafer mit a-Si:H(n)-Emitterschicht (Abb. (c) und (d)). Für die amorphe Schicht wurde eine Defektverteilung wie in Abb. 5.2(a) mit einer maximalen DB-Defektdichte von $N_{\text{aSi}} = 10^{17}$ cm⁻³ angenommen. Für die Grenzflächendefektverteilung wurde wie in Abb. 5.2(a) eine Gaußverteilung in der Bandmitte angenommen.

Das Modell mit effektiver Festladung hat den großen Vorteil, dass es numerisch nicht sehr anspruchsvoll ist und so eine schnelle Datenauswertung ermöglicht. Weiterhin ist von Vorteil, dass so die Parameter für die a-Si:H-Schicht in nur einem effektiven

Parameter Q_{eff} zusammengefasst werden. Da in der Studie zum Modellvergleich in Abschnitt 5.3.3 gezeigt wurde, dass es zumindest im Messbereich der QSSPC/PCD-Messung ($\Delta n = 10^{13} \dots 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) unter der Annahme $Q_{\text{eff}} = Q(\Delta n = 10^{14} \text{ cm}^{-3})$ die Trends gut reproduziert, ist es geeignet, eine einfache und schnelle, den Solarzellen-Optimierungsprozess begleitende CA-PCD-Analyse durchzuführen. Allerdings ist die Annahme einer Festladung im Allg. nicht korrekt, da sich die Defekte umladen, wie in Abschnitt 5.3 gezeigt wurde. Wie anhand Abb. 5.10 diskutiert wurde, ist der passivierende Einfluss der effektiven Ladung im Bereich niedriger Injektionsdichten am stärksten. Somit ist zu erwarten, dass auch bei der CA-PCD Analyse eine Festladung bestimmt wird, die der Ladung bei ca. $\Delta n = 10^{13} \dots 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ entspricht. Diese etwas unpräzise Interpretation kann nur konkretisiert werden, wenn man zum erweiterten Modell mit Berechnung der injektionsabhängigen Ladung übergeht.

5.4.2. Berücksichtigung der injektionsabhängigen Ladung

Im Modell mit injektionsabhängiger Ladung wird die Feldeffektpassivierung durch die a-Si:H-Dotierung und die Ladung in den Defekten in Abhängigkeit vom Fermi-niveau bestimmt. Aufgrund der Abhängigkeit der a-Si:H-Defektverteilung vom Fermi-niveau ist dieser Ansatz nur sinnvoll, wenn er mit dem Defekt-Pool-Modell gekoppelt wird. So reduziert sich die Vielzahl der die Feldeffektpassivierung beschreibenden Parameter auf das a-Si:H-Fermi-niveau bei der Glastemperatur $\tau(\Delta n, E_{\text{F}}^{\text{aSi}}, D_{\text{it}})$. Dieser Ansatz ermöglicht prinzipiell den Einsatz des Modells zur CA-PCD-Analyse bzw. seine Nutzung für intensive Parameterstudien zur Passivierungsqualität. Der Rechenaufwand für einen Punkt der $\tau(\Delta n)$ -Kurve steigt allerdings ca. um den Faktor 20 und diese Zeit wird potenziert durch das Optimierungsproblem bei der Anpassung des Modells an experimentelle Daten. Aufgrund des erhöhten Zeitaufwands wurde dieses Modell bis jetzt noch nicht systematisch zur CA-PCD-Analyse eingesetzt. Es soll allerdings im Folgenden untersucht werden, ob die typische Charakteristik der $\tau(\Delta n)$ -Kurve in Abhängigkeit von Defekt- und Feldeffektpassivierung, wie sie sich aus dem einfachen Modell mit effektiver Festladung ergibt, durch dieses weiterentwickelte Modell bestätigt werden kann.

In Abb. 5.11 ist die injektionsabhängige effektive Ladungsträgerlebensdauer in Abhängigkeit vom a-Si:H-Fermi-niveau und der Grenzflächendefektdichte für eine symmetrische a-Si:H/c-Si -Struktur mit c-Si(p)-Wafer gezeigt. In Abb. 5.11(a) zeigt sich wiederum der charakteristische Einfluss der Feldeffektpassivierung, der auch im Modell mit effektiver Festladung (Abb. 5.10) beobachtet wurde. Verschiebt sich das Fermi-niveau in Richtung einer Bandkante, so erhöht sich die Bandverbiegung und dies führt typischerweise zu einer stärkeren Erhöhung der Lebensdauer, je niedriger die Injektionsdichte ist, so dass sich die Form der $\tau(\Delta n)$ -Kurve ändert. Die Abbildung zeigt, dass sowohl für a-Si(n)-Schichten mit $E_{\text{F}}^{\text{aSi}} > 0.9 \text{ eV}$ ¹⁴, die auf c-Si(p)-als Emitterschichten eingesetzt werden als auch für a-Si(n)-Schichten mit $E_{\text{F}}^{\text{aSi}} < 0.9 \text{ eV}$ die als BSF-Schichten fungieren, eine Feldeffektpassivierung stattfindet. An dieser Stelle sei noch einmal betont, dass bei der Variation des Fermi-niveaus die Defektdichte mit dem Defekt-Pool neu berechnet (vergleiche Abb. 5.12 (a) und (b)) wird, und bei Varia-

¹⁴Hier wird die a-Si:H-Valenzbandkante als Energie-Nullpunkt gewählt.

tion der Injektionsdichte die Defektladung neu berechnet (vergleiche Abb. 5.12(c) und (d)). Die Berechnung der effektiven Lebensdauer in Abhängigkeit der Grenzflächendefektdichte, die in Abb. 5.11(b) zu sehen ist, zeigt das gleiche Verhalten wie im Modell mit der effektiven Festladung. Eine umfangreiche Parameterstudie für diesen Ansatz findet sich im Anhang (Lebensdauer: Abb. B.9, Defektverteilung: Abb. B.11 und Defektladung Abb. B.12).

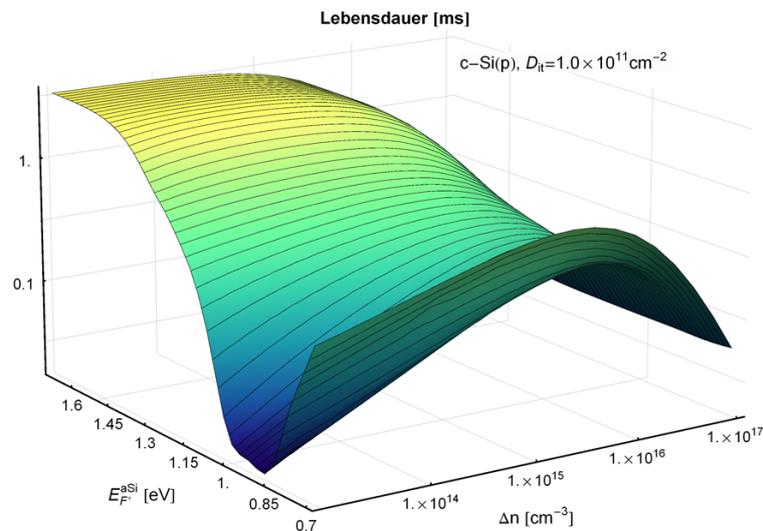
Eine weitere Modifikation des Modells wurde durch Untersuchungen der Passivierungsqualität von a-Si:H-Schichten von T. Schulze motiviert [45]. Seine Untersuchungen zeigen, dass die initiale a-Si:H/c-Si-Grenzflächendefektdichte zwar stark von den Depositionsbedingungen abhängt, dass jedoch durch Heizprozesse eine Defektequilibration an der Grenzfläche erreicht werden kann, so dass die finale Grenzflächenqualität einen Wert annimmt, der mit der Urbachenergie des Valenzbandausläufers (VBT) im a-Si:H-Volumen korreliert [45]. Die VBT-Urbachenergie ist zusammen mit dem a-Si:H-Ferminiveau der entscheidende Parameter, der im Rahmen des Defekt-Pool-Modells die Defektverteilung und -dichte in der a-Si:H-Schicht bestimmt. T. Schulze stellte folglich die Hypothese auf, dass sich die Grenzflächendefektdichte durch Projektion der a-Si:H-Volumendefekte berechnen lässt¹⁵. Als Kopplungsprozess kommt hier ein Tunnelprozess in Frage, wobei T. Schulze mit einem einfachen Ansatz eine Tunnellänge von $1.3 \times 10^{-7} \text{ cm}^{-3}$ bestimmt. Obwohl die Details hier noch nicht geklärt sind, und insbesondere der Tunnelprozess theoretisch und experimentell noch genauer untersucht werden muss, soll im Rahmen dieser Arbeit schon einmal diskutiert werden, welchen Einfluss eine solche Projektion der a-Si:H-Defektdichte auf die Ladungsträgerlebensdauer hat. In Abb. 5.13 ist die Ladungsträgerlebensdauer in Abhängigkeit vom a-Si:H-Ferminiveau und dem Projektionsfaktor f für einen symmetrisch passivierten c-Si(p)-Wafer gezeigt. Die Grenzflächendefektdichte und -Verteilung ergibt sich aus der Projektion der a-Si:H-Defektdichte im Volumen nach $D_{it}(E) = N_{aSi}(E) \times f \times 10^{-7} \text{ cm}$ und ist somit ebenfalls vom Ferminiveau bei der Glasktemperatur abhängig (siehe Abb. 5.2(b)). Durch das Zusammenspiel von Variation der Defektdichte, Defektlage und Bandverbiegung ergibt sich hier ein wesentlich komplexeres Verhalten der $\tau(\Delta n)$ -Kurve in Abhängigkeit von der Lage des Ferminiveaus als für die bisher diskutierten Modelle. Gilt die Projektions-Hypothese, dann müssen alle $\tau(\Delta n)$ -Kurve derselben a-Si:H-Qualität bzw. mit demselben VBT-Urbachenergie auf dieser Fläche liegen, solange der korrekte Kopplungsfaktor bestimmt werden kann. Eine umfangreiche Parameterstudie für diesen Ansatz findet sich im Anhang, Abb. B.10. Im Rahmen dieser Arbeit wird die Projektions-Hypothese nicht weiter untersucht, es sollte hier nur gezeigt werden, dass ein Modell bereitgestellt wurde, um zukünftige Untersuchungen zu diesem Thema zu ermöglichen.

5.5. Zusammenhang zwischen Grenzflächenpassivierung und Leerlaufspannung

Im vorhergehenden Abschnitt wurde beschrieben, wie mit Hilfe der CA-PCD-Methode der Einfluss von Defekt- und Feldefektpassivierung von symmetrischen a-Si:H/c-Si

¹⁵Auch in anderen Publikationen zu diesem Thema wird der Ansatz der Projektion diskutiert [123])

(a)



(b)

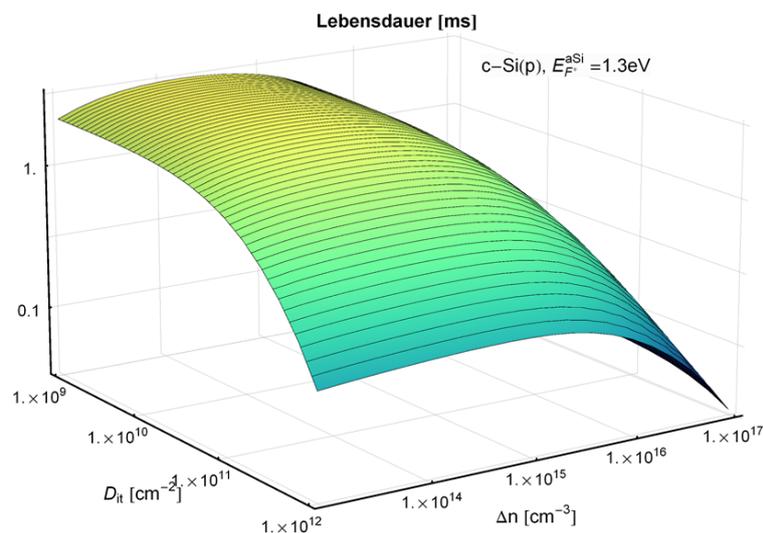


Abbildung 5.11.: Injektionsabhängige effektive Ladungsträgerlebensdauer $\tau(\Delta n)$ -Kurve in Abhängigkeit vom a-Si:H-Ferminiveau (Abb. (a)) und der Grenzflächendefektdichte (Abb. (b)) für einen $1\Omega\text{cm}$ c-Si(p) Wafer. Die a-Si:H-Defektverteilung ist in Abhängigkeit des Ferminiveaus bei der Glastemperatur berechnet (Vergleiche Abb. 5.12 (a) und (b)). Die injektionsabhängige Ladung wurde unter Beachtung korrelierter amphoterer DB-Defekte und mit SRH-Defekten in den Bandausläufern berechnet (Vergleiche Abb. 5.12 (c) und (d)). Die Grenzflächendefektverteilung wird als Gaußverteilung in der Bandmitte angenommen (Abb. 5.2(a)). Eine umfangreiche Parameterstudie für diesen Ansatz findet sich im Anhang Abb. B.9.

-Strukturen getrennt werden kann. In diesem Abschnitt soll der Bogen von den Passivierungsmechanismen zur impliziten Leerlaufspannung geschlagen werden.

Es hat sich bei der Charakterisierung von a-Si:H/c-Si-Solarzellen durchgesetzt, $\tau(\Delta n)$ -Kurven bei einem festen Injektionsniveau zu vergleichen. Der Einfluss der

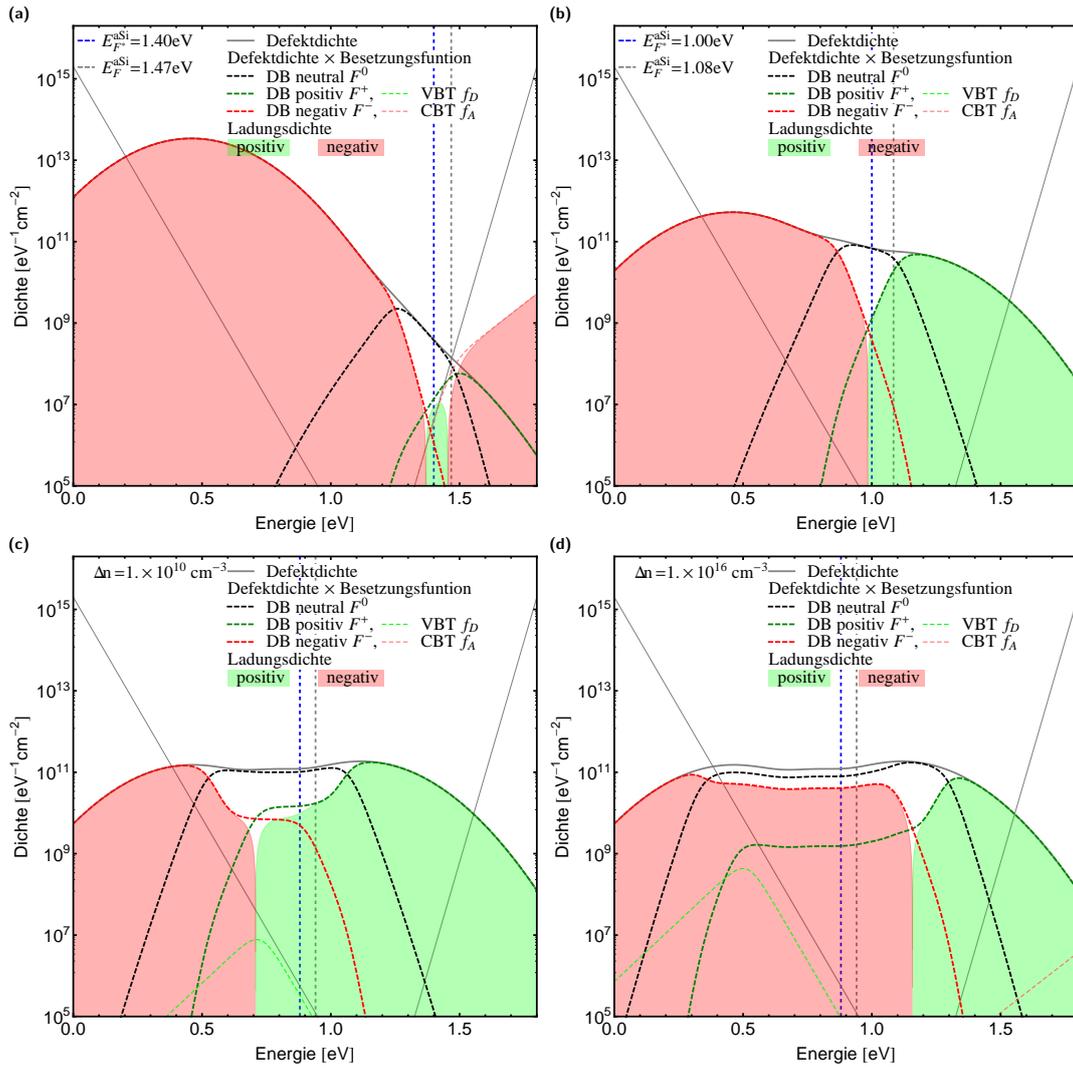
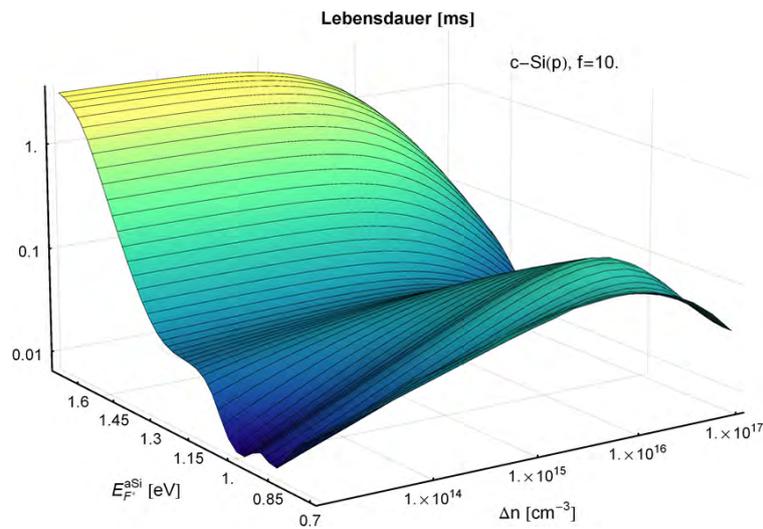


Abbildung 5.12.: Defektdichte, Defektbesetzung und Defektladung in Abhängigkeit von der Lage des a-Si:H-Ferminiveaus bei der Glastemperatur $E_{F^*}^{aSi}$ (blau gestrichelt) ohne Beleuchtung Abb. (a) und (b). Die Defektdichte und -Verteilung ist mit dem Defekt-Pool-Modell berechnet (Defekt-Pool Parameter siehe Abschnitt 3.1.2 oder [59], VBT Urbachenergie $E_{VBT} = 0.04\text{eV}$). Das Ferminiveau bei Raumtemperatur E_F^{aSi} (grau gestrichelt) ergibt sich durch Lösung des Modells für die Bandverbiegung Gl. (5.4) bei $T = 300\text{K}$. Bei dieser Rechnung wurde exemplarisch ein $3\Omega\text{cm-c-Si(n)}$ -Wafer angenommen. Abb. (c) und (d) zeigen die Defektbesetzung und Defektladung in Abhängigkeit vom Injektionsniveau Δn exemplarisch für eine a-Si:H(i) Schicht ($E_F^{aSi} = 0.9$). Eine umfangreiche Parameterstudie für die Defektdichte und Defektbesetzung findet sich im Abb. B.11 und Abb. B.12.

Passivierungsmechanismen auf die Lebensdauer beim typischerweise verwendeten Injektionsniveau von $\Delta n = 10^{15}\text{cm}^{-3}$ ist in Abb. 5.14 für einen $3\Omega\text{cm c-Si(n)}$ -Wafer dargestellt und in Abb. 5.15 für einen $1\Omega\text{cm c-Si(p)}$ -Wafer. In Abb. 5.14(a) ist die Lebensdauer gezeigt, die sich bei Annahme einer effektiven Festladung ergibt τ ($\Delta n = 10^{15}\text{cm}^{-3}$, Q_{eff} , D_{it}).

Es wird deutlich, dass es zwei Strategien zur Erhöhung der Lebensdauer gibt. Zum einen kann durch Prozessoptimierung die Grenzflächendefektdichte abgesenkt

(a)



(b)

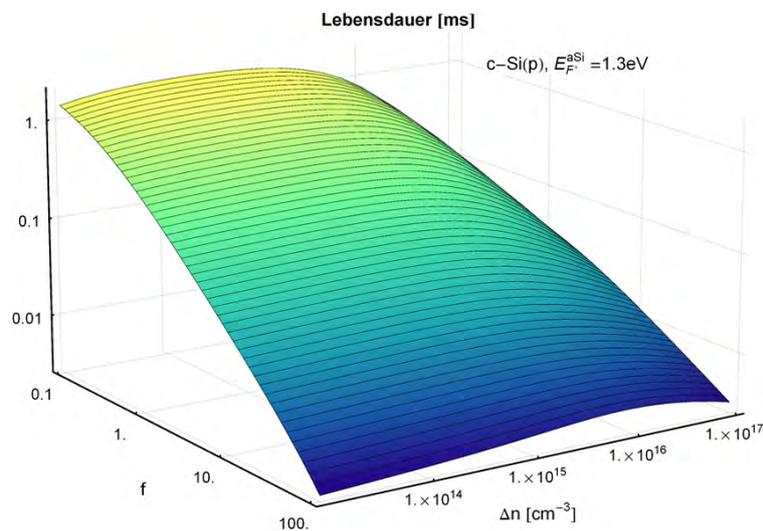
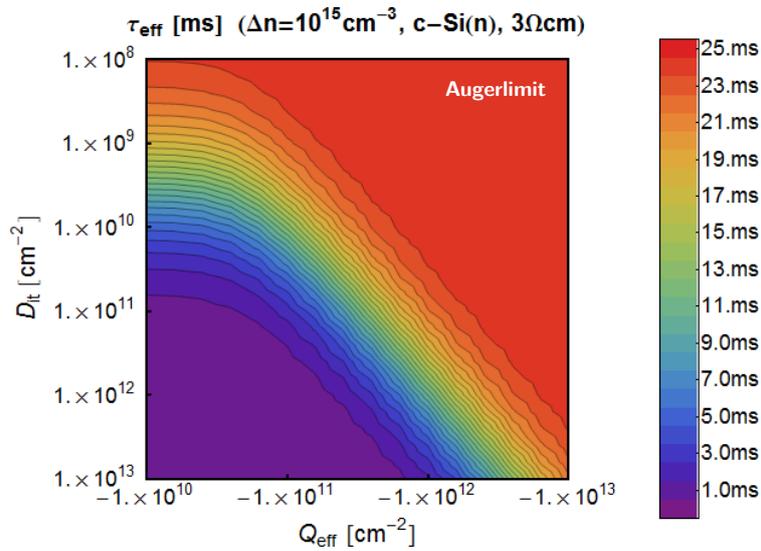


Abbildung 5.13.: Ladungsträgerlebensdauer in Abhängigkeit des a-Si:H-Ferminiveaus (a) und dem Projektionsfaktor f (b) für einen $1\Omega\text{cm}$ c-Si(p) Wafer. Die a-Si:H-Defektverteilung in Abhängigkeit vom Ferminiveau und die inj. abhängige Ladung wurde unter Beachtung korrelierter amphoterer DB-Defekte und von SRH-Defekten in den Bandausläufern berechnet (Vergleiche Abb. 5.12). Die Grenzflächendefektdichte und -Verteilung ergibt sich aus der Projektion der a-Si:H-Defektdichte im Volumen nach $D_{it} = N_{aSi} \times f \times 10^{-7} \text{cm}$ und ist somit ebenfalls vom Ferminiveau bei der Glastemperatur abhängig (Vergleiche Abb. 5.2(b)). Eine umfangreiche Parameterstudie für diesen Ansatz findet sich im Anhang Abb. B.10.

werden, zum anderen kann durch geeignetes Design der a-Si:H-Schichten die effektive Festladung $|Q_{\text{eff}}|$ und damit die Bandverbiegung unter Beleuchtung erhöht werden. Wie ausführlich diskutiert wurde, kann diese nicht nur durch die a-Si:H-Dotierung, sondern auch durch die Defektlage und -Dichte und die Bandoffsets be-

(a)



(b)

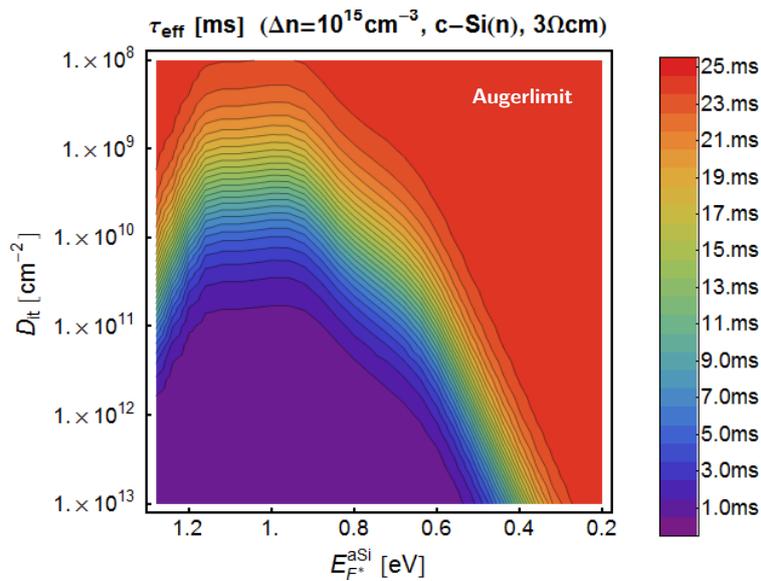


Abbildung 5.14.: Passivierung der Grenzfläche in Abhängigkeit von der Defektdichte D_{it} und der effektiven Festladung Q_{eff} (Abb. (a)) bzw. des a-Si:H-Ferminiveaus bei der Glastemperatur $E_{F^*}^{\text{aSi}}$ (Abb. (b)) für eine symmetrische a-Si:H(p)/c-Si(n) Struktur ($3\Omega\text{cm}$ Wafer). Die Achsenskalierung ist so gewählt, dass sie in Richtung steigender Passivierung zeigen, d. h. D_{it} nimmt ab und der Betrag der Festladung $|Q_{\text{eff}}|$ nimmt zu (Abb.(a)) bzw. das a-Si:H-Ferminiveau verschiebt sich näher an die Valenzbandkante (Abb.(b)). Die a-Si:H-Valenzbandkante ist als Energie-Nullpunkt definiert. An der Grenzfläche wird die Rekombination über gaußverteilte DB-Defekte berechnet (Verteilung wie in Abb. 5.2 (a)). Für das Modell mit injektionsabhängiger Ladung in Abb. (a) wurden die a-Si:H-Defektverteilungen mit dem Defekt-Pool-Modell berechnet und an der Grenzfläche wurde dieselbe Defektverteilung wie in Abb. (a) angenommen.

einflusst werden. Ein direkter Zusammenhang zwischen Dunkelbandverbiegung und Q_{eff} ist aufgrund der injektionsabhängigen Defektumladung nicht trivial. Um diesen Zusammenhang herzustellen, muss das erweiterte Modell mit injektionsabhängiger Ladung und Defekt-Pool-Modell $\tau(\Delta n, E_{\text{F}^*}^{\text{aSi}}, D_{\text{it}})$ eingesetzt werden, dessen Ergebnisse in Abb. 5.14(b) zu sehen sind. Unter Beachtung der in Abschnitt 5.1 vorgestellten Gleichungen ist klar, dass die Umrechnung der Achsen $Q_{\text{eff}} \rightarrow E_{\text{F}^*}^{\text{aSi}}$ sehr aufwendig ist und numerische Rechenschritte beinhaltet.¹⁶ Auch in Abb. 5.14(b) wird deutlich, dass die Lebensdauer durch die Erhöhung der Bandverbiegung oder durch Absenkung der Defektdichte optimiert werden kann. Weiterhin ist zu erkennen, wie die Feldefektpassivierung wieder zunimmt, wenn das Fermi-niveau die Bandmitte überschreitet. Diese Art der Passivierung ist für a-Si:H-BSF-Schichten erwünscht. Die Rechnung ermöglicht es ebenfalls zu erkennen, für welche Strukturparameter die Lebensdauer nicht mehr weiter durch die Optimierung der Grenzfläche erhöht werden kann. In diesen Regionen ist das dem Silizium eigene Limit erreicht, das durch die Augerrekombination gegeben ist. Die in Abb. 5.15 gezeigten Ergebnisse für einen 1 $\Omega\text{cm-c-Si(p)}$ -Wafer weisen die selbe charakteristischen Zusammenhänge auf. Es ergibt sich hier allerdings aufgrund der Augerrekombination, die für diesen höherdotierten Wafer größer ist, eine wesentlich geringere Lebensdauer.

Durch die Anwendung der CA-PCD-Methode sollen die untersuchten Solarzellenstrukturen in den folgenden Kapiteln dieser Darstellung verortet werden, um so den dominanten Passivierungsmechanismus zu bestimmen und erfolgversprechende Optimierungsstrategien zu identifizieren. Eine solche Strategie könnte beispielsweise sein, den negativen Einfluss einer schlechten Grenzflächenpassivierung für z. B. $D_{\text{it}} = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ in Abb. 5.14(b) durch eine relativ kleine Variation des a-Si:H-Fermi-niveaus $E_{\text{F}^*}^{\text{aSi}} = 0.5 \rightarrow 0.4 \text{ mV}$ zu kompensieren.¹⁷ Optimierungsstrategien, die das separate Ändern der Defektdichte und des Fermi-niveaus beinhalten, werden insbesondere durch das HIT-Konzept ermöglicht, da hier die Grenzflächen separat durch die i-Schicht-Parameter beeinflusst werden können, während die a-Si:H-Emitterschicht die injektionsabhängige Bandverbiegung bestimmt. Eine genauere Diskussion dieses Schichtsystem wird im Zusammenhang mit der CA-PCD-Analyse der experimentellen Daten in Kapitel 6 durchgeführt.

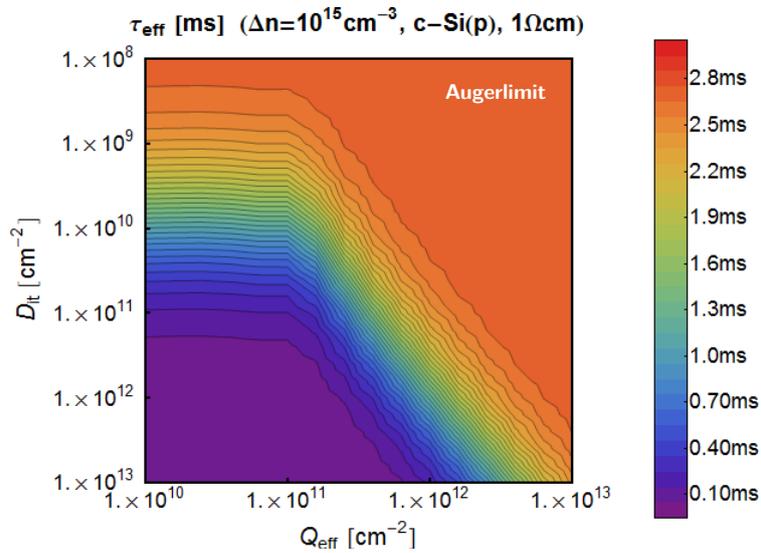
Wichtiger als die Lebensdauer bei einem festen Injektionsniveau ist die Lebensdauer bei fester Beleuchtung mit AM1.5, da sich daraus mit Gl. (2.63) die Leerlaufspannung berechnen lässt. Um diese Situation mit dem Modell zu berechnen, muss zunächst das Injektionsniveau bei AM1.5 berechnet werden. Dies ergibt sich durch numerisches Lösen von Gl. (2.60) nach Δn_{AM15} :

$$\Delta n_{\text{AM15}} = \tau(\Delta n_{\text{AM15}}) \times G_{\text{AM15}} \quad (5.26)$$

¹⁶Eine exakte Umrechnung zur Darstellung von τ in Abhängigkeit von der Dunkelbandverbiegung $E_{\text{F}^*}^{\text{aSi}} \rightarrow \Delta\varphi_{\text{dark}}$ ist im Rahmen des Modells ebenfalls möglich.

¹⁷Hier soll daran erinnert werden, dass das Modell bei einem Abstand zwischen Fermi-niveaus und Valenzbandkante $< 0.4 \text{ eV}$ hin die injektionsabhängige Ladung nicht mehr richtig bestimmt. Dies liegt daran, dass ein Fermi-niveau, das kleiner als der VB-Offset (hier 0.4 eV) ist, eine Bandverbiegung in der amorphen Schicht erzwingt, die im Rahmen des Modells nicht berücksichtigt wird.

(a)



(b)

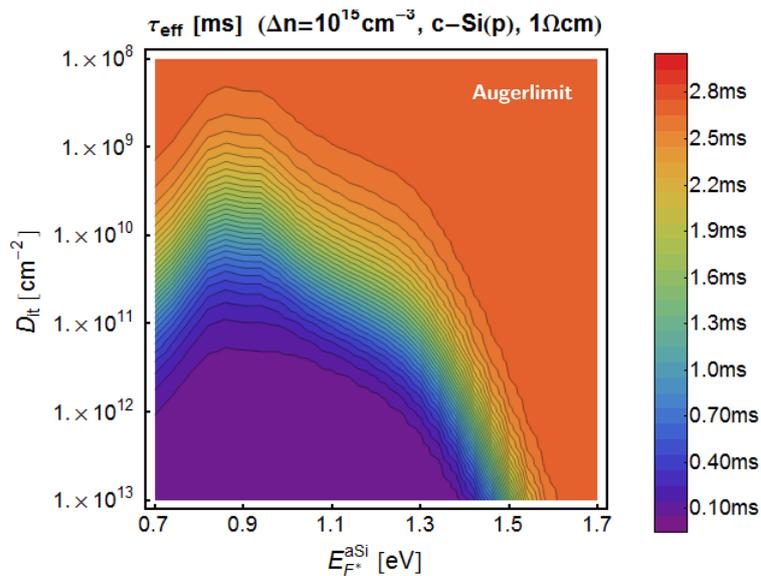


Abbildung 5.15.: Passivierung der Grenzfläche in Abhängigkeit der Defektdichte D_{it} und der effektiven Festladung Q_{eff} (Abb. (a)) bzw. des a-Si:H-Ferminiveaus bei der Glastemperatur $E_{F^*}^{\text{aSi}}$ (Abb. (b)) für eine symmetrische a-Si:H(n)/c-Si(p) Struktur (1 Ωcm-Wafer). Die Achsenkalierung ist so gewählt, dass sie in Richtung steigender Passivierung zeigen. D. h. D_{it} nimmt ab und der Betrag der Festladung $|Q_{\text{eff}}|$ nimmt zu (Abb. (a)) bzw. das a-Si:H-Ferminiveau verschiebt sich näher an die Leitungsbandkante (Abb. (b)). Die a-Si:H-Valenzbandkante ist als Energie-Nullpunkt definiert. Für das Modell mit injektionsabhängiger Ladung in Abb. (a) wurden die a-Si:H-Defektverteilungen mit dem Defekt-Pool-Modell berechnet und an der Grenzfläche wurde die selbe Defektverteilung wie in Abb. (a) angenommen.

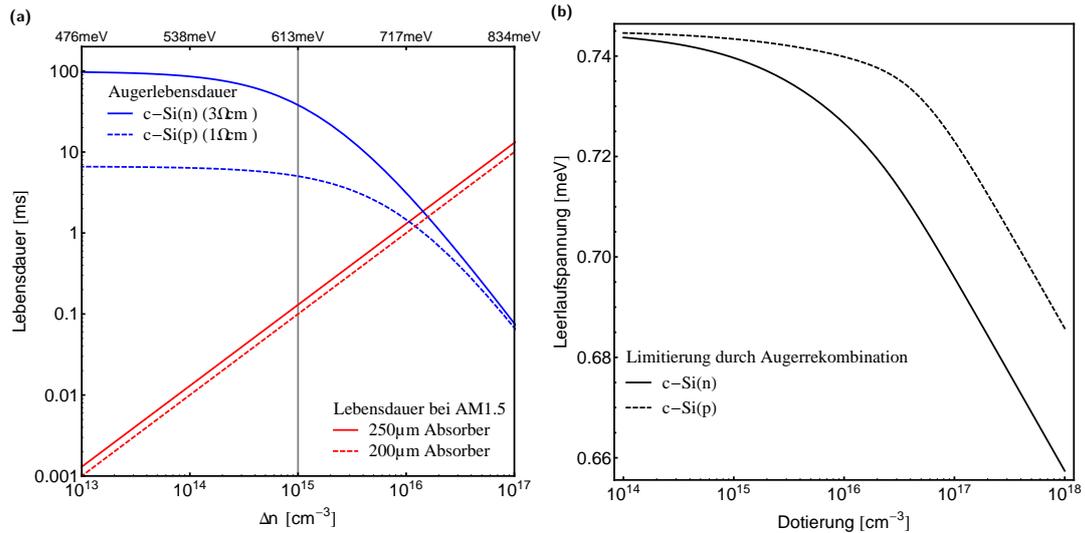


Abbildung 5.16.: Abb. (a) zeigt die Limitierung der Lebensdauer durch Augerrekombination (blaue Linie) und die Gerade $\tau = \Delta n \times G_{AM15}$, die die Lebensdauer bei einer Sonne definiert (rote Linie). Lebensdauer und Injektionsniveau bei einer Sonne ergeben sich aus dem Schnittpunkt dieser Geraden und der Lebensdauerkurve. Verglichen werden zwei Waferdotierungen und zwei Waferdicken. In Abb. (b) ist die Leerlaufspannung in Abhängigkeit der Basisdotierung gezeigt, die sich aus der Überschussladungsträgerdichte bei AM15 ergibt. Die mittleren Generationsraten für den 200 μm -Wafer $G_{AM15} = 1.2 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$ und für den 260 μm -Wafer $G_{AM15} = 8.8 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ wurden mit AFORS-HET unter Berücksichtigung der parasitären Absorption in einer 10 nm a-Si:H-Schicht berechnet.

Die Funktion $\tau(\Delta n_{AM15})$ ist durch das Modell $\tau(\Delta n, Q_{\text{eff}}, D_{\text{it}})$ bzw. $\tau(\Delta n, E_{\text{F}^*}^{\text{aSi}}, D_{\text{it}})$ gegeben. Um die prinzipiellen Zusammenhänge an einem einfachen Beispiel klar zu machen, wird zunächst jedoch nur die Augerrekombination $\tau_{\text{Auger}}(\Delta n)$ Gl. (2.29) diskutiert. Diese bestimmt das Augerlimit für Siliziumabsorber, das nicht weiter durch Materialoptimierung verbessert werden kann. Das Limit für die injektionsabhängige Lebensdauer, das sich aus der Augerrekombination für zwei verschiedene Dotierungen ergibt, ist in Abb. 5.16(a) (blaue Linie) dargestellt. Weiterhin ist die Gerade eingezeichnet, auf der nach $\tau = \Delta n \times G_{AM15}$ die Lebensdauer bei Beleuchtung mit AM1.5 liegt (rote Linie). Es sei hier betont, dass diese Gerade allgemeingültig ist und nur von der mittleren Generationsrate abhängt. Die Gerade ist für zwei Generationsraten eingezeichnet, die mit AFORS-HET für einen 200 μm und einen 260 μm Wafer berechnet wurden. Die Injektionsdichte bei AM1.5 ergibt sich als Schnittpunkt der Augerlebensdauerkurven und dieser Geraden. Für diese Ladungsträgerdichte bzw. Lebensdauer ergibt sich dann mit Gl. (2.63) die implizite Leerlaufspannung, die in Abb. 5.16(b) als Funktion der Basisdotierung aufgetragen ist. Es zeigt sich, dass die Leerlaufspannung der c-Si(p)-Struktur höher ist, obwohl die Lebensdauer der c-Si(p)-Struktur sowohl bei dem Injektionsniveau $\Delta n = 10^{15} \text{cm}^{-3}$ (siehe Abb. 5.14 und Abb. 5.15) als auch bei Beleuchtung mit AM1.5 (siehe Schnittpunkt in Abb. 5.16) geringer ist als die der c-Si(n)-Struktur¹⁸. Der Verlauf der Leerlaufspannung unter Berücksichtigung der Augerlimitierung in Abb. 5.16(b) ergibt sich daraus, dass die Augerrekombination mit der Basisdotierung zunimmt und für p-Typ c-Si etwas geringer ist als für n-

¹⁸3 Ωcm c-Si(n) $\hat{=} 1.5 \times 10^{15} \text{cm}^{-3}$ und 1 Ωcm c-Si(p) $\hat{=} 1.5 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$

Typ Gl. (2.29). Weiterhin wird auch berücksichtigt, dass die Leerlaufspannung nach Gl. (2.63) nicht nur mit dem Injektionsniveau, sondern auch mit der Basisdotierung wächst.

Resümierend lässt sich sagen, dass es zum Vergleich verschiedener Proben in Hinblick auf ihr V_{OC} -Potential nötig ist, die Lebensdauer bei einer Sonne zu bestimmen und unter Beachtung der Basisdotierung in die Leerlaufspannung umzurechnen. Im Folgenden wird deshalb mit Hilfe des Modells $\tau(\Delta n, Q_{\text{eff}}, D_{\text{it}})$ und Gl. (5.26), direkt die Leerlaufspannung in Abhängigkeit der Defekt und Feldefektpassivierung berechnet.

In den Abb. 5.17 und Abb. 5.17 werden das Injektionsniveau, die Lebensdauer und die Leerlaufspannung in Abhängigkeit der Grenzflächendefektdichte und der effektiven Festladung gezeigt. In Abb. 5.17 (a) wird deutlich, dass die Ladungsträgerdichte für Strukturen mit guter Grenzflächenpassivierung über $\Delta n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ liegt und somit in einem Bereich, in dem die Augerrekombination stark zunimmt. Im Vergleich zu der Untersuchung in Abb. 5.14 ist man somit in einem Bereich, in dem die Augerrekombination stärker limitierend wirkt und die Lebensdauer auf $\tau 1 \text{ ms}$ absenkt, wie in Abb. 5.17 (b) zusehen ist (im Vergleich zu 25 ms in Abb. 5.14). Das führt dazu, dass die Leerlaufspannung, die in Abb. 5.17 (c) zu sehen ist, in über der Hälfte des untersuchten Parameterbereichs bereits durch die Augerrekombination beschränkt ist. In Abb. B.13 ist zu erkennen, dass sich bei der p-Typ Zelle ähnliche Zusammenhänge ergeben. Die bisherige Rekordzellen von Sanyo liegen mit $V_{oc} = 729 \text{ mV}$ (c-Si(n)) schon nahe am Augerlimit, während bei den Rekordzellen vom HZB mit $V_{oc} = 639 \text{ mV}$ (c-Si(n)) und $V_{oc} = 629 \text{ mV}$ (c-Si(p)) noch erhebliches Optimierungspotential für die Grenzfläche besteht. Wie anhand von Abb. 5.16 erläutert wurde, besteht im Bereich der Augerlimitierung noch die Möglichkeit, die Leerlaufspannung über die Basisdotierung, die Waferdicke bzw. allgemein die Lichteinkopplung weiter zu optimieren. Dieser Weg wird von Sanyo beschritten, die zu dünneren Wafern übergehen und Module konstruieren, die beidseitig Licht einkoppeln können.

Es wäre von großem Interesse, die Leerlaufspannung mit dem ELifAnT Modell in seiner letzten Ausbaustufe $\tau(\Delta n, E_{\text{F}^*}^{\text{aSi}}, D_{\text{it}})$ zu berechnen. Durch relativ kleine Modifikationen könnte so die Leerlaufspannung als Funktion der Dunkelbandverbiegung und der Grenzflächendichte analysiert werden: $V_{oc}^{\text{imp}}(\Delta\varphi_{\text{dark}}, D_{\text{it}})$. Weitere Größen, für die bisher ein fester Wert vorgegeben wurde, die allerdings bei der Solarzellenprozessierung zugänglich sind, sind die Urbachenergie des Valenzbandausläufers E_{VBT} (VBT-Urbachenergie) und der Valenzbandoffset ΔE_{VB} (VB-Offset). Die VBT-Urbachenergie hat entsprechend dem Defekt-Pool-Modell einen starken Einfluss auf die DB-Defektdichte, und der VB-Offset beeinflusst die Bandverbiegung (siehe Abschnitt 3.1.2). Die VBT-Urbachenergie kann durch Prozessparameter bei der a-Si:H-Deposition beeinflusst werden und mit der CFSYS-Methode experimentell bestimmt werden [70, 75, 133]. Daraus könnten sich weitere Optimierungsstrategien ergeben, die ohne große Modifikationen mit ELifAnT analysiert werden können: $V_{oc}^{\text{imp}}(\Delta\varphi_{\text{dark}}, D_{\text{it}}, E_{\text{VBT}}, \Delta E_{\text{VB}})$.

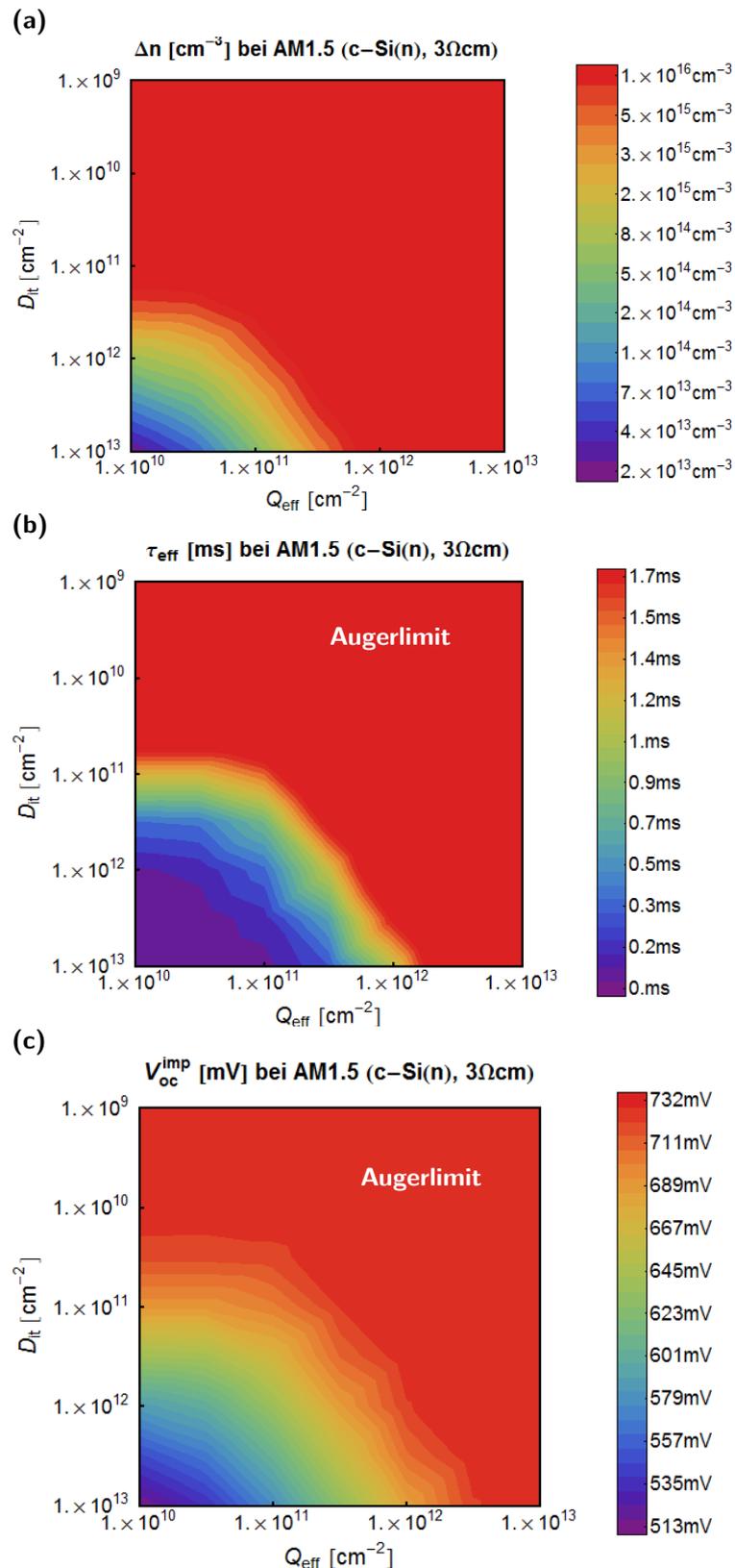


Abbildung 5.17.: Ladungsträgerdichte (a), Lebensdauer (b) und Leerlaufspannung (c) bei Beleuchtung mit AM1.5 in Abhängigkeit der Grenzflächendefektdichte und der effektiven Festladung. Die Modellrechnung erfolgt hier für eine symmetrisch a-Si:H(p)/c-Si(n) Struktur mit einem $3\Omega\text{cm}$ Wafer. Die injektionsabhängige Bandverbiegung wurde unter Annahme einer effektiven Festladung berechnet ($\tau(\Delta n, Q_{\text{eff}}, D_{\text{it}})$). Die Achsenorientierung ist so gewählt, dass sie in Richtung steigender Passivierung zeigen.

5.6. Zusammenfassung der Ergebnisse

In diesem Kapitel wurde ein detailliertes Verständnis der Ladungsträgerlebensdauer in symmetrisch passivierten Siliziumstrukturen erarbeitet. Dabei wurden die physikalischen Prozesse identifiziert, die die effektive Lebensdauer bestimmen und mathematische Modelle entwickelt, die eine korrekte Modellierung erlauben. Auf Basis dieser Erkenntnisse wurde mit ELifAnT (**E**ffective **L**ifetime **A**nalysis **T**ool) ein Programm entwickelt um die Lebensdauer in Abhängigkeit der Injektionsdichte und verschiedener Materialparameter zu berechnen. ELifAnT bildet die Grundlage der CA-PCD-Methode (**C**omputer **A**ided **P**CD) zur Auswertung experimenteller Daten.

Modelle zur Berechnung der Ladungsträgerlebensdauer

ELifAnT ist flexibel aufgebaut, so dass zwischen verschiedenen physikalischen Modelle gewählt werden kann. Insbesondere kann die injektionsabhängige Bandverbiegung entweder durch Annahme einer effektiven Festladung oder unter Berücksichtigung der injektionsabhängigen Defektumladung berechnet werden. Weiterhin wurden Gleichungen integriert, um den Einfluss des DRM-Effekts und der Ladungsträgerdiffusion zu berücksichtigen. Die Rekombination und der Ladungszustand der DB-Defekte kann mit Shockley-Read-Hall-(SRH)-Gleichungen oder mit den Gleichungen für korrelierte amphotere Defekte berechnet werden. Die Defektverteilung in der amorphen Schicht und der Grenzfläche kann entweder fest vorgegeben oder mit dem Defekt-Pool-Modells berechnet werden.

Es wurde gezeigt, dass sich die Defekte im a-Si:H und der Grenzfläche umladen und die Annahme einer Festladung nicht über den gesamten Injektionsbereich gültig ist (siehe Abb. 5.4). Allerdings lässt sich eine effektive Festladung einführen, die zumindest im Messbereich der QSSPC/PCD-Messung eine korrekte Berechnung der Bandverbiegung ermöglicht. Ein Vergleich, der mit ELifAnT und AFORS-HET berechneten $\tau(\Delta n)$ -Kurven, zeigt eine gute Übereinstimmung (siehe Abb. 5.9). Für das Modell mit injektionsabhängiger Ladung bleibt die Abweichung im Messbereich der QSSPC/PCD Messung unter 30 %.

Beim Auftreten des DRM-Effekts ergeben sich unnatürlich hohe Lebensdauern, und der logarithmische Zusammenhang zwischen Überschussladungsträgerkonzentration und Leerlaufspannung geht verloren (siehe Abb. 5.7 und Abb. 5.8). Bei den a-Si:H/c-Si -Strukturen tritt er typischerweise erst unter $\Delta n = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ auf. Bei den später diskutierten poly-Si-Proben setzt der Effekt aufgrund der dünnen Absorber (ca. $2 \mu\text{m}$) allerdings wesentlich früher ein.

Grundprinzip der CA-PCD Methode

Die CA-PCD Methode beruht auf dem unterschiedlichen Einfluss den die Defekt- und Feldeffektpassivierung auf die $\tau(\Delta n)$ -Kurve haben. Durch die Feldeffektpassivierung ändert sich die Lebensdauer am stärksten für niedrige Injektionsdichten. Somit ändert sich die Form der $\tau(\Delta n)$ -Kurve und es ergibt sich eine für den Feldeffekt charakteristische Signatur (siehe Abb. 5.10). Eine Absenkung der Defektdichte führt hingegen unabhängig vom Injektionsniveau zu einer Anhebung der Lebensdauer (siehe Abb. 5.10). Die unterschiedliche Signatur von Feldeffektpassivierung und Defektpassivierung ermöglicht es aus den $\tau(\Delta n)$ -Kurve die Grenzflächendefektdichte D_{it} und effektive Festladung Q_{eff} zu bestimmen und den Einfluss der Passiviermechanismen zu trennen.

Grenzflächenpassivierung und Leerlaufspannung

ELifAnT ermöglicht es, die implizite Leerlaufspannung in Abhängigkeit von Defekt- und Feldeffektpassivierung zu berechnen (siehe Abb. 5.17 und Abb. B.13). Gelingt mit Hilfe der CA-PCD-Methode eine Lokalisierung in der V_{oc}^{imp} -Landschaft, so können erfolgversprechende Optimierungsmethoden identifiziert werden. Eine erste Einordnung anhand der Leerlaufspannung der besten am HZB hergestellten Zelle zeigt, dass noch Optimierungspotential für die Grenzfläche besteht.

6. Passiviereigenschaften von a-Si:H/c-Si-Schichtsystemen für HIT-Solarzellen

In diesem Kapitel werden symmetrische a-Si:H/c-Si-Schichtsysteme aus a-Si:H(p,n)-Emitterschichten, a-Si:H(i)-Pufferschichten auf n- und p-Typ c-Si-Wafern (piN- und niP-Schichtsysteme) in Hinblick auf ihre Passiviereigenschaften und ihr V_{oc} -Potential untersucht. Die Optimierung dieser Schichtstapel ist der Schlüssel zu hohen Leerlaufspannungen von bis zu 730 mV, wie sie in der Weltrekord-HIT-Zelle (**h**eterojunction with **i**ntrinsic **t**hin layer) von Sanyo erreicht werden [2]. Die defektarme a-Si(i)-Pufferschicht übernimmt dabei die Funktion, die Defektdichte an der Wafergrenzfläche zu minimieren, während die dotierten und defektreicheren Emitterschichten eine Bandverbiegung im Wafer erzeugen. Die implizite Leerlaufspannung dieses Systems wird durch die Rekombination an der Grenzfläche bestimmt, die von der Grenzflächendefektdichte und der Bandverbiegung abhängt und die sich somit aus dem Zusammenspiel von Defekt- und Feldeffektpassivierung ergibt.

Um diesen Schichtstapel zu untersuchen, kommen die in den experimentellen Grundlagen Kapitel 4 diskutierten Methoden der quasistatischen und transienten Photoleitfähigkeit (QSSPC/PCD) zur Bestimmung der injektionsabhängigen effektiven Lebensdauer ($\tau(\Delta n)$ -Kurve) zum Einsatz, und die Dunkelbandverbiegung wird mit der Methode der Oberflächenphotospannung (SPV) bestimmt. Zur Auswertung der QSSPC/PCD-Messungen wird der in Kapitel 4 vorgestellte semi-analytische Simulator ELifAnT eingesetzt, der es ermöglicht, aus den experimentellen $\tau(\Delta n)$ -Kurven die Grenzflächendefektdichte D_{it} und eine effektive Festladung Q_{eff} zu bestimmen, die ein Maß für die Feldeffektpassivierung darstellt (CA-PCD-Methode). Es stehen somit Methoden und Analysen zur Verfügung, um die Defekt- und Feldefektpassivierung sowie die Dunkelbandverbiegung getrennt zu untersuchen. Dies ermöglicht es, die untersuchten Schichtstapel in der mit ELifAnT berechneten V_{oc}^{imp} -Konturgrafiken einzuordnen und Strategien für eine weitere Optimierung zu entwickeln. Die Ergebnisse dieser Studie wurden zum Teil in [27, 126] veröffentlicht. Auch für weitere Untersuchungen am HZB, am LPEG¹ und an der Universität Utrecht² wurden Auswertungen mit der vom Autor entwickelten Software und der CA-PCD-Methode durchgeführt [134, 135].

Die finale Leerlaufspannung in der a-Si:H/c-Si-Solarzelle wird jedoch nicht nur durch den Emitterschichtstapel bestimmt, sondern auch durch die Emitterkontaktierung beeinflusst, die in den HZB a-Si:H/c-Si-Zellen durch eine ZnO-Schicht hergestellt wird. Der Einfluss dieser ZnO-Schicht, auf die Grenzflächenpassivierung wird

¹Laboratoire de Génie Électrique de Paris, Paris, Frankreich.

²Debye Institute for Nanomaterials Science, Universität Utrecht, Niederlande.

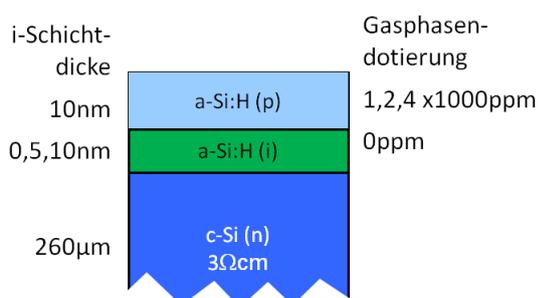
ebenfalls anhand von QSSPC/PCD-Messungen diskutiert.

6.1. Untersuchung des piN-Schichtsystems

6.1.1. Probendetails der piN-Strukturen

Als Absorbermaterial für die a-Si:H(p)/a-Si:H(i)/c-Si(n) -(piN)-Strukturen werden 260 μm dicke, polierte, hochreine n-Typ Siliziumwafer eingesetzt. Die Wafer sind mit Phosphor dotiert und haben eine Leitfähigkeit von ca. $3\Omega\text{cm}$, was einer Donorkonzentration von $N_D = 1.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ entspricht. Zur Entfernung von Oberflächenverunreinigungen und Oxidschicht wurden die Wafer vor der a-Si:H-Deposition einer RCA-Reinigung und einem Ätzprozess in 1 %-Flusssäure unterzogen. Die a-Si:H-Schichten wurden in einem PECVD-System (Plasma-gestützte chemische Gasphasen-Deposition, plasma enhanced chemical vapour deposition) deponiert. Details zur a-Si:H-Abscheidung und der Optimierung der Depositionsparameter finden sich in der gleichzeitig angefertigten Doktorarbeit von T. Schulze [45]. In der hier untersuchten Serie wurde die Dicke der a-Si:H(i)-Schicht (i-Schicht) in vier Schritten und die Emitterdotierung in drei Schritten variiert (siehe Abb. 6.1).

Abbildung 6.1: a-Si:H(p)/a-Si:H(i)/c-Si(n) Probenserie mit Variation der i-Schichtdicke und der Emitterdotierung zur Optimierung des Schichtstapels. Hier ist nur die eine Seite des Schichtstapels dargestellt. Die QSSPC/PCD Proben sind symmetrisch, die SPV-Proben haben auf der Rückseite keine a-Si:H-Schichten.



Für die a-Si:H(p)-Emitterschichten wurden die Substrattemperatur 130°C , der Druck $p = 0.5 \text{ mbar}$, die Leistungsdichte $p = 19 \text{ mW}/\text{cm}^2$ und der Elektrodenabstand 28 mm, sowie eine Anregungsfrequenz von 60 MHz gewählt. Die Dotierung wurde durch Zusatz von in Wasserstoff verdünntem Diboran zum Silan erreicht. Die Borkonzentration wurde in drei Schritten variiert, 1000 ppm, 2000 ppm, 4000 ppm.³

Für die PECVD-Deposition der a-Si:H(i) Pufferschichten, wurden Silangas ohne Wasserstoffverdünnung, die Substrattemperatur 170°C , der Druck $p = 0.5 \text{ mbar}$, die Leistungsdichte $p = 9.4 \text{ mW}/\text{cm}^2$ und der Elektrodenabstand 30 mm sowie eine Anregungsfrequenz von 13.56 MHz gewählt. Die a-Si(i)-Schichtdicken wurde durch Wahl geeigneter Depositionszeiten in vier Schritten variiert, 5 nm, 7 nm und 10 nm.⁴

Weiterhin wurde die Passiviereigenschaft einer a-Si:H(i) Schicht ohne Emitter und deren Optimierung durch eine thermische Nachbehandlung untersucht. Diese Schicht wurde bei der Substrattemperatur von 130°C abgeschieden und hat eine Dicke von 10 nm.⁵

³ppm steht für „Teile von einer Million“ (parts per million).

⁴Serienplanung und Deposition N. Mingirulli, HZB interner Serienname: TOS9.

⁵Serienplanung und Deposition T. Schulze, HZB interner Serienname: TS16I3.

6.1.2. CA-PCD-Charakterisierung der i-Pufferschicht

Zunächst soll hier exemplarisch die Optimierung einer a-Si:H(i)-Pufferschicht untersucht werden. In der Literatur finden sich bereits einige Untersuchungen, die zeigen, dass sich auch bei nichtoptimalen PECVD-Depositionsparametern eine nachträgliche Optimierung der i-Schicht erreichen lässt, indem die Probe unter Stickstoffatmosphäre erhitzt wird [136]. Diese Optimierungsstrategie soll auch hier untersucht werden. In Abb. 6.2(a) ist zu erkennen, dass sich die $\tau(\Delta n)$ -Kurve in Abhängigkeit der Dauer der thermischen Nachbehandlung nach oben verschiebt. Ein Vergleich der Lebensdauer bei $\Delta n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ zeigt, dass diese sich um fast eine Größenordnung von 0.7 ms auf 6 ms verbessert. Die i-Schicht nach einem 60 min langen Heizprozess bei 140°C ist damit in ihrer Qualität vergleichbar mit i-Schichten, die auch in Zellstrukturen eingesetzt werden. Es zeigt sich, dass sich die Form der $\tau(\Delta n)$ -Kurve nicht ändert, sondern dass sie im Wesentlichen parallelverschoben wird. Die theoretischen Überlegungen zur Physik der effektiven Ladungsträgerlebensdauer in Kapitel 5 ermöglichen eine qualitative Interpretation dieser Ergebnisse ohne dass eine weitere Rechnung nötig ist. Die Parallelverschiebung der $\tau(\Delta n)$ -Kurve zu höheren Lebensdauern hin geht mit einer Absenkung der Defektdichte einher, ohne dass sich die effektive Festladung wesentlich ändert. Um dies im Detail zu untersuchen, wurde das ELifAnT Modell $\tau(\Delta n, Q_{\text{eff}}, D_{\text{it}})$ in Abhängigkeit von der effektiven Festladung Q_{eff} und der Defektdichte D_{it} durch Minimierung der quadratischen Abweichung zu den Messpunkten angepasst (Details siehe Abschnitt 5.4). Es zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Modellrechnung, mit Abweichungen kleiner als der Messfehler.

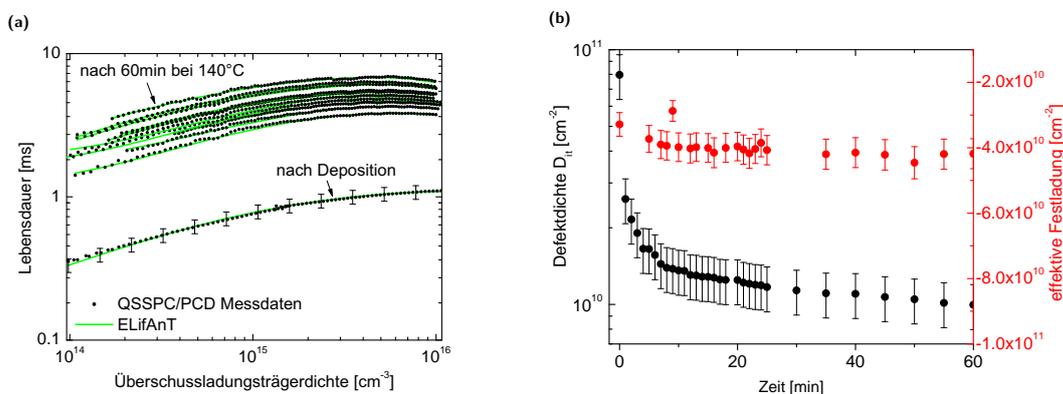


Abbildung 6.2.: Abb. (a) zeigt gemessene und berechnete $\tau(\Delta n)$ -Kurve n eines symmetrisch mit a-Si:H(i)-Schichten passivierten c-Si-Wafers während thermischer Nachbehandlung bei 140°C unter Stickstoffatmosphäre. Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung zwischen Experiment (schwarze Punkte) und Modellrechnung (grüne Linien). In Abb (b) sind die mit der CA-PCD-Methode bestimmte Defektdichte und effektive Festladung aufgetragen.

Die so bestimmte Defektdichte und effektive Festladung sind in Abb. 6.2(b) zu sehen. Man erkennt eine schnelle initiale Abnahme der Defektdichte beginnend bei $D_{\text{it}} = 8 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$, die dann langsam gegen einen festen Wert konvergiert und nach einer Stunde den Wert $D_{\text{it}} = 10^{10}$ annimmt. Die genauen Werte der Defektdichten ergeben sich unter Annahme der Einfangquerschnitte ($\sigma_{n,p} = 10^{-16} \text{ cm}^2$ und

$\sigma_{\text{charged}} = 10 \times \sigma_{\text{uncharged}}$) und der Verteilung der DB-Defekte an der Grenzfläche (Gaußfunktion, zentriert in der c-Si-Bandlücke, Breite: 0.2eV, Korrelationsenergie 0.18 eV). Details zu diesen Parametern werden in Abschnitt 5.1.3 diskutiert. Die Änderung der effektiven Festladung über die gesamte Zeit bleibt hingegen unter 10 %, so dass unter Beachtung des Fehlers keine signifikante Änderung festzustellen ist.

Zusammenfassend kann man feststellen, dass sich die Lebensdauer durch eine Defektpassivierung an der a-Si:H/c-Si-Grenzfläche erhöht. Dies kann damit erklärt werden, dass sich das Gitter an der Grenzfläche bei der erhöhten Temperatur ordnen kann, wobei ungesättigte Si-Atome untereinander Bindungen eingehen können oder durch Wasserstoffatome abgesättigt werden. Dies ist das typische Verhalten von i-Schichten, das bereits in mehreren Untersuchungen bestätigt und auch schon mit einfacheren Modellrechnungen theoretisch beschrieben wurde [136]. In der Doktorarbeit von T. Schulze und weiteren aktuellen Publikationen wird detailliert dargestellt, dass es auch möglich ist, vergleichbare oder sogar bessere i-Schichten durch Optimierung der Depositionsparameter direkt abzuscheiden, so dass die thermische Nachbehandlung nicht mehr nötig ist [45]. Schüttauf et al. zeigen, dass es auch möglich ist, mit alternativen Abscheideverfahren, wie der HWCVD (hot-wire CVD) und thermischer Nachbehandlung Lebensdauern von einigen Millisekunden zu erreichen [135].⁶

Diskussion der Fehler der CA-PCD-Methode

Es soll hier noch einmal betont werden, dass eine Bestimmung von Defektdichten nur unter Annahme eines Literaturwertes für die Einfangquerschnitte möglich ist. Da bei dieser Methode die Defektdichte über die Rekombinationsrate bestimmt wird, geht auch der Einfangquerschnitt in die Berechnung ein, und unter Beachtung der Gleichungen für die Rekombinationsraten lässt sich somit nur das Produkt aus Defektdichte und Einfangquerschnitt bestimmen. Weiterhin kann die Kurvenform auch durch das Verhältnisse der Einfangquerschnitte und der Defektverteilung sowie von der Korrelationsenergie beeinflusst werden. Um eine Vergleichbarkeit herzustellen werden für alle folgenden Untersuchungen dieselben DB-Parameter angenommen.

Der eingezeichnete Fehler der gemessenen $\tau(\Delta n)$ -Kurve beträgt 11 % (siehe Abschnitt 4.1.1 oder [115]). In Abb. 6.2 ist deutlich zu erkennen, dass die ELifAnT Modellkurve $\tau(\Delta n, Q_{\text{eff}}, D_{\text{it}})$ für alle Messdaten innerhalb dieses Fehlers bleibt. Der Fehler der Messdaten bestimmt somit auch den Fehler, der mit der CA-PCD-Methode bestimmten Defektdichte und effektiven Festladung. Dabei ergibt sich ein Fehler von 20 % für die Defektdichte durch die maximal mögliche Parallelverschiebung der Kurve innerhalb des Messfehlers und ein Fehler von 11 % für die effektive Festladung durch die maximal mögliche Änderung der Kurvenlage (siehe Abb. 6.3). Die Eindeutigkeit der Lösung mittels der CA-PCD-Methode wurde überprüft, indem zwei verschiedene Algorithmen zur Minimierung des quadratischen Fehlers eingesetzt wurden.⁷ Bei Einsatz des evolutionären Algorithmus wurde zusätzlich die Matrix der Startpunkte variiert, während eine andere Methode die Startpunkte mit einem Zufallsgenerator bestimmt. Es zeigt sich, dass die CA-Methode sehr robust ist, so dass bei den exempla-

⁶Die Daten dieser Studie wurden ebenfalls vom Autor mit der CA-PCD-Methode ausgewertet.

⁷Mathematica 7.0 von Wolfram Research, Funktion: NMinimize, Methode: DifferentialEvolution und Methode: RandomSearch

risch untersuchten $\tau(\Delta n)$ -Kurve n immer dieselbe Lösung gefunden wird. Zusätzlich führt der Fehler von 11 %, der für die experimentelle $\tau(\Delta n)$ -Kurve n angesetzt wurde, in Zusammenhang mit dem Verfahren zur Bestimmung des Fehlers der CA-PCD Methode (Abb. 6.3) zu einer sehr konservativen Fehlerabschätzung. Der Fehler könnte weiter minimiert werden, indem ein injektionsabhängiger Fehler für die $\tau(\Delta n)$ -Kurve berechnet würde, und auch indem die theoretische Eindeutigkeit der Lösung der CA-PCD-Methode detaillierter untersucht würde.

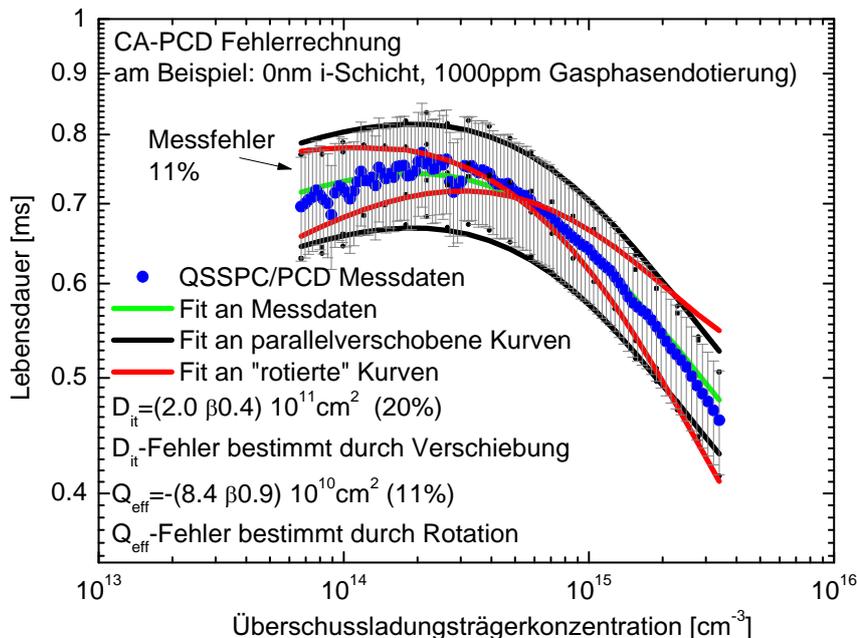


Abbildung 6.3.: Der eingezeichnete Fehler der gemessenen $\tau(\Delta n)$ -Kurve beträgt 11%. Es ist deutlich zu erkennen, dass die ELifAnT Modellkurve $\tau(\Delta n, Q_{eff}, D_{it})$ für alle Messdaten innerhalb dieses Fehlers bleibt. Der Fehler, der Messdaten bestimmt somit auch den Fehler der mit der CA-PCD Methode bestimmten Defektdichte und effektiven Festladung. Dabei ergibt sich ein Fehler von 20% für die Defektdichte und ein Fehler von 11% für die effektive Festladung.

Die Verlässlichkeit der CA-PCD Methode steigt mit dem Injektionsbereich, über den die Lebensdauer bestimmt werden kann. Insbesondere die Bestimmung der effektiven Festladung ist kritisch und bei künftigen Messungen sollte der Messbereich nach Möglichkeit erweitert werden, idealerweise bis zum Einsetzen des DRM-Effekts, der auch sehr sensibel auf die Bandverbiegung reagiert. Eine Möglichkeit dafür bieten eventuell SPV-Messungen, die, wie in den experimentellen Grundlagen gezeigt wurde, auch Lebensdauermessungen für niedrigere Injektionsdichten ermöglichen. Ebenfalls kann so die injektionsabhängige Bandverbiegung direkt bestimmt werden.

6.1.3. CA-PCD und SPV Charakterisierung des piN-Schichtsystems

Im Folgenden werden mit QSSPC/PCD- und SPV-Messungen Schichtstapel mit solchen optimierten i-Schichten untersucht (Probenserie in Abb. 6.2). Ziel ist es, durch

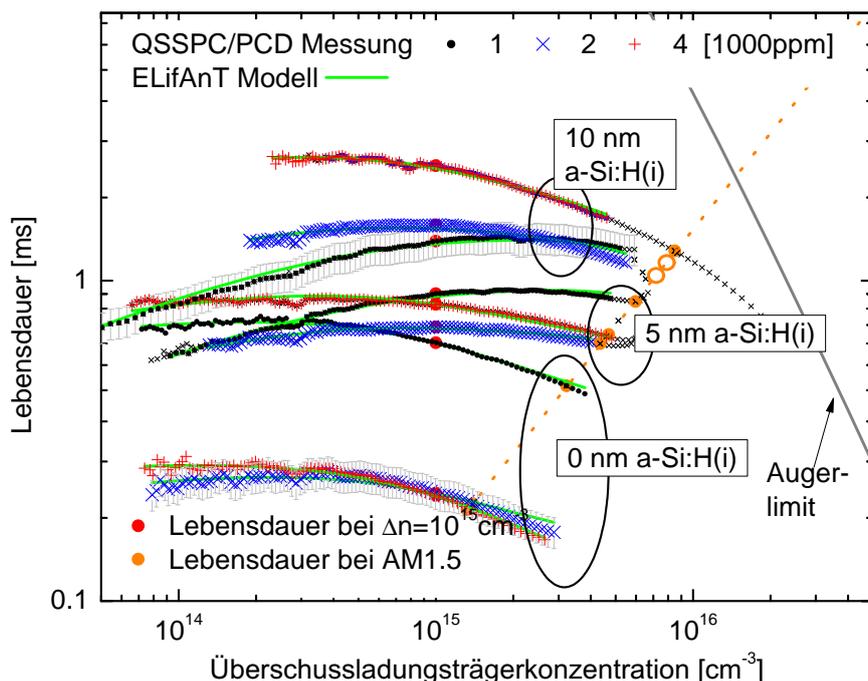


Abbildung 6.4.: QSSPC/PCD -Messungen und mit dem ELifAnT $\tau(\Delta n, Q_{\text{eff}}, D_{\text{it}})$ Modell berechnete $\tau(\Delta n)$ -Kurve von a-Si:H(p)/a-Si:H(i)/c-Si(n) Schichtstapeln mit Variation der Emitterdotierung und der i-Schichtdicke. Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Modellrechnung, die wesentlich kleiner als der Messfehler von 11 % ist. Weiterhin ist die Augerlebensdauer eingezeichnet, die die Obergrenze für die Lebensdauer darstellt, sowie die Gerade, auf der die Lebensdauer bei einer Sonne liegt. Für zwei Proben sind keine Messpunkte bei einer Sonne vorhanden, so dass die Punkte durch Extrapolation gewonnen wurden (offene orange Kreise).

Variation der Emitterdotierung und der i-Schichtdicke ein optimales Schichtsystem zur Passivierung der Grenzflächenrekombination zu finden. Die QSSPC/PCD -Messungen und mit dem ELifAnT $\tau(\Delta n, Q_{\text{eff}}, D_{\text{it}})$ -Modell berechnete Kurven sind in Abb. 6.4 zu sehen. Ebenfalls eingezeichnet ist die Augerrekombination, berechnet nach Gl. (2.29), und die Gerade, die die Lebensdauer bei einer Sonne festlegt, Gl. (5.26). Prinzipiell ist zu erkennen, dass die Lebensdauer bei einer Sonne auch für den besten Schichtstapel noch nicht durch die Augerrekombination begrenzt ist. Es ergibt sich also zumindest theoretisch Potential zur weiteren Optimierung der Grenzfläche.

Zunächst sollen die Kurven qualitativ, anhand der theoretischen Überlegungen in Abschnitt 5.4 diskutiert werden. Der Einfluss der Emitterdotierung lässt sich am besten anhand der Schichtstapel mit 10nm-a-Si:H diskutieren. Eine Erhöhung der Dotierung führt zu einer Erhöhung der Lebensdauer, die im Bereich niedriger Injektionsdichten besonders stark ausfällt. Dies ist der Einfluss einer mit zunehmender Dotierung zunehmen Feldeffektpassivierung (vergleiche Abb. 5.10). Die Lebensdauer bei einer Sonne liegt allerdings bereits in einem Bereich so hoher Injektionsdichten, dass die Auswirkung der Feldeffektpassivierung nicht mehr stark ausgeprägt ist. Weiterhin erkennt man deutlich den Einfluss, den die i-Schichtdicke auf die Lebensdauer hat. Die $\tau(\Delta n)$ -Kurve n der Schichtstapel bei konstanter Emitterdotierung von 2000 ppm

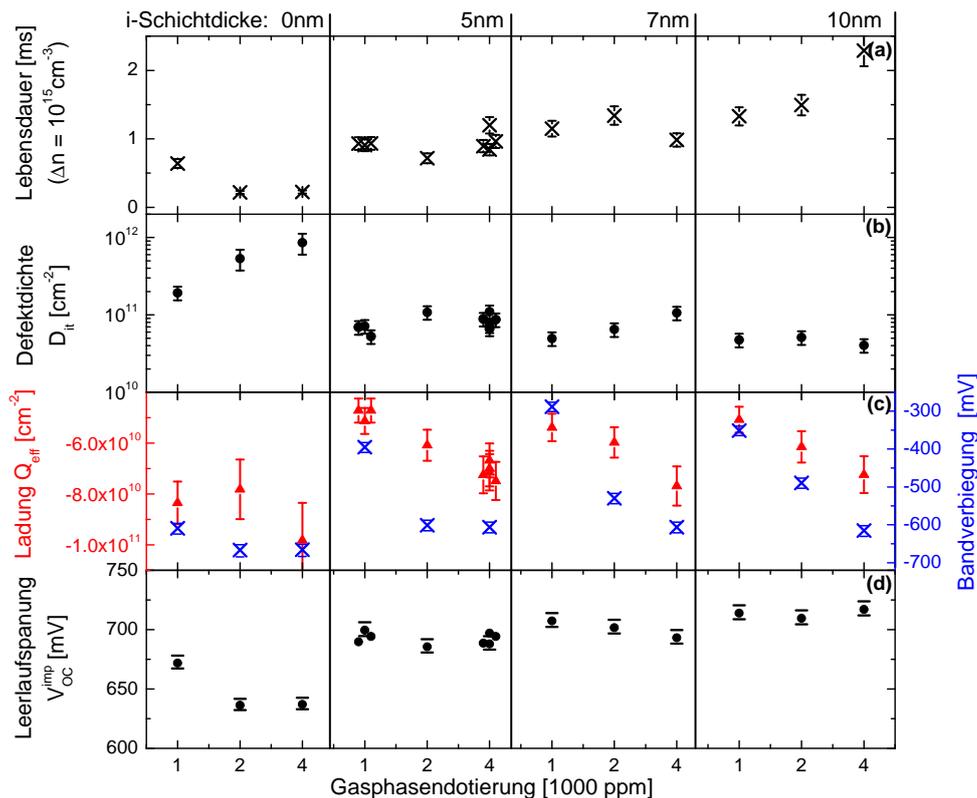


Abbildung 6.5.: QSSPC/PCD -Lebensdauer bei $\Delta n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (a), Mit Hilfe der CA-PCD Methode aus der experimentellen $\tau(\Delta n)$ -Kurve bestimmte Defektdichte (b) und effektive Festladung (c), sowie aus der gemessenen Lebensdauer berechnete implizite Leerlaufspannung (d). Diese aus den QSSPC/PCD Messungen gewonnenen Daten werden durch die SPV-Messungen der Dunkelbandverbiegung ergänzt (c). Gezeigt sind Daten von a-Si:H(p)/a-Si:H(i)/c-Si(n) Schichtstapeln bei Variation der Emitterdotierung und der i-Schichtdicke. Die Daten für die 5nm Proben mit 1000 ppm und 4000 ppm sind mehrfach vorhanden und stammen von nominell identischen Proben.

(rote Kurven) und 4000 ppm (blaue Kurven) werden mit steigender i-Schichtdicke parallelverschoben, d. h. eine Erhöhung der i-Schichtdicke verbessert die Defektpassivierung (vergleiche Abb. 5.10). Folglich ergeben sich die besten Lebensdauern für den Schichtstapel mit der dicksten i-Pufferschicht und dem Emitter mit der höchsten Dotierung. Auch die Lebensdauer dieser Schicht liegt allerdings mit ca. 2 ms unter der Lebensdauern von Proben, die nur mit i-Pufferschichten passiviert sind. Ein etwas komplizierteres Bild ergibt sich bei der Betrachtung der Proben mit Emitterdotierung von 1000 ppm. Hier ergibt sich zwar auch eine Erhöhung der Lebensdauer mit der i-Schichtdicke, jedoch erkennt man an der Form der $\tau(\Delta n)$ -Kurve, dass die i-Schicht ebenfalls zu einem Abbau der Feldeffektpassivierung führt. Dies wird im Folgenden anhand der quantitativen Analyse genauer diskutiert.

Zunächst ist festzustellen, dass sich eine gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Modellrechnung ergibt, die wesentlich kleiner als der Messfehler von 11 % ist. In Abb. 6.5 ist die gemessene Lebensdauer bei $\Delta n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ und die aus der gemessenen Lebensdauer bei einer Sonne berechnete implizite Leerlaufspannung ein-

gezeichnet. Diese experimentellen Daten werden durch die mit der CA-PCD-Methode bestimmte Defektdichte und effektive Festladung ergänzt. Zusätzlich zu den Daten, die aus den QSSPC/PCD -Messungen gewonnen wurden, ist die Dunkelbandverbiegung eingezeichnet, die mit der SPV-Methode bestimmt wurde. Für die SPV-Proben wurde auf der einen Waferseite ein nominell identischer Schichtstapel deponiert, während die Rückseite unpassiviert ist. Die Fehler der QSSPC/PCD -Messung und CA-PCD-Methode wurden so bestimmt, wie es schon bei der Untersuchung der i-Schicht-Pufferschicht diskutiert wurde (siehe Abb. 6.3). Der Fehler bei der Bestimmung der impliziten Leerlaufspannung wird durch die Unsicherheit in der mittleren Generationsrate dominiert. Für die mit AFORS-HET berechneten Generationsrate wird ein Fehler von 10 % angenommen, da sich durch die unterschiedlich i-Schichtdicken eine Variation in der parasitären Absorption ergibt. Der Fehler in der Dunkelbandverbiegung ergibt sich aus der nicht genau bekannten maximalen Überschussladungsträgerkonzentration nach dem Laserpuls (siehe Abschnitt 4.2 und Abb. A.3).

In Bezug auf die Defektdichte können folgende Schlüsse gezogen werden:

- In Proben ohne i-Schicht wächst die Defektdichte mit wachsender Emittierdotierung.
- Dieser negative Effekt der Dotierung wird durch die i-Schicht stark abgeschwächt und ist bei einer i-Schichtdicke von 10nm nicht mehr zu beobachten (auch bei 5 nm wächst die Defektdichte mit wachsender Emittierdotierung im Rahmen der Fehler nicht signifikant).
- Je dicker die i-Schicht ist, umso höher ist die minimal mögliche Defektdichte.
- Auch mit einer 10 nm i-Schicht können die hohen Lebensdauern von > 4 ms des Schichtsystems ohne Emitterschicht nicht erreicht werden.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass das Aufbringen eines Emitters trotz i-Pufferschicht die Grenzflächendefektdichte negativ beeinflusst. Diese Ergebnisse sind konsistent mit dem bisherigen Verständnis des Schichtstapels [93, 96, 97] und werden im folgenden Diskussionskapitel weiter analysiert.

In Bezug auf die Bandverbiegung und die effektive Festladung können folgende Schlüsse gezogen werden:

- Mit Erhöhung der Gasphasendotierung von 1000 ppm auf 4000 ppm erhöht sich die Bandverbiegung und die effektive Festladung
- Die Dunkelbandverbiegung und die effektive Festladung verringert sich durch den Einbau einer i-Schicht.
- Bei Proben mit i-Schicht wächst die effektive Festladung mit der Dotierung unabhängig von der i-Schichtdicke

Für die Verkleinerung der Dunkelbandverbiegung durch den Einbau einer i-Schicht gilt im Detail:

- 1000 ppm Proben: starke Verkleinerung > 200 mV für alle i-Schichtdicken.

- 2000 ppm Proben: Verkleinerung wächst mit der i-Schichtdicke auf maximal ca. 150 mV bei 10 nm.
- 4000 ppm Proben: Verkleinerung unabhängig von der i-Schichtdicke ca. 5 mV.

Diese Beobachtungen machen klar, dass die Bandverbiegung und die effektive Festladung in den groben Trends übereinstimmen, dass sich in den Details jedoch Unterschiede ergeben. Dies wird im folgenden Diskussionskapitel detaillierter analysiert.

6.1.4. Einfluss der ZnO Abscheidung auf das piN-Schichtsystem

Zur Kontaktierung des Emitters in der Solarzelle muss eine transparente leitende Schicht aufgebracht werden. Am HZB wird dazu typischerweise eine ZnO-Schicht eingesetzt. Auch das ZnO/a-Si:H/c-Si-System lässt sich mit QSSPC/PCD Messungen charakterisieren. In Abb. 6.6 sind die bereits diskutierten Schichten mit 5nm-i-Schicht und 1000 ppm sowie 4000 ppm vor ZnO-Deposition, nach ZnO-Deposition und nach einem Ätzprozess zur Entfernung der ZnO-Schicht zu sehen. Eine qualitative Analyse der Messungen macht deutlich, dass die ZnO-Schicht einen negativen Einfluss auf die Feldefektpassivierung hat, während sich die Lebensdauer bei einer Sonne, die die Leerlaufspannung bestimmt, nicht ändert. Auch deutet die qualitative Betrachtung der τ -Kurvenform darauf hin, dass die Deposition keinen negativen Einfluss auf die Defektdichte hat. Dies bestätigt sich bei Betrachtung der $\tau(\Delta n)$ -Kurve nach dem Entfernen der ZnO-Schicht. Hier nimmt die $\tau(\Delta n)$ -Kurve ihre ursprüngliche Form wieder an. Für die 4000 ppm Probe bleibt eine kleine Änderung bestehen, wobei dies auch mit dem nicht perfekten Ätzprozess erklärt werden kann.

6.1.5. Diskussion der Ergebnisse zum piN-Schichtstapel

Zu den Passiviermechanismen

Das Verhalten der Lebensdauer bei $\Delta n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ und der impliziten Leerlaufspannung mit Variation des Schichtsystems lässt sich mit Hilfe der Defektdichte und der effektiven Festladung im Rahmen von Defekt- und Feldefektpassivierung erklären. Dazu ist es hilfreich die Daten, die mit der CA-PCD Methode gewonnen wurden, in die mit ELifAnT berechneten τ und V_{oc} Konturgrafiken aus Abschnitt 5.5 einzuzichnen, Abb. 6.7.

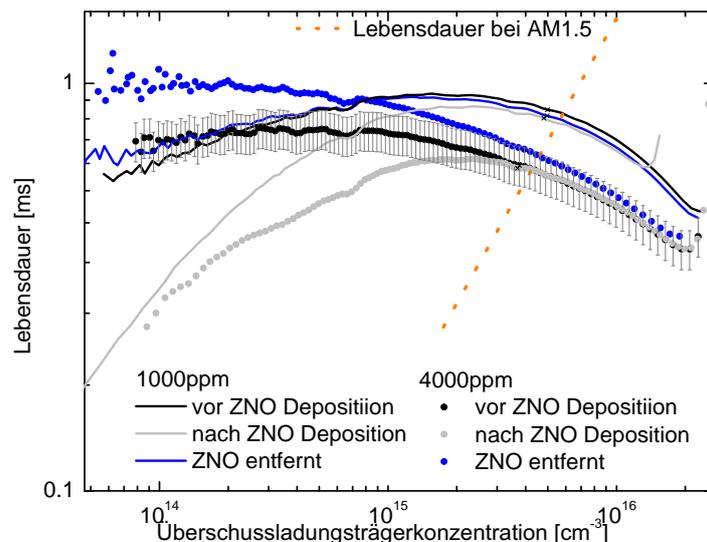


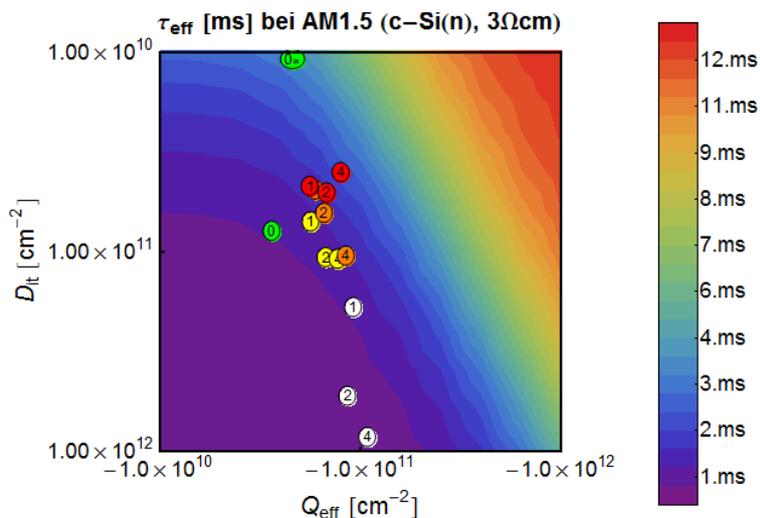
Abbildung 6.6.: QSSPC/PCD Messungen der a-Si:H(p)/a-Si:H(i)/c-Si(n) Proben mit 5nm-i-Schicht und zwei verschiedenen Emittersdotierungen (1000 ppm/4000 ppm) vor Deposition von ZnO, mit ZnO und nach dem Entfernen der ZnO-Schicht durch einen Ätzprozess. Die Lebensdauer bei AM1.5 markiert das Injektionsniveau, dass bei der Berechnung der impliziten Leerlaufspannung relevant ist (orange-gestrichelte Linie).⁸

Bereits in Abb. 6.4 wird deutlich, dass der Feldeffekt bei Proben mit i-Schicht kaum einen Einfluss auf die Lebensdauer bei einer Sonne und damit auf die Leerlaufspannung hat. Dies bestätigt sich bei der Auswertung in Abb. 6.5(b). Für die Proben mit i-Schicht bedeutet eine Vergrößerung der Defektdichte immer eine Absenkung der Leerlaufspannung unabhängig vom Verhalten der effektiven Festladung. Nur bei der Probe ohne i-Schicht hat auch der Feldeffekt einen Einfluss auf die Leerlaufspannung. Auch in der Konturgrafik Abb. 6.7(b) ist zu erkennen, dass die Proben mit 10nm-i-Schicht in einem Bereich liegen, indem die Leerlaufspannung sich kaum mit der Festladung ändern (Konturlinien laufen waagrecht), während die Proben ohne i-Schicht eher durch die Veränderung der effektiven Festladung beeinflusst werden können (Konturlinien laufen schräg). Die beste Probe hat eine 10nm-i-Schicht und 4000 ppm-Gasphasendotierung (Punkt: rot,4 in Abb. 6.7(b)) und liegt mit der impliziten Leerlaufspannung von $V_{oc}^{imp} = (714 \pm 5) \text{ mV}$ nahe am theoretischen Maximum von $V_{oc}^{imp} = (733 \pm 5) \text{ mV}$, das sich aus der Augerlimitierung für den $3 \Omega \text{ cm}$ n-Wafer ergibt.

Im Gegensatz zur Lebensdauer bei einer Sonne wird die Leerlaufspannung bei $\Delta n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ stark durch den Feldeffekt beeinflusst (Abb. 6.5). Ein extremes Beispiel sind die Proben mit 10nm i-Schicht. Die Lebensdauer wächst hier stark mit Erhöhung der Dotierung (siehe Abb. 6.5(a)). In Abb. 6.5 ist zu erkennen, dass die Feldefektpassivierung im Bereich, indem die Proben liegen, sehr sensitiv mit der effektiven Festladung steigt. Entsprechend lässt sich das Verhalten der anderen Proben verstehen.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass bei Schichtstapeln hoher Qualität die

(a)



(b)

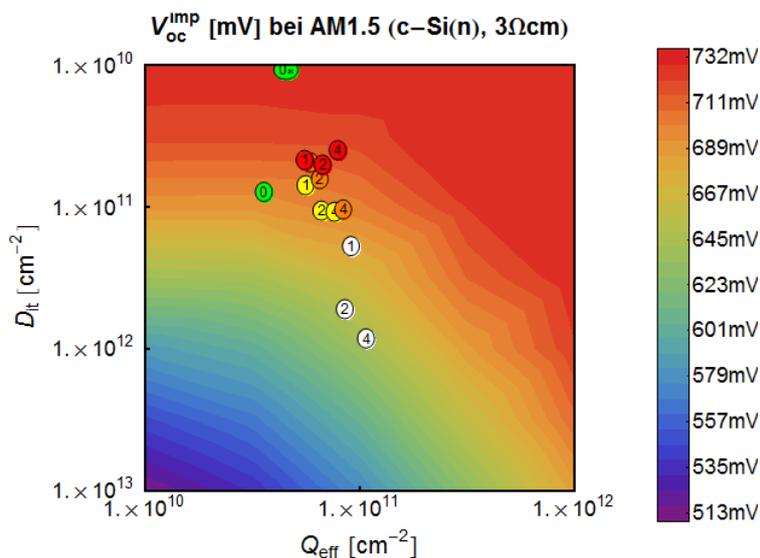


Abbildung 6.7.: Konturgrafiken der Lebensdauer bei $\Delta n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (a) und der impliziten Leerlaufspannung (b) in Abhängigkeit der Grenzflächendefektdichte und der effektiven Festladung berechnet mit ELifAnT. Als Punkte markiert sind die mit der CA-PCD Methode bestimmten Daten von a-Si:H(p)/a-Si:H(i)/c-Si(n) Schichtstapeln bei Variation der Emittendotierung und der i-Schichtdicke. Dabei ist die i-Schichtdicke farbkodiert: 0 nm weiße, 5 nm gelbe, 7 nm orange und 10 nm rote Punkte und Variation der Gasphasendotierung wird durch die Zahl im Punkt in der Einheit 1000ppm angegeben. Die reinen i-Schichten sind in grün eingezeichnet, wobei die Probe nach thermischer Nachbehandlung durch einen Stern gekennzeichnet ist.

Defektdichte an der Grenzfläche die Leerlaufspannung limitiert. Für die Solarzellencharakteristik ist jedoch auch die Feldeffektpassivierung entscheidend, die die Lebensdauer bei niedrigen Injektionsdichten bestimmt. Dies liegt daran, dass auch bei den j-U-Kennlinien verschiedene Injektionsniveaus durchlaufen werden. Hier wird des-

halb die These vertreten, dass eine hoher Feldeffekt den Füllfaktor verbessert. Dies wird auch in einer numerischen Simulationsstudie des Autors deutlich [40]. Der Zusammenhang zwischen $\tau(\Delta n)$ -Kurve und j-U-Kennlinie wird auch in der Literatur diskutiert, wobei aus QSSPC/PCD Messungen eine pseudo-j-V-Kennlinie berechnet wird [137, 138]. Um dies für den hier untersuchten Fall im Detail zu diskutieren, wären allerdings weitere Simulationsstudien mit AFORS-HET nötig.

Was die Analyse solcher QSSPC/PCD Daten betrifft ist festzustellen, dass sie nicht sinnvoll durch die Lebensdauer bei einem festen Injektionsniveau beschrieben werden können, da sich typischerweise Defekt- und Feldeffektpassivierung überlagern und keine feste Beziehung zur Leerlaufspannung besteht. Die Lebensdauer bei fester Beleuchtung mit AM1.5 hingegen, korreliert für gut passivierte Proben typischerweise mit der impliziten Leerlaufspannung und der Grenzflächendefektdichte. Bei dem Vergleich verschieden dotierter Wafer spielt jedoch der Einfluss der Dotierung eine Rolle, so dass hier die implizite Leerlaufspannung oder die per CA-PCD gewonnene Defektdichte verglichen werden müssen. Diese Schlussfolgerung gilt insbesondere auch für die SRV, die im QSSPC/PCD Messbereich über mehrere Größenordnungen variieren kann.

Zur Bandverbiegung

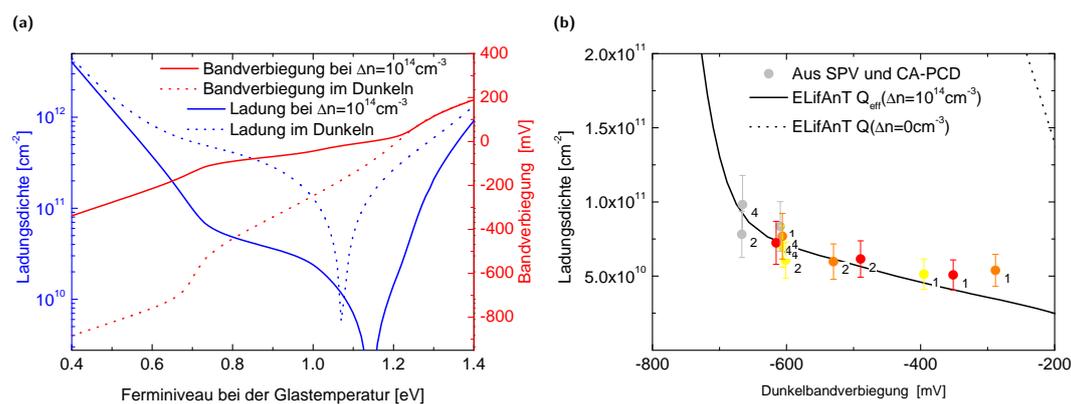


Abbildung 6.8.: Abb. (a) zeigt die a-Si:H-Ladung im Dunkeln und die effektive Ladung ($Q_{eff} = Q(\Delta n = 10^{14} cm^{-3})$) sowie die Dunkelbandverbiegung und die Bandverbiegung bei $\Delta n = 10^{14} cm^{-3}$ berechnet mit ELifAnT mit dem Modell $\tau(\Delta n, E_{F*}^{aSi}, D_{it})$ in Abhängigkeit des Fermi-niveaus bei der Glastemperatur unter Beachtung des Defekt-Pool-Modells. In Abb. (b) ist der sich daraus ergebende Zusammenhang zwischen Dunkelbandverbiegung und effektiver Festladung eingezeichnet und die mit der CA-PCD- und SPV-Methode bestimmten Daten für die a-Si:H(p)/a-Si:H(i)/c-Si(n) Struktur mit Variation der i-Schichtdicke (0 nm weiße, 5 nm gelbe, 7 nm orange und 10 nm rote Punkte) und Variation der Gasphasendotierung (Zahl an den Datenpunkten in 1000 ppm.)

Idealerweise kann in einem a-Si:H(p)/a-Si:H(i)/c-Si(n) System auf einem $3 \Omega cm$ Wafer eine Dunkelbandverbiegung im c-Si von $869 mV^9$ erzeugt werden. In den untersuchten Schichtstapeln wird jedoch selbst in den Proben ohne i-Schicht nur eine Dunkelbandverbiegung von $< 700 mV$ erreicht. Es wäre hier sinnvoll, die Ergebnisse

⁹Ein $3 \Omega cm$ Wafer hat eine Dotierung von $1.5 \times 10^{15} cm^{-3}$. Damit ergibt sich der Abstand zwischen Valenzband und Fermi-niveau zu $869 mV$.

mit einer weiteren Methode zu überprüfen, etwa mit der Bestimmung der koplanaren Leitfähigkeit, wie sie von Kleider et. al entwickelt wurde [94].

Der Zusammenhang zwischen effektiver Festladung und Dunkelbandverbiegung ist ausgesprochen kompliziert und erfordert ein Modell für die a-Si:H-Schicht, deren Einfluss in der bisherigen Auswertung durch ein effektive Festladung genähert wurde. Das Verhalten der Dunkelbandverbiegung und der $Q_{\text{eff}} = Q(\Delta n = 10^{14} \text{ cm}^{-2})$ in Abhängigkeit von den Parametern des Schichtstapels wurde anhand von Abb. 6.5(c) bereits erläutert. Dabei konnte festgestellt werden, dass diese zwar im Groben dieselben Trends zeigen, sich aber im Detail unterscheiden. Das liegt daran, dass sich die a-Si:H-Defekte in Abhängigkeit von der Injektionsdichte umladen, wie es auch schon in Abschnitt 5.3 diskutiert wurde. In Abb. 6.8 wurde die a-Si:H-Ladung im Dunkeln und die effektive Ladung ($Q_{\text{eff}} = Q(\Delta n = 10^{14} \text{ cm}^{-2})$) sowie die Dunkelbandverbiegung und die Bandverbiegung bei $\Delta n = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ mit Hilfe von ELifAnT mit dem Modell $\tau(\Delta n, E_{\text{F}^*}^{\text{aSi}}, D_{\text{it}})$ in Abhängigkeit von der Lage des Fermineiveaus bei der Glastemperatur unter Beachtung des Defekt-Pool-Modells berechnet. Dabei wurden die a-Si:H-Parameter in Tab. 3.2 und die Defekt-Pool Parameter aus Abschnitt 3.1.2 bzw. [59] verwendet.

In Abb. 6.8(a) wird nochmals verdeutlicht, dass es einen Unterschied zwischen dem Ladungszustand der a-Si:H-Schicht unter Beleuchtung und dem Ladungszustand im QSSPC/PCD -Messbereich gibt. Des weiteren wird klar, dass auch in diesem Injektionsbereich typischerweise eine Restbandverbiegung bestehen bleibt, die für die Feldeffektpassivierung verantwortlich ist. Um die CA-PCD- und SPV-Ergebnisse konsistent beschreiben zu können, ist in Abb. 6.8(b) die effektive Festladung gegen die Bandverbiegung aufgetragen worden, und es zeigt sich, dass die Messpunkte bis auf einen Punkt mit der theoretischen Kurve übereinstimmen. Im Gegensatz dazu liegt die theoretische Kurve, die die Ladung im Dunkeln beschreibt, weit außerhalb der Messpunkte. Dies bedeutet, dass die theoretisch vorhergesagte Umladung auch experimentell bestätigt werden konnte.

Es ist in Abb. 6.8(b) auch zu erkennen, dass die Feldeffektpassivierung stark anwächst, wenn die Dunkelbandverbiegung auf 700 mV erhöht werden kann. Auch unter diesem Gesichtspunkt erscheint es besonders vorteilhaft zu sein, höhere Dunkelbandverbiegungen zu erreichen. Da die injektionsabhängige Umladung der Defekt stark von der Defektdichte, Defektverteilung und den Bandoffsets abhängt, wäre es sehr interessant, wie die Feldeffektpassivierung durch das Design der Volumeneigenschaften der a-Si:H-Schicht weiter verbessert werden kann. Eine Studie dazu könnte mit dem ELifAnT unter den genannten Vereinfachungen durchgeführt werden.

Allerdings stellt auch das ELifAnT mit dem Modell $\tau(\Delta n, E_{\text{F}^*}^{\text{aSi}}, D_{\text{it}})$ eine Vereinfachung der tatsächlichen Situation dar. So wurde bei dieser Rechnung die i-Schicht noch nicht explizit berücksichtigt, sondern eine effektive a-Si:H-Schicht angenommen. Für die a-Si:H-Schicht wurde dabei eine Dicke von 15 nm angenommen und für die Grenzflächendefektdichte 10^{11} cm^{-3} . Diese Größen sind als Mittelwerte der Probenserie anzusehen. Somit stellen die gezeigte theoretischen Daten in Abb. 6.8 eine starke Vereinfachung dar und dienen hier nur zur Veranschaulichung der groben Zusammenhänge. Eine Weiterentwicklung dieses semi-analytischen Modells erscheint hier nur bedingt sinnvoll, da sich durch den erhöhten Rechenaufwand und die Vielzahl der eingehenden Parameter kaum Vorteile gegenüber der numerischen Simulation

ergeben. Es wäre insofern sinnvoller, AFORS-HET zu erweitern, um die Rekombination über korrelierte amphotere Defekte und die Defektdichte in Abhängigkeit des Fermi-niveaus entsprechend dem Defekt-Pool-Modell berechnen zu können.

Zur Defektdichte

Es ist nicht möglich, im Schichtsystem mit Emitterschichten Defektdichten zu erreichen, wie sie bei der Passivierung nur mit einer i-Schicht möglich sind. Darüber hinaus erhöht sich die Defektdichte bei Erhöhung der Emitterdotierung. Diese Ergebnisse entsprechen dem Kenntnisstand in der Literatur [93, 96, 97].

Mit der i-Schicht ist eine Erhöhung der Defektdichte mit der Emitterdotierung nicht eindeutig zu bestätigen. Die Erhöhung der Defektdichte ist bei der 5 nm-Schicht kleiner als der Fehler und somit nicht signifikant, bei 7 nm ist eine signifikante Erhöhung festzustellen und bei 10 nm findet keine Erhöhung mehr statt. Um hier einen deutlichen experimentellen Nachweis zu bringen, ist ein kleinerer Fehler und eine bessere Probenstatistik nötig.

Die Beobachtungen zur Defektdichte in Abhängigkeit der Emitterdotierung können so interpretiert werden, dass es ähnlich wie im Volumen auch bei den Defekten an der Grenzfläche zu einer Defektequilibration in Abhängigkeit vom Fermi-niveau entsprechend den prinzipiellen Zusammenhängen des Defekt-Pool-Modell kommt. Bei der Emitterdeposition ändert sich die Lage des Fermi-niveaus an der Grenzfläche und wird näher an die Bandkanten geschoben. Dies könnte entsprechend dem Defekt-Pool-Modell zu einer Verschiebung und Erhöhung der Defektdichte an der Grenzfläche führen (ähnlich wie in Abb. 5.12(a) und (b)).

Diese Argumentation liefert die Motivation, die Defekte an der Grenzfläche durch Projektion der Defektdichte im Volumen auf die Grenzfläche zu berechnen, wie es in der Literatur diskutiert wird [45, 123]. Die Berechnung dieses Modellsystem ist mit ELifAnT möglich und erste Studien wurden in Abschnitt 5.4 gezeigt. Es wäre sehr interessant, dieses Modell an die experimentellen Ergebnisse anzupassen und die Änderung der Defektdichte in Abhängigkeit der hier gemessenen Dunkelbandverbiegung darzustellen. Es ergeben sich allerdings im Detail sehr komplizierte Zusammenhänge, insbesondere da auch ein exaktes Modell zur Kopplung von Volumendefekten an die Grenzfläche über Tunnelprozesse entwickelt werden müsste.

Da erste Ergebnisse darauf hindeuten, dass diese eine Equilibration der Grenzflächendefekte in Abhängigkeit vom den Fermi-niveaus ergeben, könnte sich ein Nachtempern unter geeigneter Vorspannung positiv auswirken.

Zum ZnO-Frontkontakt

Diese Messungen am ZnO/a-Si:H/c-Si-System zeigen, dass der ZnO-Frontkontakt die Feldeffektpassivierung verschlechtert. Die ZnO-Austrittsarbeit ist also nicht gut an das a-Si:H(p)/a-Si:H(i)/c-Si(n) System angepasst ist und somit die emitterseitige Bandverbiegung abschwächt. Diese Deutung legt nahe, dass die ZnO-Schicht in Bezug auf ihre Austrittsarbeit optimiert werden, beziehungsweise durch einen alternativen Frontkontakt ersetzt werden muss.

6.2. Untersuchung des niP-Schichtsystems

6.2.1. Probendetails der niP-Strukturen

Als Absorbermaterial für die a-Si:H(n)/a-Si:H(i)/c-Si(p) -(niP)-Strukturen werden 200 μm dicke, polierte, hochreine p-Typ Siliziumwafer eingesetzt. Die Wafer sind mit Bor dotiert und haben eine Leitfähigkeit von ca. $1\ \Omega\text{cm}$, was einer Donatorkonzentration von $N_D = 1.5 \times 10^{16}\ \text{cm}^{-3}$ entspricht. Zur Entfernung von Verunreinigungen und Oxidschicht wurden die Wafer vor der a-Si:H-Deposition einer RCA-Reinigung und einem Ätzprozess in 1 %-Flusssäure unterzogen. Die a-Si:H-Schichten wurden in einem PECVD-System deponiert. Eine ähnliche Variation wie für die a-Si:H(p)/a-Si:H(i)/c-Si(n) Serie wurde auch für die hier diskutierte a-Si:H(n)/a-Si:H(i)/c-Si(p) Serie untersucht. Die i-Schichtdicke wurde in drei Schritten (0 nm, 5 nm, 7 nm) und die Emitterdotierung ebenfalls in drei Schritten (1000 ppm, 2000 ppm, 4000 ppm) variiert. Wiederum wurden beidseitig passivierte Proben für die QSSPC/PCD -Messungen und einseitig passivierte Proben für die SPV-Messungen hergestellt.¹⁰

6.2.2. CA-PCD und SPV Charakterisierung des niP-Schichtstapels

Im Folgenden werden QSSPC/PCD- und SPV-Messungen an niP-Schichtstapeln sowie einzelnen i-Schichten untersucht. Ziel ist es wiederum, durch Variation der Emitterdotierung und der i-Schichtdicke ein optimales System mit möglichst geringer Grenzflächendefektdichte bei hoher Dunkelbandverbiegung zu finden. Die QSSPC/PCD -Messungen sowie die mit dem ELifAnT $\tau(\Delta n, Q_{\text{eff}}, D_{\text{it}})$ Modell berechneten Kurven sind in Abb. 6.9 zu sehen. Ebenfalls eingezeichnet ist die Augerrekombination, berechnet nach Gl. (2.29), und die Gerade, die die Lebensdauer bei Beleuchtung mit AM1.5 festlegt, Gl. (5.26). Darüber hinaus ist die Volumenlebensdauer eingezeichnet, die sich aus Augerrekombination und SRH-Rekombination im Wafer ergibt. Die Diffusionslänge (1.5mm) und damit die Volumenlebensdauer (2 ms) wurde mit Hilfe der Goodman-Methode bestimmt [139]. Prinzipiell ist zu erkennen, dass die Lebensdauer bei V_{oc} -Bedingungen (Beleuchtung mit AM1.5) schon fast am Augerlimit liegt und dass sich kaum Optimierungspotential ergibt.

Trotzdem sollen die Kurven analog zur Diskussion der Kurven des a-Si:H(p)/a-Si:H(i)/c-Si(n) Stapels qualitativ anhand der τ -Kurvenform diskutiert werden. Für die Proben ohne i-Schicht ist wiederum eine Abnahme der Defektpassivierung durch die zunehmende Dotierung zu erkennen. Der Einfluss der Defektpassivierung ist qualitativ nicht zu erkennen. Die Proben nur mit i-Schicht haben etwas kleinere Lebensdauern als die Proben mit i-Schicht und Emitter. Im Niedriginjektionsbereich erhöht sich die Lebensdauer der Proben mit Emitterschicht stark, was mit der Feldeffektpassivierung erklärt werden kann. Bei Erhöhung der Emitterdotierung nehmen die Lebensdauern der Proben mit 5 nm-i-Schicht wieder etwas ab. Eine qualitative Betrachtung deutet auf eine Erhöhung der Defektdichte hin. Die Details werden im Folgenden anhand der quantitativen Analyse genauer diskutiert.

In Abb. 6.10 ist die gemessene Lebensdauer bei $\Delta n = 10^{15}\ \text{cm}^{-3}$ und die aus der

¹⁰Serienplanung und Deposition T. Schulze, HZB interner Serienname: TS23. Details zur Deposition in [45].

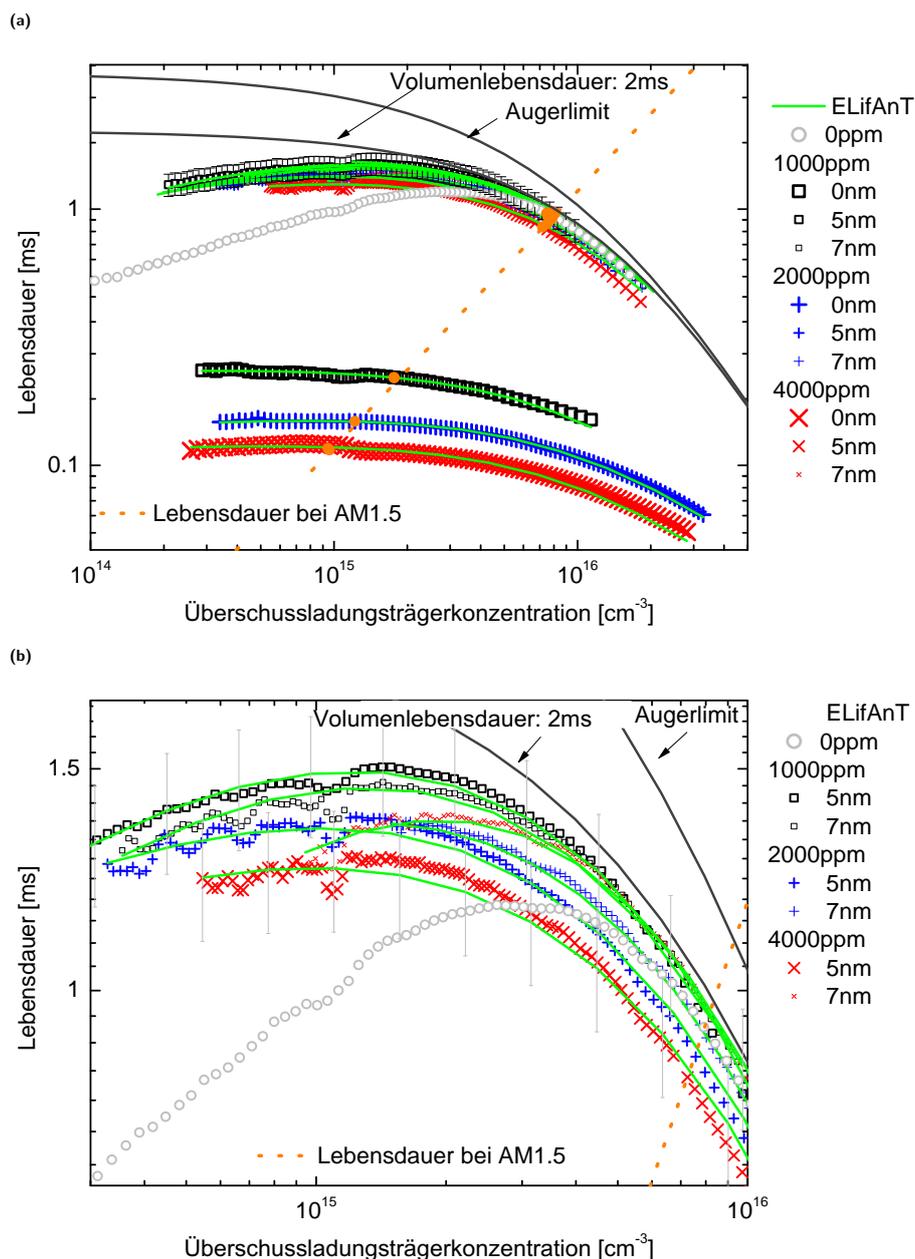


Abbildung 6.9.: QSSPC/PCD -Messungen und mit dem ELifAnT $\tau(\Delta n, Q_{\text{eff}}, D_{\text{it}})$ Modell berechnete $\tau(\Delta n)$ -Kurve von a-Si:H(n)/a-Si:H(i)/c-Si(p) Schichtstapeln mit Variation der Emittierdotierung und der i-Schichtdicke. Weiterhin ist die Augerlebensdauer eingezeichnet, die die Obergrenze, für die Lebensdauer darstellt, sowie die Gerade, auf der die Lebensdauer bei einer Sonne liegt. Abb. (b) zeigt eine Vergrößerung des Ausschnitts, in dem die Proben mit i-Schicht liegen.

gemessene Lebensdauer bei einer Sonne berechnete implizite Leerlaufspannung eingezeichnet. Diese experimentellen Daten werden durch die mit der CA-PCD-Methode bestimmte Defektdichte und effektive Festladung ergänzt. Zusätzlich zu den Daten, die aus den QSSPC/PCD -Messungen gewonnen wurden, ist die Dunkelbandver-

biegung eingezeichnet, die mit der SPV-Methode bestimmt wurde. Die Fehler der QSSPC/PCD -Messung und CA-PCD-Methode ergeben sich genauso, wie schon bei der Auswertung des a-Si:H(p)/a-Si:H(i)/c-Si(n) Schichtstapels erörtert wurde.

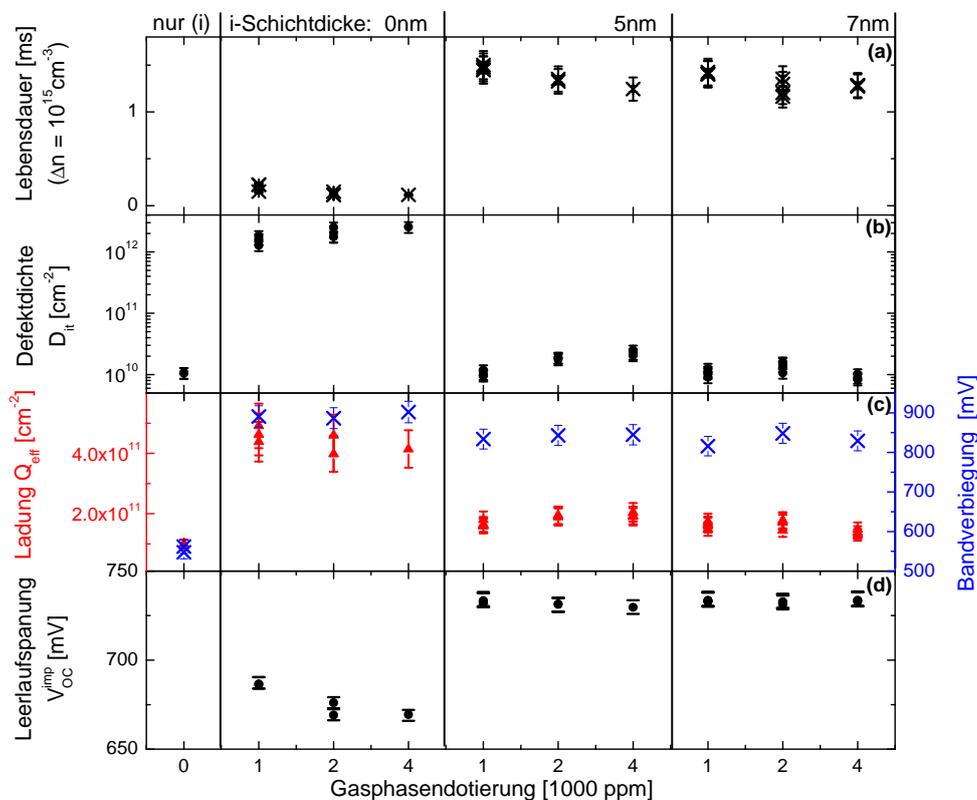


Abbildung 6.10.: QSSPC/PCD -Lebensdauer bei $\Delta n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (a), mit Hilfe der CA-PCD-Methode aus den experimentellen $\tau(\Delta n)$ -Kurven bestimmte Defektdichte (b) und effektive Festladung (c), sowie aus der gemessenen Lebensdauer berechnete implizite Leerlaufspannung (d). Die aus den QSSPC/PCD -Messungen gewonnenen Daten werden durch SPV-Messungen der Dunkelbandverbiegung ergänzt (c). Gezeigt sind Daten von a-Si:H(n)/a-Si:H(i)/c-Si(p) -Schichtstapeln bei Variation der Emitterdotierung und der i-Schichtdicke, sowie von einem nur mit i-Schicht passivierten Wafer. Die Datenpunkte, die mehrfach vorhanden sind, stammen von Mehrfachmessungen (Vorder- und Rückseite) der identischen Proben.

In Bezug auf die Defektdichte können folgende Schlüsse gezogen werden:

- Durch den Einbau einer i-Schicht kann die Defektdichte stark reduziert werden.
- In Proben ohne i-Schicht steigt die Defektdichte mit wachsender Emitterdotierung.
- Dieser negative Effekt der Dotierung wird durch die i-Schicht stark abgeschwächt, ist ist bei einer i-Schichtdicke von 7 nm nicht mehr zu beobachten.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass das Aufbringen eines Emitters trotz i-Pufferschicht die Grenzflächendefektdichte negativ beeinflusst. Dies entspricht den

Ergebnissen für das a-Si:H(p)/a-Si:H(i)/c-Si(n) -System und dem Kenntnisstand in der Literatur [93, 96, 97].

Da schon bei einer Emitterdotierung von 1000 ppm eine hohe Bandverbiegung im System erzeugt werden kann scheint hier eine i-Schichtdicke von nur 5nm optimal zu sein. Diese Ergebnisse werden im folgenden Diskussionskapitel weiter analysiert.

In Bezug auf die Bandverbiegung und die effektive Festladung können folgende Schlüsse gezogen werden:

- Mit Erhöhung der Gasphasendotierung von 1000 ppm auf 4000 ppm erhöht sich Bandverbiegung und effektive Festladung nicht signifikant.
- Die Dunkelbandverbiegung verringert sich durch den Einbau einer i-Schicht, allerdings nur geringfügig im Rahmen des Messfehlers.
- Die effektive Festladung verringert sich durch den Einbau einer i-Schicht deutlich.

Diese Beobachtungen machen klar, dass die Bandverbiegung und die effektive Festladung in den groben Trends übereinstimmen. Dass sich hier jedoch im Detail Unterschiede ergeben können, wurde schon anhand des a-Si:H(p)/a-Si:H(i)/c-Si(n) -Schichtstapels diskutiert.

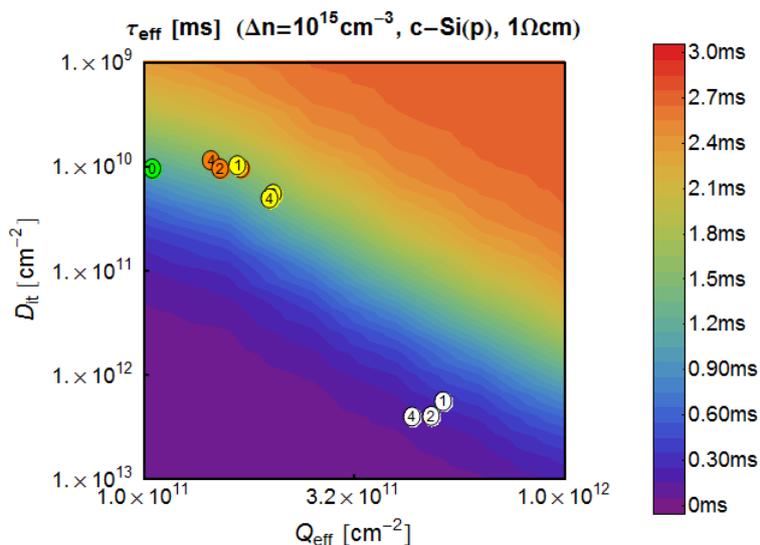
6.2.3. Diskussion zur piN-Struktur

Trägt man die mit der CA-PCD-Methode gewonnenen Daten in die mit ELifAnT berechneten τ und V_{oc} Konturgrafiken Abb. 6.11 ein, so wird deutlich, dass die implizite Leerlaufspannung durch Einbau der i-Schicht durch Absenkung der Defektdichte in den Bereich der Augerlimitierung verschoben wird (Abb. 6.7(b)). Die besten Proben mit 5 nm und 7 nm-i-Schicht und 1000 ppm (gelb 1 und orange 1 in Abb. 6.11 (b)) überlagern sich und ermöglichen Leerlaufspannungen von $V_{oc}^{imp} = (733 \pm 5) \text{ mV}$. Sie sind damit am theoretischen Maximum für den 200 μm , 1 Ωcm p-Typ Wafer, welches entsprechend den Rechnungen in Abb. 5.16 $V_{oc}^{impMax} = (739 \pm 5) \text{ mV}$ beträgt. Die anderen Proben mit i-Schichten haben vergleichbare implizite Leerlaufspannungen mit Abweichungen, die im Rahmen der Fehler nicht signifikant sind. Eine weitere Optimierung dieser Schichtstapel in Hinblick auf die Leerlaufspannung ist somit nicht mehr möglich. Die Leerlaufspannung lässt sich nur noch durch Verbesserung der Lichteinkopplung oder durch Verringerung der Waferdotierung erhöhen. Durch die Verringerung der Dotierung verringert sich die Augerrekombination und effektiv sind dadurch höhere Leerlaufspannungen möglich Abb. 5.16. Diese Strategie erscheint aber nicht sehr erfolgversprechend, da der Gewinn nur gering ist (siehe Abb. 5.16).

In der Konturgrafik Abb. 6.7(a) ist zu erkennen, dass die Lebensdauer bei $\Delta n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ sowohl durch Feldeffektpassivierung als auch durch Defektpassivierung weiter verbessert werden kann. Nur bei diesem niedrigeren Injektionsniveau spielt also auch die Feldeffektpassivierung eine Rolle.

Die mit SPV bestimmte Bandverbiegung beträgt bei den Proben ohne i-Schicht maximal $\Delta\varphi_{\text{dark}} = (900 \pm 30) \text{ mV}$ und bei den Proben mit i-Schicht maximal $\Delta\varphi_{\text{dark}} = (850 \pm 30) \text{ mV}$ und ist damit nahe dem theoretischen Maximum von $\Delta\varphi_{\text{dark}}^{\text{max}} = 930 \text{ mV}$,

(a)



(b)

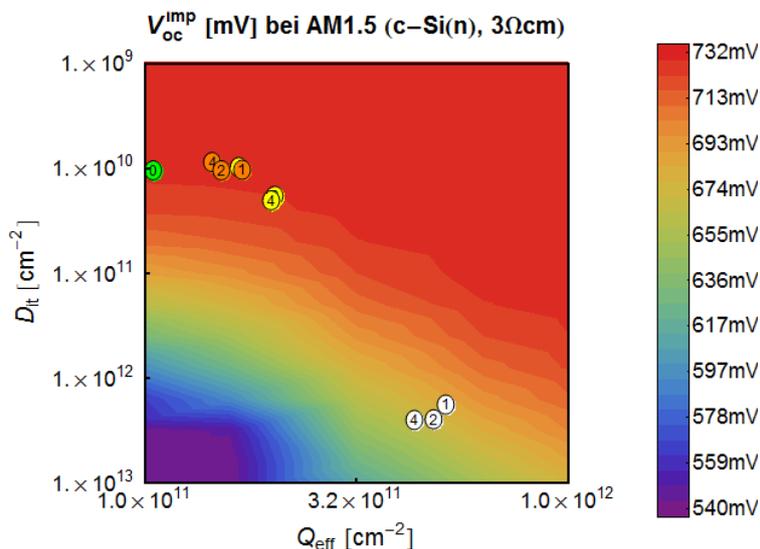


Abbildung 6.11.: Konturgrafiken der Lebensdauer bei $\Delta n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (a) und der impliziten Leerlaufspannung (b) in Abhängigkeit der Grenzflächendefektdichte und der effektiven Festladung berechnet mit ELifAnT. Als Punkte markiert sind die mit der CA-PCD-Methode bestimmten Daten von a-Si:H(n)/a-Si:H(i)/c-Si(p)-Schichtstapeln bei Variation der Emittersdotierung und der i-Schichtdicke. Dabei ist die i-Schichtdicke farbkodiert: 0 nm weiße, 5 nm gelbe, 7 nm orange Punkte und Variation der Gasphasendotierung wird durch die Zahl im Punkt in der Einheit 1000 ppm angegeben. Die grünen Punkte markieren die Schichtsysteme nur mit i-Schicht.

das sich für den 1 Ωcm p-Typ Wafer ergibt.¹¹ Die hohen Dunkelbandverbiegungen in Kombination mit den hohen impliziten Leerlaufspannungen ermöglichen den Einsatz

¹¹Ein 1 Ωcm-Wafer hat eine Dotierung von $1.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Damit ergibt sich der Abstand zwischen Valenzband und Fermi-niveau zu 930 mV.

dieses Schichtsystems als Emitter für Solarzellen mit hohen potentiellen Leerlaufspannungen von bis zu $V_{oc}^{imp} = (733 \pm 5)mV$ nahe am theoretischen Augerlimit von $V_{oc}^{impMax} = (739 \pm 5)mV$

Der Zusammenhang zwischen Dunkelbandverbiegung und effektiver Festladung ist hier nicht sehr aufschlussreich, da die Emitterdotierung unabhängig vom der i-Schicht keinen signifikanten Einfluss auf die Bandverbiegung und die effektive Festladung hat. Für die prinzipiellen Zusammenhänge sei auf die Diskussion der Bandverbiegung des a-Si:H(p)/a-Si:H(i)/c-Si(n) -Schichtsystems verwiesen. Es deutet sich an, dass hier aus material-physikalischen oder depositions-technischen Gründen eine Grenze erreicht ist. Zumindest für die Proben ohne i-Schicht ist das theoretische Limit unter Berücksichtigung des Messfehlers bereits erreicht.

Weiterhin fällt auf, dass die maximale Bandverbiegung mit i-Schicht sowohl für den p-Typ Wafer als auch für den n-Typ Wafer gut 50mV unter der maximalen Bandverbiegung ohne i-Schicht liegt, so dass deutlich wird, dass die i-Schicht einen Teil der Bandverbiegung abbaut. Ähnliche Beobachtungen können für die effektive Festladung gemacht werden.

6.3. Vergleich des niP- und piN-Schichtsystems

Abschließend sollen die jeweils besten Proben auf n-Typ und p-Typ Wafer verglichen werden Tab. 6.1. Obwohl die Ladungsträgerlebensdauern der n-Wafer Proben sowohl bei $\Delta n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ als auch bei Beleuchtung mit AM1.5, höhere Werte für den n-Wafer zeigt, ist das System auf p-Wafern, in der hier vorgestellten Konfiguration, dem System auf n-Wafern überlegen, was die implizite Leerlaufspannung betrifft.

Dies liegt daran, dass die Leerlaufspannung mit der Dotierung des Wafers wächst. Zusätzlich besteht ein Vorteil für die p-Wafer-Proben durch die deutlich höhere Bandverbiegung. Weiterhin besteht ein Vorteil darin, dass die besten Ergebnisse auf p-Wafer-Proben auch bei einer dünnen i-Schicht von nur 5 nm erreicht werden, während die beste Probe auf n-Wafern eine 10 nm dicke i-Schicht hat. Die dünne i-Schicht sorgt in der fertigen Zelle für einen geringeren Serienwiderstand und eine geringere parasitäre Absorption. Die Unterschiede, die sich bei Variation der Parameter i-Schichtdicke und Gasphasendotierung des Schichtstapels auf p-Wafern ergeben, sind klein, so dass hier eine gewisse Freiheit der Parameterwahl besteht. Eventuell könnten sogar noch dünnere i-Schichten eingesetzt werden.

Diese Betrachtung macht auch deutlich, dass für einen Vergleich von Schichtsystemen auf verschiedenen dotierten Absorbieren die implizite Leerlaufspannung, Defektdichte und effektive Festladung bestimmt werden müssen. Weder die Ladungsträgerlebensdauer bei $\Delta n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ noch die bei Beleuchtung mit AM1.5 ist geeignet, die Grenzflächenpassivierung von Proben mit unterschiedlichen Absorbieren zu vergleichen.

6.4. Zusammenfassung der Ergebnisse

In diesem Kapitel wurden a-Si:H(p,n)/a-Si:H(i)c-Si(n,p) Schichtstapel, der als Emitterkontakt der HIT Solarzelle eingesetzt wird, untersucht. Durch Variation der i-

Tabelle 6.1.: Vergleich der besten Emitterstrukturen auf n- und p-Typ Wafer

| | | n-Typ (3 Ωcm) | p-Typ (1 Ωcm) |
|--|------------|--------------------------------------|--------------------------------------|
| Dotierung | | $1.5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ | $1.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ |
| optimaler Schichtstapel | | 10 nm/4000 ppm | 5 nm/1000 ppm |
| Lebensdauer@ $\Delta n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ | QSSPC/PCD | 2.28 μs | 1.24 μs |
| Lebensdauer@AM1.5 | QSSPC/PCD | 1.24 μs | 0.85 μs |
| Leerlaufspannung | QSSPC/PCD | (714 \pm 5) mV | (733 \pm 5) mV |
| Leerlaufspannung | theo. Max. | (733 \pm 5) mV | (739 \pm 5) mV |
| Bandverbiegung | SPV | (620 \pm 30) mV | (850 \pm 30) mV |
| Bandverbiegung | theo. Max. | 869 mV | 930 mV |
| Defektdichte [$10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$] | CA-PCD | (4.0 \pm 0.9) | (1.0 \pm 0.2) |
| effektive Festladung [10^{10} cm^{-2}] | CA-PCD | -(7.2 \pm 0.8) | +(16 \pm 2) |

Schichtdicke und der Emitterdotierung sollte das System insbesondere in Hinblick auf die implizite Leerlaufspannung optimiert werden. Die Rekombination und die implizite Leerlaufspannung wurde mit QSSPC/PCD und die Dunkelbandverbiegung mit SPV-Messungen untersucht. Durch Analyse der QSSPC/PCD Messungen mit Hilfe der CA-PCD-Methode wurden weiterhin Defektdichten und effektive Festladungen an der a-Si:H/c-Si -Grenzfläche bestimmt.

Passivierqualität der untersuchten Emitterschichtsysteme

Es zeigt sich, dass die Grenzflächenpassivierung mit einer reinen i-Schicht auf beiden Wafertypen vergleichbare Qualität hat und Defektdichten von $D_{it} \approx 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ ermöglicht.

Die Defektdichte ohne i-Schicht und mit Emitter ist auf beiden Systemen über eine Größenordnung schlechter und verschlechtert sich mit der steigender Emitterdotierung.

Durch den Einbau einer i-Schicht kann der negative Einfluss des Emitters auf die Defektdichte teilweise kompensiert werden. Das Schichtsystem mit i-Pufferschicht auf p-Wafer ist dem System auf n-Wafer, in der hier untersuchten Konfiguration, überlegen. Dies betrifft die implizite Leerlaufspannung, die Dunkelbandverbiegung, die Defektdichte und die effektive Festladung.

Der bezüglich der impliziten Leerlaufspannung optimale Schichtstapel bei möglichst dünner i-Schicht ermöglicht auf einem p-Typ Wafer im wesentlichen aufgrund der geringeren Defektdichten $D_{it} = (1.0 \pm 0.2)10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ eine Leerlaufspannung von (733 \pm 5) mV.

Die Grenzflächendefektdichten der besten Probe auf n-Typ Wafern hingegen liegen bei $D_{it} = (4.0 \pm 0.9)10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ und es ergibt sich eine Leerlaufspannung von maximal (714 \pm 5) mV. Auch für andere Kombinationen von Emitterdotierung und i-Schichtdicke ist das System auf p-Wafern aufgrund geringerer Defektdichten überlegen.

Optimierungsstrategien für die untersuchten Emitterschichtsysteme

Das System auf p-Wafern ermöglicht aufgrund der geringen Defektdichte und der hohen Bandverbiegung Rekordzellen mit Leerlaufspannungen > 730 mV. Die Leerlaufspannung wird im wesentlichen durch die Augerrekombination und die Waferqualität

limitiert.

Das System auf n-Wafern erlaubt keine Rekordzellen. Da die Augerlimitierung noch nicht erreicht ist, kann durch Absenken der Defektdichte die Leerlaufspannung erhöht werden. Ein Problem besteht in der Bandverbiegung, die bei der Probe mit maximaler impliziter Leerlaufspannung nur 620 mV beträgt. Die Bandverbiegung der Zelle könnte jedoch durch Kontakte und die BSF-Schicht erhöht werden. Durch eine BSF-Schicht könnte auf dem 3 Ω cm Wafer eine Bandverbiegung an der Zellrückseite von maximal 255 mV eingebaut werden. Der eingesetzte ZnO-Frontkontakt hingegen scheint die der emitterseitige Bandverbiegung abzuschwächen.

Allgemeine Ergebnisse zur der CA-PCD-Methode

Es ergibt sich eine sehr gute Übereinstimmung zwischen experimentellen Daten und Modellrechnungen. Die theoretisch vorhergesagten charakteristischen Einflüsse von Defekt- und Feldeffektpassivierung konnten auch im Experiment beobachtet werden. So ist es möglich den Einfluss der beiden Passiviermechanismen auf die Grenzflächenrekombination und die Leerlaufspannung in Abhängigkeit der Variationen des Schichtsystems zu unterscheiden.

Die Lebensdauer bei der Überschussladungsträgerkonzentration $\Delta n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ hingegen ist nicht aufschlussreich, da sich typischerweise Feld- und Defektpassivierung bei unterschiedlichen Injektionsniveaus unterschiedlich stark überlagern und im allgemeinen keine direkte Beziehung zur Defektdichte oder zur impliziten Leerlaufspannung besteht. Die Analyse der Lebensdauer bei einer Sonne korreliert für gut passivierte Proben mit identischem Absorber gut mit der Defektdichte. Für einen Vergleich von Strukturen auf verschiedenen dotierten Absorbern oder mit schlecht passivierten Grenzflächen müssen die implizite Leerlaufspannung, Defektdichte und effektive Festladung bestimmt werden.

Wie bereits theoretisch vorhergesagt wurde, zeigt sich auch in den mit der CA-PCD gewonnenen Ergebnissen, dass es zu einer injektionsabhängigen Umladung der Defekte in der amorphen Schicht kommt. Es wäre somit vorteilhaft, in zukünftigen Untersuchungen das verbesserte ELifAnT Modell $\tau(\Delta n, E_{\text{F}^*}^{\text{aSi}}, D_{\text{it}})$ einzusetzen.

7. Rekombinationsprozesse in der poly-Si-Dünnschichtsolarzelle

In diesem Kapitel wird die poly-Si-Dünnschichtzelle untersucht, die mit Leerlaufspannungen von ca. 500 mV eine Effizienz von bis zu 10 % erreicht. Ziel ist es wiederum, ein Verständnis für die Rekombinationsprozesse zu entwickeln, die die Leerlaufspannung limitieren. Dazu werden zum einen j-V-Kennlinien von Minimodulen untersucht und zum anderen werden Lebensdauermessungen an Absorberschichten durchgeführt.

Im Gegensatz zur waferbasierten a-Si:H/c-Si -Zelle, deren Details in der Literatur schon zu großen Teilen beschrieben wurden, ist die poly-Si-Zelle ein System mit vielen unbekanntem Materialeigenschaften. Weiterhin ist die experimentelle Untersuchung sowie die Modellierung wesentlich anspruchsvoller als bei der a-Si:H/c-Si -Zelle, insbesondere da hier dünne Schichten untersucht werden müssen, die aufgrund der Korngrenzen laterale Inhomogenitäten aufweisen. Um ein Verständnis für die Zelle zu entwickeln, werden zunächst j-V-Kennlinien mit Hilfe von numerischen Simulationen analysiert. Das Ziel besteht darin, effektive Absorberdefektdichten abzuschätzen und ein stark vereinfachendes Simulationsmodell der Zelle zu entwickeln. Mit Hilfe des Simulationsmodells wird dann eine Sensitivitätsanalyse durchgeführt, um optimierte Zellstrukturen und Effizienz-kritische Zellparameter zu identifizieren.

Bei der Bestimmung der Ladungsträgerlebensdauer mit QSSPC/PCD -Messungen ist vor allem die geringe Signalstärke aufgrund der geringen Dicke der Schicht, an die die Messung ankoppelt, ein Problem. Weiterhin setzt die mit der geringeren Materialqualität einhergehende kleine Ladungsträgerlebensdauer eine hohe zeitliche Auflösung bei der Messung voraus. Es wird gezeigt, dass der hochsensitive PCD-Aufbau (HS-PCD), der im Kapitel zu den experimentellen Methoden vorgestellt wurde, Lebensdauermessungen an diesen dünnen Schichten ermöglicht. Mit Hilfe von numerischen Simulationen gelingt ein qualitatives Verständnis dieser Messungen. Die in diesem Kapitel präsentierten Ergebnisse wurden zum Teil in der Masterarbeit von A.-M. Teodoreanu erarbeitet, die im Rahmen dieser Doktorarbeit betreut wurde.

7.1. Ein einfaches Modell für die poly-Si-Zelle

Das Zellkonzept für die poly-Si-Zelle sowie die Materialeigenschaften von poly-Si wurden im Kapitel 3 vorgestellt und sollen nun zusammen mit dem vereinfachendem Ansatz für die numerischen Simulation diskutiert werden.

Die Komplexität der poly-Si-Zelle

Die hier untersuchten Zellen haben eine Superstratkonfiguration, wie sie in Modulen von CSG-Solar eingesetzt wird [3] (siehe Abb. 7.1). Dabei bildet eine SiN_x -

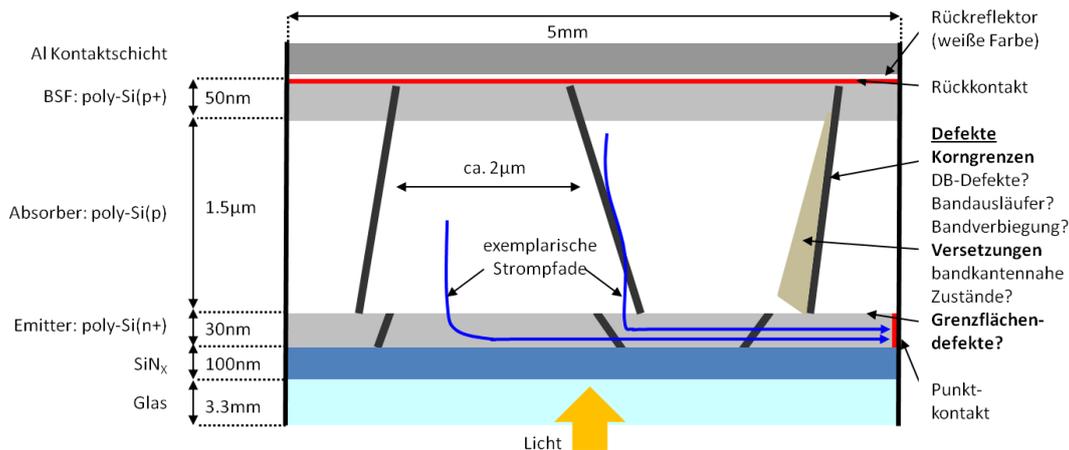


Abbildung 7.1.: Schemazeichnung der poly-Si-Zelle in Superstratkonfiguration auf SiN_x -beschichtetem Glas. Der Emitter ist alle 5 mm über Punktkontakte kontaktiert. Die Korngröße beträgt im Mittel $2 \mu\text{m}$. Daraus ergeben sich unterschiedliche Transportpfade, die hier exemplarisch als blaue Pfeile eingezeichnet sind. Als mögliche Defekttypen werden vor allem Korngrenzen und Versetzungen diskutiert.

Schicht eine Diffusionsbarriere zum Glassubstrat. Die Emitterkontaktierung erfolgt über Punktkontakte mit 5 mm Abstand. Alleine aufgrund dieses Kontaktschemas und der damit verbundenen Strompfade, die auch eine Komponente parallel zu den Zellschichten haben können, muss das System für exakte Rechnungen in 3D simuliert werden.

Auch der Absorber sollte aufgrund der lateralen Inhomogenitäten in 3D simuliert werden. Strukturuntersuchungen legen nahe, dass die Körner kolumnar wachsen und im Mittel einen Abstand von ca. $2 \mu\text{m}$ haben [107]. Mögliche Defekttypen sind offene Si-Bindungen (DB-Defekte) und Bandausläufer durch verspannte Bindungen, aber auch rekombinationsaktive Zustände, die durch Segregation von Fremdatomen an der Korngrenze auftreten können (siehe Abschnitt 3.1.3). Die Lokalisierung von Defekten an Korngrenzen hat nicht nur inhomogene Rekombinationsraten zur Folge, sondern in Abhängigkeit vom Ladungszustand der Defekte kann es dort auch zu einer Bandverbiegung kommen. Diese Bandverbiegungen haben eine inhomogene Ladungsträgerverteilung zur Folge und könnten Barrieren für den Transport senkrecht zu den Korngrenzen darstellen. Es ist auch denkbar, dass entlang der Korngrenzen Transportkanäle mit hoher Leitfähigkeit entstehen. Diese Effekte sind bereits aus der Literatur zur Simulation von poly-Si-Solarzellen [80, 85, 140–142] und polykristallinen Chalkopyrit-Solarzellen [143–145] bekannt. Aus diesen Untersuchungen ergibt sich, dass insbesondere wenn geladene Korngrenzen auftreten, eine detaillierte Modellierung 2D-Simulationen nutzen muss, um den qualitativen Einfluss der Korngrenzen abzubilden und sogar 3D-Simulationen, um exakte Berechnungen durchzuführen. Weiterhin wurde in Abschnitt 3.1.3 diskutiert, dass hohe Versetzungsdichten auftreten können, die mit bandkantennahen Zuständen einhergehen. Diese bandkantennahen Zustände werden auch in einer aktuellen Studie zur temperaturabhängigen Ladungsträgerlebensdauer in poly-Si-Schichten (e-beam/SPC) identifiziert [146]. Weitere Defekte durch Verunreinigungen sind ebenfalls denkbar. Hier wird insbesondere für die

Zellen, die am HZB auf einem mit Aluminium dotierten ZnO-Frontkontakt hergestellt werden, die Eindiffusion von Al- und Zn-Atomen diskutiert [46].

Neben den großen Herausforderungen bei der elektrischen Simulation der Zelle soll hier noch erwähnt werden, dass auch die exakte Simulation der optischen Eigenschaften sehr anspruchsvoll ist. Der dünne Absorber im Zusammenhang mit dem geringen Absorptionskoeffizienten von Silizium erfordert einen exzellenten Rückreflektor in der Zelle. Die in den untersuchten Zellen eingesetzte weiße Farbe führt zu einer sehr effizienten diffusen Rückreflexion und gutem Lichteinfall in der Zelle. Zur Berechnung der wellenlängenabhängigen Lichtbrechung an den Materialgrenzflächen und möglicher Interferenzeffekte, die die Intensitätsverteilung in den dünnen Schichten beeinflusst, sind Modelle nötig, die über die Strahlenoptik hinausgehen.

1D-Simulation der poly-Si-Zelle mit AFORS-HET

Für die poly-Si-Schichten gibt es noch keine eindeutigen experimentellen Ergebnisse zur Art der rekombinationsbestimmenden Defekte und der Ausbildung von Potentialbarrieren an Korngrenzen. Somit sind die räumliche und energetische Lage, sowie Typen und Einfangquerschnitte der Defekte unbekannt. Für die Simulationen, die mit AFORS-HET nur in 1D durchgeführt werden können, wird hier der Ansatz eines effektiven Mediums mit einer effektiven Defektdichte gemacht. Dabei wird als effektiver Defekt ein einzelner Zustand in der Bandmitte mit einem Einfangquerschnitt von 10^{-14} cm^2 angenommen, der keine Ladung trägt. Wenn ein experimenteller Nachweis für Potentialbarrieren an Korngrenzen gefunden wird, muss mindestens zu 2D-Simulationen übergegangen werden und der Ladungszustand der Defekte berücksichtigt werden. Wenn ein experimenteller Nachweis für eine effizienzlimitierende Rekombination über bandkannennahe Zustände erbracht wird, müsste die Defektlage entsprechend angepasst werden. Alle weiteren Materialparameter, wie z. B. Ladungsträgermobilitäten, werden entsprechend dem Modell für kristallines Silizium in AFORS-HET angenommen. Da aufgrund des kolumnaren Kornwachstums zumindest im Absorber nicht notwendigerweise ein Transport über Korngrenzen hinweg stattfindet, erscheint dieser Ansatz für die Mobilitäten als angemessen. Auch die Optik kann in AFORS-HET nur mit einem stark vereinfachten Modell beschrieben werden. Es werden wellenlängenunabhängige interne Reflexionen der Vorder- und Rückseite der Zelle angegeben um den Lichteinfall in 1D zu simulieren. Die wellenlängenabhängige Absorption aus den optischen Konstanten n , k für c-Si berechnet. Die parasitäre Absorption des Glas/ SiN_x -Stapels wurde mit einem Spektrometer vermessen und in den Simulationen berücksichtigt.

Der Ansatz eines effektiven Mediums für den Absorber und der Wellenlängenunabhängigen Strahlenoptik für den Lichteinfall muss als ein erster Versuch angesehen werden, um ein grobes Verständnis für die Zelle zu gewinnen. Der vorgestellte Modell für die numerische Simulation mit AFORS-HET wird im Folgenden anhand von j-V-Kennlinien angepasst und geprüft.

7.2. Modellanpassung anhand von j-V-Kennlinien

Als experimentelle Daten stehen Dunkel- und Hellkennlinien von 13 Minimodulen mit Variation in der Abscheiderate, Dotierung und Dicke der Absorberschicht zur Verfügung (Details im Anhang Tab. C.1). Es soll hier ein Zellmodell für die Simulation gefunden werden, das Dunkel- und Hellkennlinien mit dem gleichen Parametersatz beschreiben kann und bei Variation von möglichst wenigen Parametern für unterschiedliche Module eingesetzt werden kann. Tab. 7.1 gibt einen Überblick über die bekannten Materialparameter, die Parameter, für die Annahmen gemacht werden müssen und die Parameter, die über die Modellanpassung bestimmt werden.

Tabelle 7.1.: Material- und Geometrieparameter der poly-Si-Dünnschichtsolarzellen

| | Emitter c-Si(n^+) | Absorber c-Si(p^-) | BSF c-Si(p^+) |
|--|--------------------------|--------------------------------------|------------------------|
| Schichtdicke [μm] | 0.035 | 1.5 bis 2.2 | 0.065 |
| Dotierung ^a [cm^{-3}] | 1.2×10^{20} | $(5 \text{ bis } 50) \times 10^{15}$ | 1.5×10^{19} |
| Defektdichte [cm^{-3}] | 10^{19} ^b | Modellanpassung | 10^{19} ^b |
| Defekte: neutral, Bandmitte, Einfangquerschnitt: 10^{-14}cm^2 ^b | | | |
| sonstige Parameter aus dem c-Si-Modell in AFORS-HET (Abschnitt 2.4) | | | |
| Parallelwiderstand [Ωcm^2] | | Modellanpassung | |
| Serienwiderstand [Ωcm^2] | | Modellanpassung | |
| interne Reflexion Vorderseite | | Modellanpassung | |
| interne Reflexion Rückseite | | 1 ^b | |

^a Die Dotierungen der *e-beam* abgeschiedenen Schichten werden durch die Temperatur der Effusionszelle und die Abscheiderate eingestellt.

^b Annahme, genauer Wert unbekannt.

Bei der Modellanpassung wird die interne Reflexion der Vorderseite so angepasst, dass der Kurzschlussstrom mit der gemessenen Hellkennlinie übereinstimmt. Aufgrund der starken Vereinfachung des optischen Modells enthält dieser Parameter keine physikalisch sinnvolle Bedeutung. Es lässt sich aber darüber abschätzen, wie gut der Lichteinfang in der Zelle ist. Es bleiben dann drei weitere Materialparameter, die bestimmt werden müssen: Parallel- und Serienwiderstand sowie die Absorberdefektdichte.

7.2.1. Einfluss der Modellparameter auf die j-V-Kennlinie

Der Einfluss von Zellparametern auf die j-V-Kennlinie ist ein in der Literatur bereits vielfach untersuchtes Thema (siehe z. B. [147]). Im Folgenden soll der Einfluss von Zellparametern auf die j-V-Kennlinie der hier untersuchten Zelle dargestellt werden. Ausgangspunkt für den Vergleich ist die Standardmodellzelle mit Parametern aus Abb. 7.2, die eine typische poly-Si-Zelle gut abbildet, wie später gezeigt wird. In Abb. 7.3 ist dargestellt wie die Dunkel- und Hellkennlinie auf die Variation der Defektdichte, der Widerstände und der internen Reflexion reagieren.

| Parameter der Standardmodellzelle | |
|------------------------------------|--------------------------|
| Absorber | |
| Schichtdicke [μm] | 1.5 |
| Dotierung [cm^{-3}] | 1.5×10^{16} |
| Defektdichte [cm^{-3}] | 2.5×10^{15} |
| Zelle | |
| Parallelwiderstand | $5000 \Omega\text{cm}^2$ |
| Serienwiderstand | $1 \Omega\text{cm}^2$ |
| int. Ref. ^a Vorderseite | 0.7 |
| int. Ref. Rückseite | 1 |

^aint. Ref: interne Reflexion

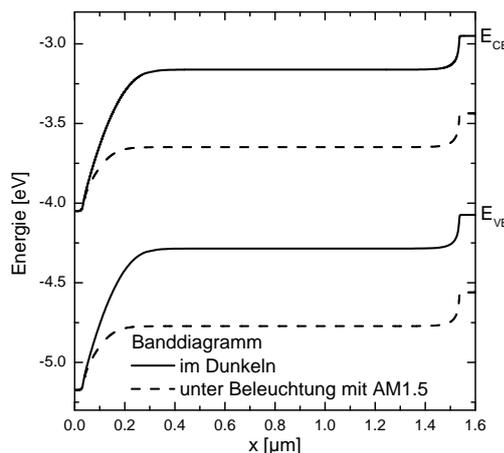


Abbildung 7.2.: Standardmodellzelle für die Simulation der poly-Si-Dünnschichtzelle. In der Tabelle sind die Material- und Zellparameter angegeben und in der Abbildung die Bandverbiegung im Dunkeln und bei AM1.5 dargestellt. Anhand der Modellanpassung wird gezeigt, dass diese Absorber- und Zellparameter die experimentellen Zellen gut beschreiben.

In Abb. 7.3(a) ist der Einfluss der Widerstände zu erkennen. Während der Parallelwiderstand die Dunkelkennlinie in Sperrrichtung und im ersten Teil der Durchlassrichtung bis ≈ 300 mV bestimmt, sorgt der Serienwiderstand für ein charakteristisches Abknicken der Kurve bei hohen Spannungen > 500 mV in Durchlassrichtung. Für die hier gezeigten Variationen hat der Parallelwiderstand überhaupt keinen und der Serienwiderstand nur einen vernachlässigbar kleinen Einfluss auf die Hellkennlinie. Die Anpassung des Kurzschlussstroms über die interne Reflexion ist in Abb. 7.3(b) dargestellt. Von hauptsächlichem Interesse in dieser Untersuchung ist die effektive Defektdichte in der Zelle, deren Einfluss auf die Dunkel- und Hellkennlinie in Abb. 7.3(c) und (d) dargestellt ist. Die Leerlaufspannung reagiert sehr empfindlich auf die Defektdichte und kann somit zur ihrer Bestimmung eingesetzt werden. Zur Verifikation kann dann der Kurvenverlauf der Dunkelkennlinie zwischen 100 mV und 600 mV geprüft werden, der sehr sensitiv auf die Defektdichte reagiert. In diesem Teil der Dunkelkennlinie sowie am Füllfaktor macht sich auch bemerkbar, ob die Defekte im Volumen des Absorbers oder an der Grenzfläche zum Emitter lokalisiert sind. Es werden Volumendefekte und Grenzflächendefekte verglichen, die dieselbe Leerlaufspannung ergeben. Sind die Defekte an der Grenzfläche lokalisiert, so ist der Knick in der Dunkelkennlinie zwischen +100 mV und +600 mV wesentlich ausgeprägter und der Füllfaktor ist höher. Es ist zu beachten, dass sich die Grenzflächendefekte nicht aus der Projektion der Volumendefekte ergeben. Die Zelle toleriert bei gleichem V_{oc} aufgrund der Feldeffektpassivierung mehr Grenzflächendefekte als Volumendefekte. Wie in Abb. 7.2 zu sehen ist, bleibt bei Leerlaufbedingungen eine große Restbandverbiegung im System bestehen, die einen Ladungsträgertyp von der Grenzfläche fernhält und so zu einer Feldeffektpassivierung führt. Im Volumen gibt es hingegen unabhängig von der Bandverbiegung in der Raumladungszone immer einen Punkt, an dem Elektronen und Löcher die gleiche Konzentration haben und die Rekombination somit maximal ist. Weiterhin kann die Ladungsträgerdiffusion die Leerlaufspannung nach unten be-

grenzen. Für sehr hohe Grenzflächendefektdichten stellt sich ein Diffusionsprofil mit einer sehr geringen Ladungsträgerdichte an den Grenzflächen ein. Eine weitere Erhöhung der Defektdichte macht sich dann in der Hellkennlinie nicht mehr bemerkbar. So kann die Hellkennlinie in Abb. 7.3(d) mit $V_{oc} = 450$ mV bei einer Volumendefektdichte von $7 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ nicht mehr nur durch Annahme von Grenzflächendefekte simuliert werden.

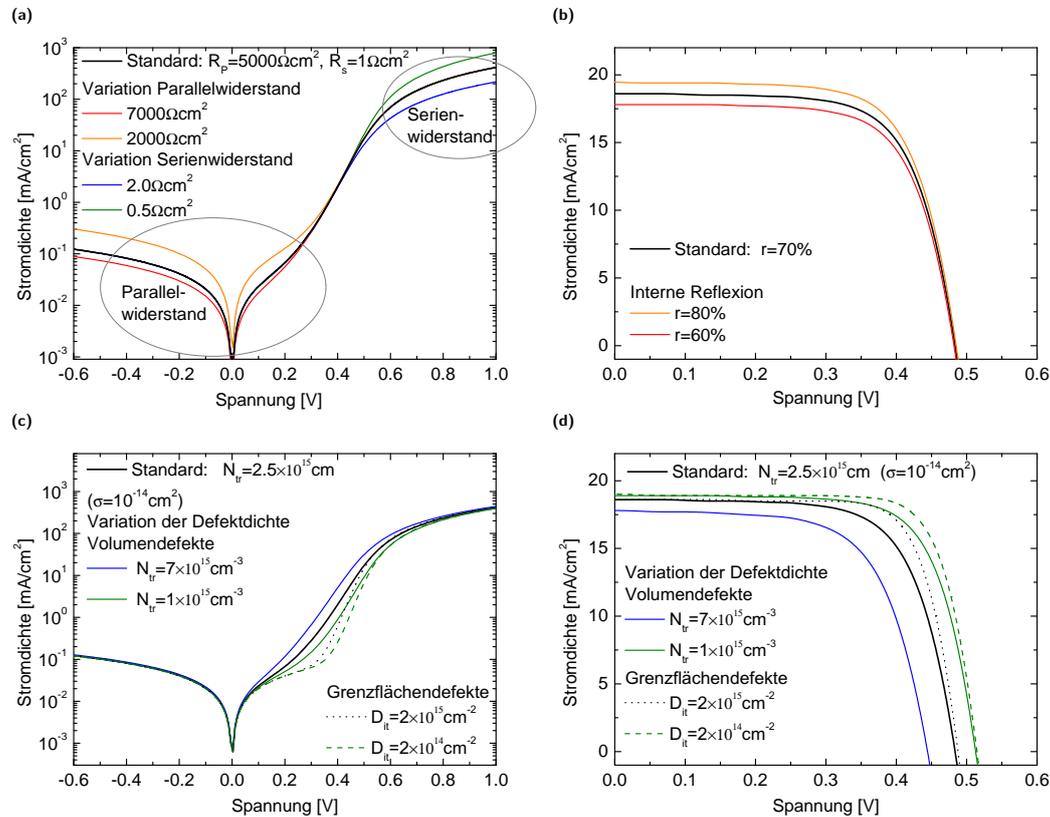


Abbildung 7.3.: Einfluss der Zellparameter auf Dunkel- und Hellkennlinie. Gezeigt sind Parametervariationen im Vergleich zur Standardmodellzelle aus Abb. 7.2. In Abb. (a) ist der Einfluss der Widerstände auf die Dunkelkennlinie zu sehen und in Abb. (b) der Einfluss der Qualität der Lichtkopplung, die hier durch die interne Reflexion der Zellvorderseite simuliert wird. Abb. (c) und (d) zeigen den Einfluss der Defektdichte und der Lage der Defekte auf Dunkel- und Hellkennlinie.

7.2.2. J-V-Kennlinien der Minimodule

Nach diesen theoretischen Vorüberlegungen können die experimentellen j-V-Kennlinien diskutiert werden. Die experimentellen Daten der Serie mit variierender Dotierkonzentration und Abscheiderate sind in Abb. 7.4 (a) und (b) dargestellt. Ohne eine Modellanpassung durchzuführen, kann zunächst festgestellt werden, dass eine starke Schwankung des Parallelwiderstands (Dunkelkennlinie, Sperrrichtung) und der Qualität des Lichteinfangs (Kurzschlussstrom) auftritt. Der Serienwiderstand hingegen (Dunkelkennlinie, Spannung > 600 mV) und die Defektdichte (Leerlaufspannung) unterliegen nur kleinen Schwankungen.

Das AFORS-HET Simulationsmodell wird kann durch Variation von nur vier Parametern an die experimentellen j-V-Kennlinien angepasst werden.¹ Zunächst wird die Dunkelkennlinie in Sperrrichtung über den Parallelwiderstand und in Durchlassrichtung für hohe Spannungen über den Serienwiderstand angepasst. Die Defektdichte kann dann im Zusammenspiel mit der Reflexion über die Leerlaufspannung und den Kurzschlussstrom angepasst werden. Durch diese Modellanpassung lässt eine gute Übereinstimmung von Hell- und Dunkelkennlinie erreichen. Als objektiver Maßstab wird die Übereinstimmung im Füllfaktor herangezogen, der sowohl empfindlich auf die Defektdichte, als auch auf die Defektposition (Grenzfläche oder Volumen) reagiert. In Abb. 7.4(a) und (b) ist exemplarisch, dass auf diese Art angepasste simulierte Kennlinie für die Zelle mit einer Dotierung von $1.3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ bei einer Abscheiderate von 300 nm/min dargestellt. Es ergibt sich eine sehr gute Übereinstimmung zwischen experimentellen Kennlinien und simulierter Kennlinien mit Volumendefekten während die simulierte Kennlinie mit Grenzflächendefekten sowohl im Dunkeln als auch im Hellen starke Abweichungen zeigt. Es kann daraus geschlossen werden, dass sich Defekte im Volumen des Absorbers limitierend auf die Zelleffizienz auswirken. Über die Lokalisierung der Defekte an Korngrenzen oder Regionen hoher Versetzungsdichte kann keine Aussage getroffen werden. Auch könnten sich die experimentellen Kurven durch ein Zusammenspiel von Volumen- und Grenzflächenrekombination ergeben.

Aufgrund dieses ersten Ergebnisses wurden für alle Kennlinien der 13 Minimodule eine Modellanpassung unter Annahme von Volumendefekten durchgeführt. Die Ergebnisse für die so bestimmte Defektdichte sind in Abb. 7.5 zusammengefasst. Durch Anpassung der Defektdichte konnte die Leerlaufspannung mit einer Abweichung von unter 2 mV eingestellt werden und im Füllfaktor ergeben sich Abweichungen von maximal 5 %. Ein Vergleich von simulierten und experimentellen j-V-Kennlinien ergibt auch eine gute Übereinstimmung (siehe Anhang Abb. C.1). Eine Übersicht aller untersuchten Zellen zusammen mit den durch Modellanpassung bestimmten Materialparametern findet sich ebenfalls im Anhang Tab. C.1 und Tab. C.2.

In Abb. 7.5 ist zu erkennen, dass die Defektdichte insbesondere mit der Dotierkonzentration steigt. Auch scheinen dickere Schichten mit einer geringfügig höheren Defektdichte verbunden zu sein. Aufgrund des einfachen Simulationsmodells und der manuellen Prozedur bei der Modellanpassung sind diese Ergebnisse jedoch mit einem unbekanntem Fehler behaftet.

7.2.3. Diskussion zur Analyse der j-V-Kennlinien

Die mittels der Modellanpassung bestimmten Defektdichten deuten daraufhin, dass bei hoher Dotierung und hoher Abscheiderate mehr Defekte eingebaut werden. Zu erwarten ist, dass vor allem die Dichte von Hochenergie-Korngrenzen und Versetzungen zunimmt, wenn das Material weniger Zeit hat, eine energetisch günstige Konfiguration anzunehmen.

Die Erhöhung der Rekombinationsrate mit der Dotierung wurde auch schon in anderen Untersuchungen von e-beam/SPC-poly-Si-Schichten experimentell nachgewiesen (siehe Abb. 7.6). In der Arbeit von Wong et al. [146] wird aus temperatu-

¹Diese Arbeit wurde von A.-M. Teodoreanu im Rahmen ihrer Masterarbeit durchgeführt [110]

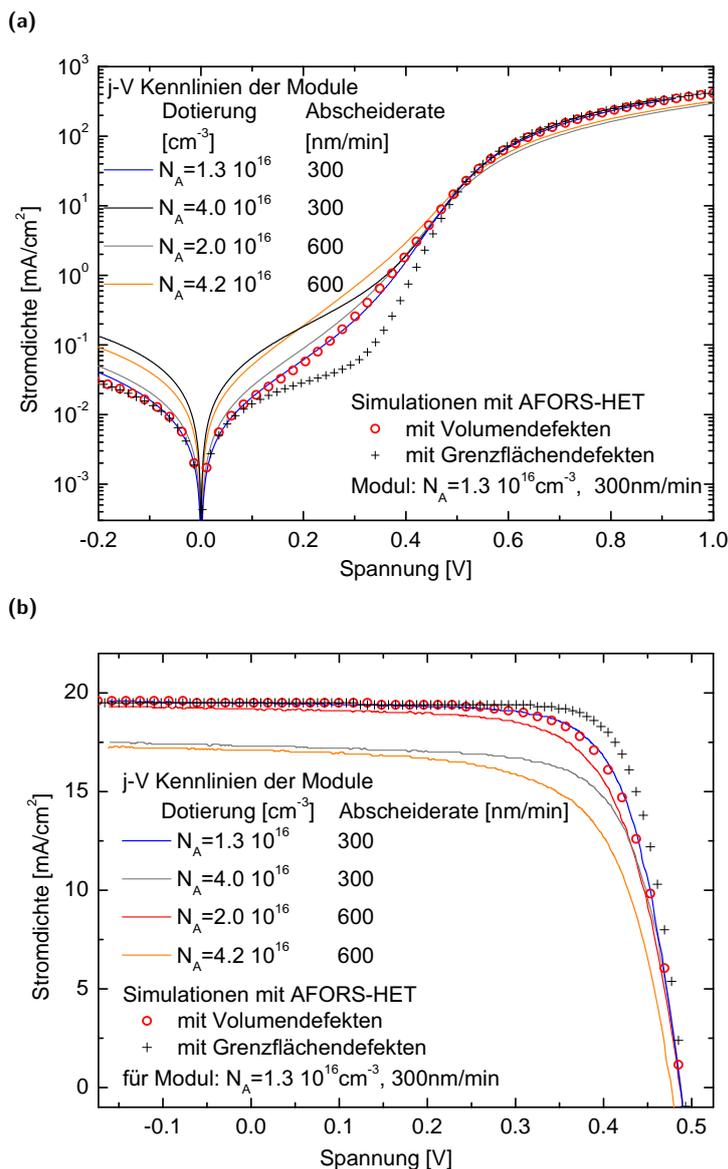


Abbildung 7.4.: Experimentelle j - V -Kennlinien der poly-Si-Zelle bei Variation der Dotierung und Abscheiderate im Dunkeln (a) und bei AM1.5 (b). Am Beispiel der Zelle mit der Dotierung $N_A = 1.3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ und der Abscheiderate 300 nm/min sind die simulierten Kennlinien bei Annahme von Volumen- und Grenzflächendefekten dargestellt. Die simulierte Kennlinie bei Annahme von Volumendefekten stimmt sehr gut mit den experimentellen Daten überein.

abhängigen Quanteneffizienzmessungen die temperaturabhängigen Lebensdauer in poly-Si-Schichten abgeschätzt. Die Autoren erklären die beobachtete Abhängigkeit der Rekombinationsraten von Dotierkonzentration und der Temperatur durch ein Modell für Rekombination zwischen flachen bandkantennahe Zuständen, wie sie mit Versetzungsdefekten verbunden sind.

In Abb. 7.5 ist weiterhin zu erkennen, dass eine höhere Leerlaufspannung nicht immer mit einer geringeren Defektdichte zusammenhängt. Dies liegt daran, dass die

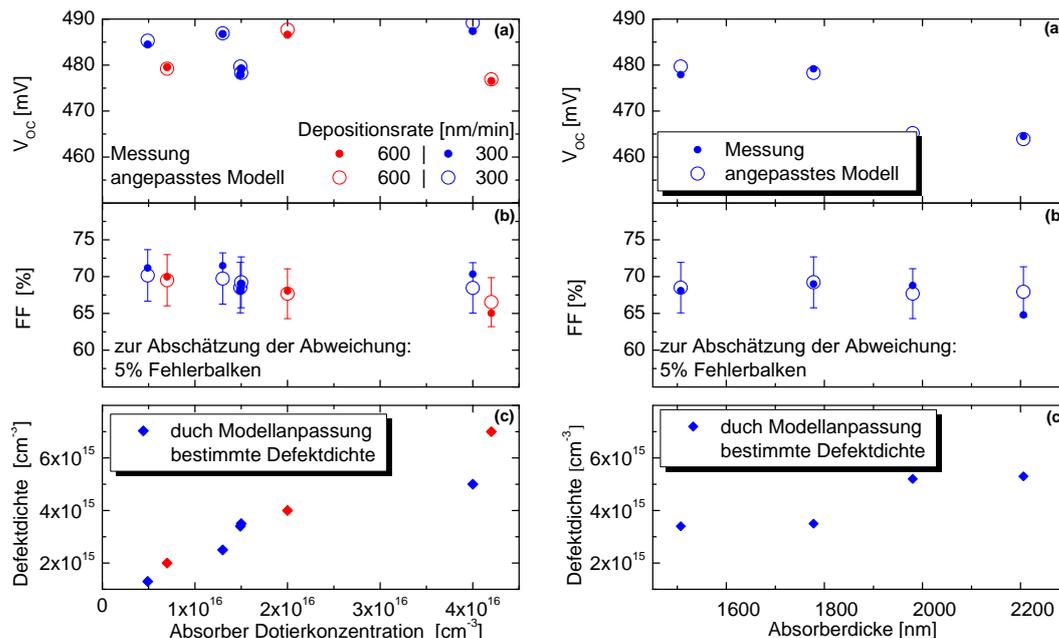


Abbildung 7.5.: Ergebnisse der Modellanpassung für die poly-Si-Zellserien mit Variation der Dotierung und Abscheiderate (linke Spalte) und der Dicke (rechte Spalte) der Absorberschicht. Zur Überprüfung der Güte der Modellanpassung ist in Abb. (a) die experimentelle und simulierte Leerlaufspannung dargestellt und in Abb. (b) der Füllfaktor. Die Abweichung in der Leerlaufspannung bleiben unter 2 mV und liegen beim Füllfaktor bei maximal 5 %. Die durch Modellanpassung gewonnene Defektdichte ist in Abb. (c) dargestellt. Da hier eine willkürliche Annahme für den Einfangquerschnitt von $\sigma = 10^{-14} \text{ cm}^2$ gemacht wurde, lässt sich mit diesem Vorgehen nur das Produkt aus Einfangquerschnitt und Defektdichte bestimmen.

Leerlaufspannung mit der Dotierkonzentration steigt, wie in Abschnitt 7.4 noch genauer gezeigt wird. Weiterhin hat die Qualität der Lichteinkopplung, die bei den Zellen großen Schwankungen unterliegt, auch einen kleinen Einfluss auf die Leerlaufspannung.

Als entscheidende Ergebnis dieser Studie soll die erfolgreiche Entwicklung eines einfachen Simulationsmodells herausgestellt werden, dass in der Lage ist die Eigenschaften der Zelle zu simulieren. Weiterhin konnte gezeigt werden, dass die effizienzlimitierenden Defekte zumindest anteilig im Volumen des Absorbers lokalisiert sind. Da hier verschiedene Defekttypen beteiligt sein könnten und keine Informationen über die Einfangquerschnitte vorliegen, soll als endgültiges Ergebnis zu den Defekten nur das Produkt aus Defektdichte und Einfangquerschnitt angegeben werden. Dieses beträgt für die hier untersuchten Zellen minimal $N_{\text{tr}}^{\text{min}} \times \sigma = 13 \text{ cm}$ bei einer Leerlaufspannung von $V_{\text{oc}} = 484 \text{ mV}$ bei der Zelle mit der geringsten Dotierung und der kleinsten Abscheiderate. Die maximale Defektdichte von $N_{\text{tr}}^{\text{min}} \times \sigma = 70 \text{ cm}$ bei bei einer Leerlaufspannung von $V_{\text{oc}} = 477 \text{ mV}$ hat die Zelle mit der stärksten Dotierung und der hohen Abscheiderate.

Abschließend soll noch mal daran erinnert werden, dass das entwickelte Simulationsmodell starke Vereinfachungen beinhaltet. Dies betrifft die Vernachlässigung von 3D-Effekten, die mit den Punktkontakten und den Korngrenzen verbunden sind, sowie

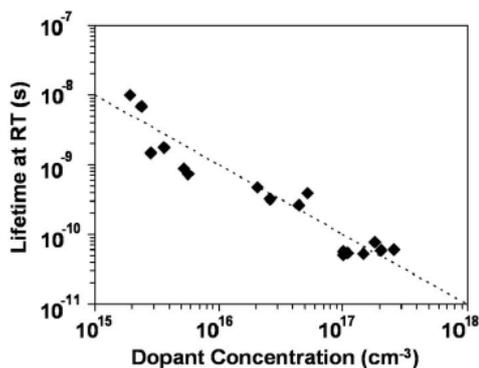


Abbildung 7.6.: Abnahme der Lebensdauer mit der Dotierung von poly-Si-Schichten (e-beam/SPC) aus einer Studie von Wong et al [146]. Die Lebensdauer wurde in dieser Studie aus Quanteneffizienzmessungen bestimmt. Hier steht: „Lifetime at RT“ für die Lebensdauer bei Raumtemperatur und „Dopant Concentration“ für die Absorberdotierung.

die Annahme eines einzelnen neutralen Defekttyps in der Bandmitte. Insbesondere die Vernachlässigung der Korngrenzen ist kritisch zu beurteilen. Sollten sich durch hohe Defektdichten an den Korngrenzen Potentialbarrieren ausbilden, so sind die Bandstruktur, die Ladungsträgerdichte und die Ladungsträgerströme lateralen Inhomogenitäten unterworfen und es müssen echte 3D-Simulationen eingesetzt werden. Ein 3D-Simulation mit einem 2D-Simulator unter Ausnutzung der Zylindersymmetrie eines Korns (siehe Abb. 7.11(a)) wurde in Zusammenarbeit mit dem WIAS Institut begonnen (Simulator: WIAS TeSCA). In Zusammenarbeit mit der TU Berlin soll eine echte 3D-Simulation entwickelt werden, mit der auch das Punktkontaktschema untersucht werden (Simulator: Synopsys DESSIS).

Eine experimentelle Methode mit deren Hilfe man die Notwendigkeit von 3D-Simulation einschätzen könnte, ist die Kelvin-Sonden-Kraftmikroskopie. Diese kann Aufschluss darüber geben ob Potentialbarrieren an den Korngrenzen auftreten, wie in verschiedenen Untersuchungen von dünnen poly-kristallinen Schichten herausgefunden wurde [148, 149].

7.3. Ladungsträgerlebensdauer im poly-Si-Absorber

Aus der Emitter- und Absorberdotierung ergibt sich eine hohe eingebaute Bandverbiegung von über 800 mV. Damit ist die mit Hilfe der Kennlinien bestimmte Leerlaufspannung offensichtlich durch die Rekombination limitiert. Somit kann mit Gl. (2.61) die erwartete Lebensdauer abgeschätzt werden. In Abb. 7.7(a) ist die Leerlaufspannung als Funktion der effektiven Lebensdauer eingezeichnet. Anhand der blauen Linien, die die maximale und minimale gemessene Leerlaufspannung markieren, kann abgelesen werden, dass in dem System eine effektive Lebensdauer um eine Nanosekunde erwartet werden muss, wie sie auch in den experimentellen Ergebnissen von Wong et al. gefunden wurde (Abb. 7.6). In Abb. 7.7(b) ist die Leerlaufspannung als Funktion der SRV und der Volumenlebensdauer für eine Absorberdotierung von $N_A = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ dargestellt. Der Bereich, der sich aus den gemessenen Leerlaufspannungen ergibt, ist durch blaue Linien gekennzeichnet. Entsprechend der Analyse der j-V-Kennlinien ist zu erwarten, dass die Leerlaufspannungen zumindest anteilig durch die Volumendefekte limitiert sind, so dass auch die Volumenlebensdauern im Bereich um eine Nano-

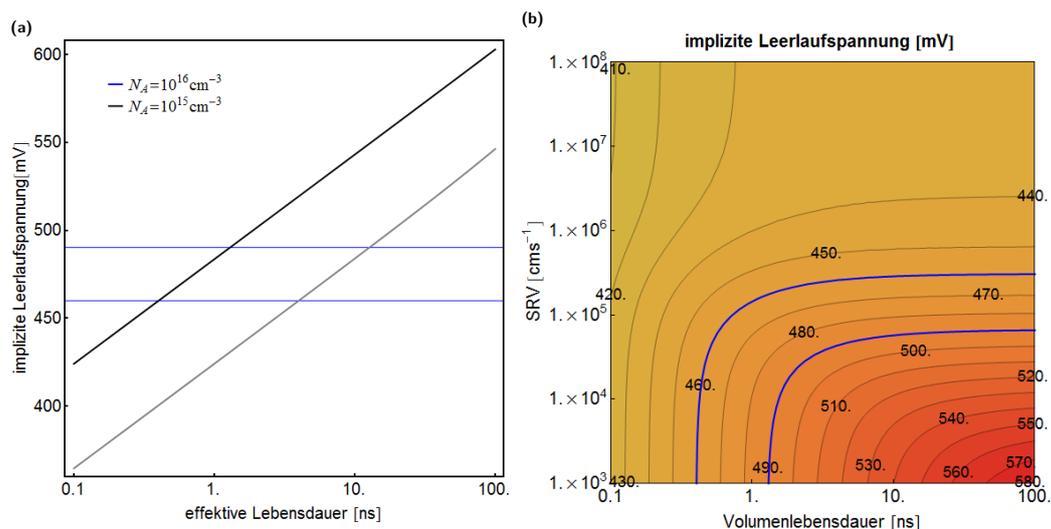


Abbildung 7.7.: Leerlaufspannung als Funktion der effektiven Lebensdauer (a) und als Funktion der Volumenlebensdauer und Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit (SRV) (b). Die blauen Linien markieren die maximale und minimale gemessene Leerlaufspannung. Für die Zellen ergeben sich Lebensdauern um eine Nanosekunde. Der Zusammenhang in Abb. (a) wurde mit Gl. (2.61) berechnet und in Abb. (b) mit Gl. (2.61) und Gl. (5.15). In Abb. (b) wurde eine Absorberdotierung von $N_A = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ angenommen und ein Diffusionskoeffizient für Löcher von $12 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$.

sekunde liegen müssten. Für diese Darstellung wurde die effektive Lebensdauer mit Gl. (5.15) berechnet um das Diffusionsprofil zu berücksichtigen, das sich bei hohen SRVs ergibt. Die Leerlaufspannung fällt für theoretische SRVs von über 10^6 cm s^{-1} nicht mehr ab, da die effektive Lebensdauer dann nach unten durch die Diffusion zur Oberfläche hin begrenzt ist.

7.3.1. HS-PCD-Messungen der Ladungsträgerlebensdauer

Es wurden HS-PCD-Lebensdauer-messungen an $1.5 \mu\text{m}$ dicken Absorberschichten mit verschieden starker Dotierung (nominell intrinsisch, $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $1.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ und $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) auf SiN_x -beschichtetem Glas durchgeführt (Abb. 7.8) und zum Vergleich an Absorberschichten, die direkt auf Glas deponiert wurden (Abb. 7.9).² In Abb. 7.8(a) sind die Transienten der gesamten Serie auf SiN_x ohne Bias-Licht dargestellt, sowie die Transienten der nominell intrinsischen Probe ohne Bias-Licht und mit Bias-Licht in zwei unterschiedlichen Intensitätsstufen. Die Messungen und Auswertungen der nominell intrinsischen Probe in Abhängigkeit von der Bias-Lichtintensität ist im Anhang Abb. C.5 in höherer Auflösung dargestellt. Die experimentellen Details der HS-PCD-Methode wurden in Abschnitt 4.1.2 diskutiert. Hier soll noch einmal daran erinnert werden, dass sich die Transienten aus 500 gemittelten Messungen ergeben und dass das initiale Injektionsniveau, das sich aus der Laserintensität und -pulsdauer ergibt $\Delta n \approx 9 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ beträgt.

Der Verlauf der logarithmisch dargestellten Transienten zeigt ein initiales schnelles Abklingen, bevor die Steigung einen konstanten Wert annimmt. Die Umrechnung der

²In Zusammenarbeit mit A.-M. Teodoreanu [110].

Transiente. in die effektive Ladungsträgerlebensdauer erfolgt, wie in den experimentellen Grundlagen diskutiert wurde, entsprechend Gl. (4.4) und ist in Abb. 7.8(b) dargestellt. Ohne Bias-Licht ergeben sich initiale Lebensdauern von $\tau \approx 10 \mu\text{s}$, die im Laufe der Transiente auf $\tau \approx 100 \mu\text{s}$ ansteigen. Die Lebensdauern mit schwachem Bias-Licht liegen zwischen $\tau \approx 3 \mu\text{s}$ und $\tau \approx 8 \mu\text{s}$ und bei starkem Bias-Licht bei $\tau \approx 1 \mu\text{s}$. Die Messungen an den Proben auf Glas ohne SiN_x -Schicht sind in Abb. 7.9 gezeigt. Es ergibt sich ein vergleichbarer Verlauf der Transienten. Eine Umrechnung in die Lebensdauer ergibt ebenfalls vergleichbare Werte. Es sei noch erwähnt, dass die Genauigkeit bei der Bestimmung der Lebensdauer durch einen exponentiellen Fit im Bereich konstanter Lebensdauern erhöht werden kann. Hier steht allerdings die Untersuchung der Injektionsabhängigkeit im Vordergrund und es geht darum, zunächst ein prinzipielles Verständnis für diese hohen Lebensdauern zu gewinnen.

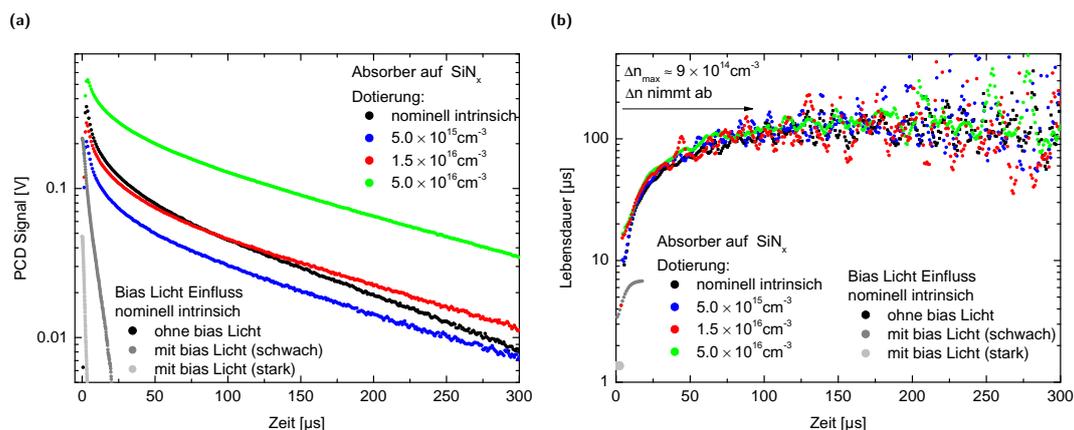


Abbildung 7.8.: In Abb. (a) sind HS-PCD-Transienten der Dotierserie auf SiN_x ohne Bias-Licht, sowie Transienten der nominell intrinsischen Probe ohne Bias-Licht und mit Bias-Licht in zwei unterschiedlichen Intensitätsstufen. In Abb. (b) ist die mit Gl. (4.4) berechnete Lebensdauer dargestellt. Die Messungen und Auswertungen der nominell intrinsischen Probe in Abhängigkeit der Bias-Lichtintensität sind im Anhang Abb. C.5 detaillierter dargestellt.

Zusammenfassend lässt sich Folgendes feststellen:

- Ohne Bias-Licht ergeben sich nach dem Laserpuls kleine Lebensdauern von ca. $10 \mu\text{s}$, die im Laufe der Zeit zunehmen und einen konstanten Wert von ca. $100 \mu\text{s}$ annehmen.
- Die Lebensdauern nehmen mit der Bias-Lichtintensität ab, so dass bei der in diesem Aufbau maximal möglichen Intensität Lebensdauern von minimal $1 \mu\text{s}$ erreicht werden.

Dieses Ergebnisse können durch eine injektionsabhängige Lebensdauer erklärt werden, die mit der Überschussladungsträgerdichte sinkt.

- Direkt nach dem Laserpuls ist die Injektionsdichte hoch und fällt mit der Zeit ab. Somit sinkt auch die injektionsabhängige Lebensdauer.
- Mit Bias-Licht wird eine noch höhere Überschussladungsträgerdichte erreicht, so dass die Lebensdauer noch kleinere Werte annimmt.

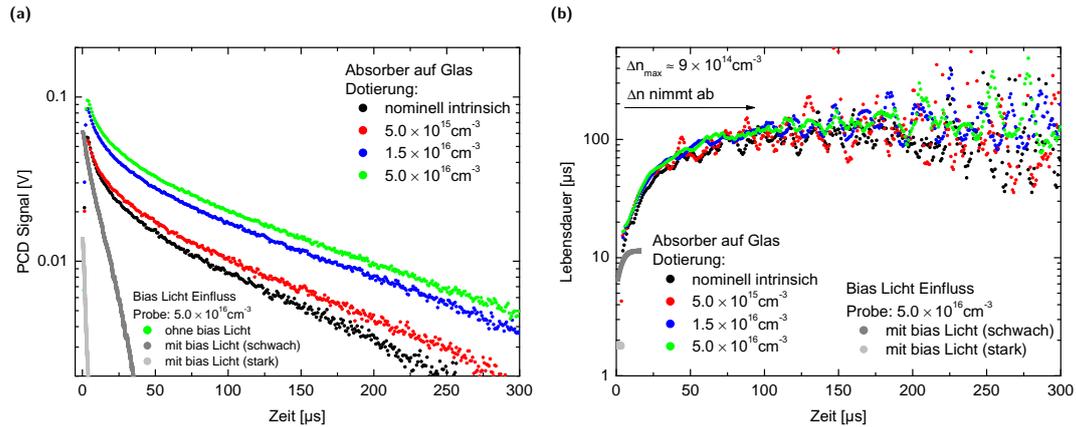


Abbildung 7.9.: HS-PCD-Transienten der Dotierserie auf Glas (a) und mit Gl. (4.4) berechnete Lebensdauern (b). Die Messungen und Auswertungen der Probe mit der Absorberdotierung $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ in Abhängigkeit der Bias-Lichtintensität ist im Anhang Abb. C.5 in höherer Auflösung dargestellt.³

Die Ergebnisse werden im nächsten Abschnitt weiter erörtert.

7.3.2. Simulationsstudie zur Lebensdauerermessung

Die aus den Leerlaufspannungen berechneten effektiven Lebensdauern in den poly-Si-Absorbern liegen zwischen 0.1 ns und 10 ns und stehen damit im starken Widerspruch zu den mit der HS-PCD-bestimmten Lebensdauern von 1 μs bis 100 μs . Im Kapitel 5, in dem Modelle zur Berechnung von Lebensdauern in Siliziumsolarzellen diskutiert wurden, wurde bereits der DRM-Effekt vorgestellt, der in dünnen Schichten, in denen starke Bandverbiegungen vorliegen, auftreten kann. Dieser Effekt tritt bei der Bestimmung von Lebensdauern mit der Photoleitfähigkeitsmethode auf, wenn die mittlere Ladungsträgerkonzentration zu einem großen Anteil durch die Ladungsträger in der Raumladungszone bestimmt wird und nicht, wie normalerweise angenommen, aus den Ladungsträgern im Volumen der Schicht. Anhand von numerischen Simulationen soll nun untersucht werden, ob der DRM-Effekt bei den hier vorliegenden Strukturen solch hohe Lebensdauern erklären kann.

Simulationen zur effektiven Lebensdauer des Absorbers auf SiN_x

Dazu wird zunächst die Struktur auf SiN_x -beschichtetem Glas diskutiert. Es ist bekannt, dass sich an der SiN/Si -Grenzfläche eine hohe Festladung von ca. $Q_{\text{SiN}} = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ausbildet [150]. In Abb. 7.10(a) ist dargestellt, welche Lebensdauer und die Leerlaufspannungen sich für die hier untersuchten 1.5 μm dicken Schichten mit der aus j-V-Kennlinien bestimmten Defektdichte von $n_{\text{tr}} \approx 2 \times 10^{15}$ und der SiN_x -typischen Festladung ergeben. Es ist zu erkennen, dass sich im Bereich $\Delta n = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ bis $\Delta n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ eine starke Injektionsabhängigkeit der Ladungsträgerlebensdauer ergibt und diese bis auf Werte $\tau > 100 \mu\text{s}$ ansteigt. Der Bereich, in dem diese Injektionsabhängigkeit auftritt, liegt genau im Messbereich der HS-PCD-Messung und auch im Bereich, der unter V_{oc} -Bedingungen bei der Beleuchtung mit AM1.5

relevant ist. Mit Abb. 7.10 wird auch klar, dass die Details des Verlaufs der injektionsabhängigen Lebensdauer stark von der angenommenen Festladung und der Probendicke abhängen. Abb. 7.10(b) verdeutlicht, dass der Effekt dort einsetzt, wo die mittlere Ladungsträgerkonzentration, die mit der Photoleitfähigkeitsmethode bestimmt wird, nicht mehr durch die mittlere Überschussladungsträgerkonzentration im Volumen gegeben ist. Es wird ebenfalls deutlich, dass der logarithmische Zusammenhang zwischen Leerlaufspannung und Lebensdauer aus Gl. (2.61) im Injektionsbereich, in dem der DRM-Effekts auftritt, nicht mehr gültig ist. Es ergeben sich hier bei Lebensdauern von $\tau = 1 \mu\text{s}$ bis $\tau = 10 \mu\text{s}$ Leerlaufspannungen um 500 mV. Unter Berücksichtigung des DRM-Effekts sind die Lebensdauermessungen und die Analyse der j-V-Kennlinien somit widerspruchsfrei erklärbar.

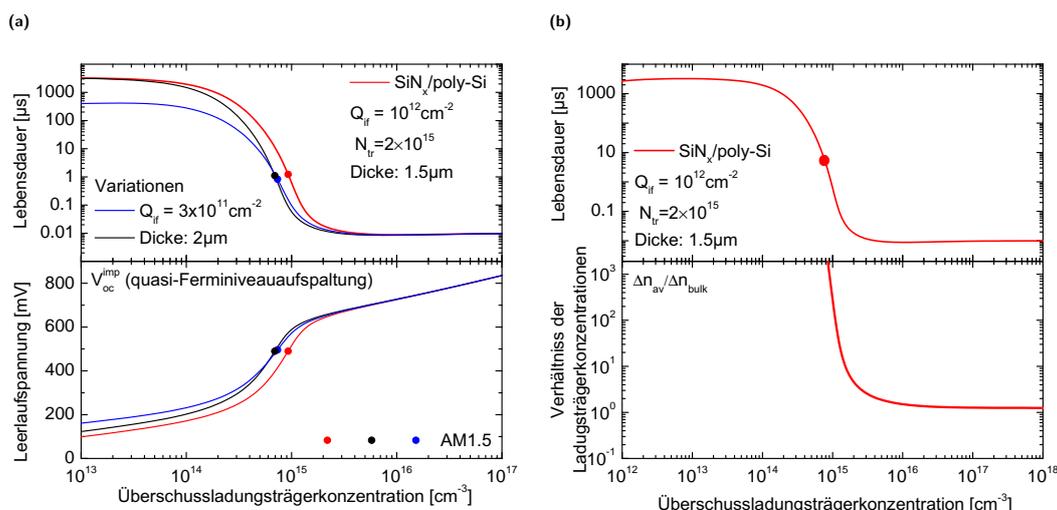


Abbildung 7.10.: In Abb. (a) ist die injektionsabhängige Lebensdauer und Leerlaufspannung für die Absorberschichten auf SiN_x dargestellt. Dabei wurde eine Defektdichte von $N_{tr} = 2 \times 10^{15}$ angenommen, wie sie sich aus der Analyse der j-V-Kennlinien ergibt, angenommen und eine SiN_x typischen Festladung von $Q_{\text{SiN}} = 10^{12} \text{cm}^{-2}$. Ebenfalls dargestellt ist die Sensitivität auf Parametervariationen der Dicke und der Festladung. In Abb. (b) wird deutlich, dass die stark anwachsende Lebensdauer mit dem Injektionsniveau zusammenfällt, bei dem die Ladungsträgerdichte entscheidend durch die Ladungsträgerdichte in der Raumladungszone bestimmt wird.

Simulationen zur effektiven Lebensdauer des Absorbers auf Glas

Diese Erklärung für die hohen Lebensdauern in der Absorberschichten auf SiN_x -beschichtetem Glas beruht auf der Festladung, die sich an der SiN/Si -Grenzfläche ausbildet, und ist somit nicht anwendbar auf die Absorberschichten auf Glas ohne SiN_x -Schicht. Sollten jedoch Korngrenzen mit Potentialbarrieren vorliegen, könnte auch in diesen Proben der DRM-Effekt auftreten. In Abb. 7.11(a) ist die 3D-Struktur eines Korns dargestellt und eine einfache Näherung, um sie in 1D zu simulieren.⁴ Bei

⁴Dieser Übergang von 3D zu 1D ist streng genommen nicht richtig, vielmehr müssten die Halbleitergleichungen in Zylinderkoordinaten transformiert werden. Da dies die Modifikation der Halbleitergleichungen in AFORS-HET erfordern würde, wird hier jedoch nur der einfache Ansatz eingesetzt, um die Situation qualitativ zu untersuchen.

bei Annahme einer Aufteilung der Defekten auf die Korngrenze und das Kornvolumen, bildet sich in Abhängigkeit von der Defektlage und der Defektkonzentration eine Bandverbiegung an der Korngrenze aus. Aufgrund dieser durch die Defektladung erzeugten Bandverbiegung kann es wiederum zum DRM-Effekt kommen. Dies ist in Abb. 7.11(b) dargestellt. Hier wurden DB-Defekte an der Korngrenze angenommen, die entsprechend einer Gaußverteilung mit einer Breite von 200 mV über die Energie verteilt sind. Es wird deutlich, dass es in Abhängigkeit von der energetischen Lage der Gaußfunktion wieder zu einem starken Anwachsen der Lebensdauer über $100 \mu\text{s}$ kommen kann, bei gleichzeitig geringen Leerlaufspannungen von ca. 500 mV. Auch in diesem Fall sind also die Ergebnisse aus der Untersuchung der Kennlinien und der Lebensdauer widerspruchsfrei zu erklären.

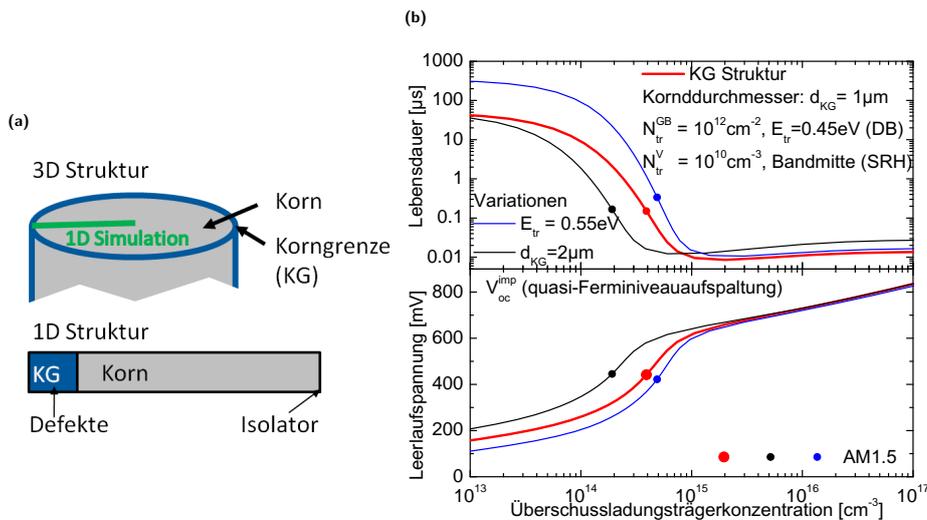


Abbildung 7.11.: Schemazeichnung eines Korns in 3D und die hier berechnete Vereinfachung in 1D. In Abb. (b) zeigt die injektionsabhängige Lebensdauer und Leerlaufspannung bei Annahme einer defektreichen Korngrenze. Hier wurden DB-Defekte an der Korngrenze angenommen, die entsprechend einer Gaußverteilung mit einer Breite von 200 mV über die Energie verteilt sind. N_{tr}^{KG} gibt das Maximum der Gaußverteilung an und E_{tr} die Lage des Maximums relativ zur Valenzbandkante. **Fehler in Abb.**

7.3.3. Diskussion zur Ladungsträgerlebensdauer

Die aus den Leerlaufspannungen berechneten effektiven Lebensdauern der poly-Si-Absorber liegen zwischen 0.1 ns und 10 ns, während die mit der HS-PCD-Methode bestimmten Lebensdauern bei $1 \mu\text{s}$ bis $100 \mu\text{s}$ liegen. Es wurde anhand von numerischen Simulationen qualitativ gezeigt, dass die hohen Lebensdauern mithilfe des DRM-Effekts erklärt werden können. Das Auftreten des DRM-Effekts auch bei der Probe ohne SiN_x -Schicht deutet auf das Vorhandensein von defektreichen Korngrenzen mit Potentialbarrieren hin.

Sobald der DRM-Effekt auftritt ist der logarithmische Zusammenhang zwischen effektiver Lebensdauer und Leerlaufspannung (Gl. (2.61)) nicht mehr gültig, und hohe Ladungsträgerlebensdauern sind nicht mehr mit hohen impliziten Leerlaufspannungen

gen verbunden. Lebensdauermessungen und j-V-Kennlinien können folglich konsistent mit einem Modell erklärt werden.

Es soll hier aber erwähnt werden, dass auch der transiente Trappingeffekt zu ähnlich hohen Lebensdauern bei niedrigen Injektionsdichten führen kann (siehe Abschnitt 5.1.2 und [132]). Insbesondere die Zustände nahe der Bandkante, die typischerweise mit Versetzungen verbunden sind, könnten als Ladungsträgertraps fungieren. Da transiente Trappingeffekte nicht ausgeschlossen werden können, werden hier keine weiteren quantitativen Schlüsse aus den Lebensdauermessungen gezogen. In zukünftigen Untersuchungen empfiehlt es sich, transiente Simulationen durchzuführen, um diesen Effekt zu untersuchen.

Als wichtiges Ergebnis soll hier festgehalten werden, dass die Lebensdauer in dünnen Schichten im Messbereich $< 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, in den auch das Injektionsniveau bei AM1.5 Beleuchtung fällt, eine starke Injektionsabhängigkeit aufweist. Lebensdauer-messungen an dünnen Schichten müssen deshalb immer mit Injektionsniveau angegeben werden. Zur Bestimmung der Defektdichte im Absorber sind Messungen bei höheren Injektionsdichten nötig, in denen der DRM-Effekt nicht mehr relevant ist (idealerweise bei flachen Bändern). Hierzu müssen die experimentelle Methoden erweitert werden und eine zeitliche Auflösung von einigen Nanosekunden zu ermöglichen.

Wie in den experimentellen Grundlagen diskutiert wurde, reicht die zeitliche Auflösung des aktuellen HS-PCD-Aufbaus nicht aus, um Lebensdauern $< 100 \text{ ns}$ zu messen. Eine Möglichkeit, um die Schwierigkeiten bei der Zeitauflösung zu beheben und gleichzeitig transiente Effekte bei der Messung auszuschließen, wäre, Photoleitfähigkeitsmessungen bei konstanter Beleuchtung mit variabler Intensität durchzuführen (Gleichgewichtsbedingungen). Erste Untersuchungen, die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführt wurden, haben gezeigt, dass die hohen Beleuchtungsintensitäten, die benötigt werden, um Injektionsniveaus zu erreichen, bei denen der DRM-Effekt nicht mehr relevant ist, eine Temperaturregelung der Probe erfordern. Ohne Temperaturregelung werden die Messungen verfälscht, da die Ladungsträgerlebensdauern temperaturabhängig sind.

7.4. Simulationsstudie zur Limitierung der Leerlaufspannung

Es wurde gezeigt, dass die Standardmodellzelle (Abb. 7.2) ein brauchbares Modell der realen poly-Si-Zellen darstellt. Sie kann somit genutzt werden, um die Sensitivität der poly-Si-Zelle auf bestimmte Struktur- und Materialparameter zu untersuchen. Dazu wurden Parameterstudien mit AFORS-HET durchgeführt.

7.4.1. Dotierung und Defekte des Absorbers

In Abb. 7.12 ist die Sensitivität von Leerlaufspannung und Füllfaktor auf Variationen der Absorberdefektdichte für verschiedene Absorberdotierungen dargestellt. Zum Vergleich sind die experimentellen Daten aus der j-V-Kennlinien der Minimodulserien eingetragen. Wie erwartet reagiert die Leerlaufspannung sehr empfindlich auf Variationen der Defektdichte. Auch eine Erhöhung der Dotierung wirkt sich positiv auf die Leerlaufspannung aus. Es ist jedoch anhand der experimentellen Daten zu

erkennen, dass eine Erhöhung der Dotierung in der Praxis zu einer Erhöhung der Defektdichte führt, so dass die besten Zellen für alle Dotierungen knapp unter 500 mV bleiben. Die Abweichungen zwischen Modellrechnung und experimentellen Daten im Füllfaktor bleiben unter 5% und sind zum Teil durch die unterschiedlichen internen Reflexivitäten gegeben, die in dieser Simulationsstudie konstant gehalten werden, während die Qualität der Lichteinkopplung der Zellen relativ großen Schwankungen unterliegt (siehe Kurzschlussstrom der experimentellen j-V-Kennlinien).

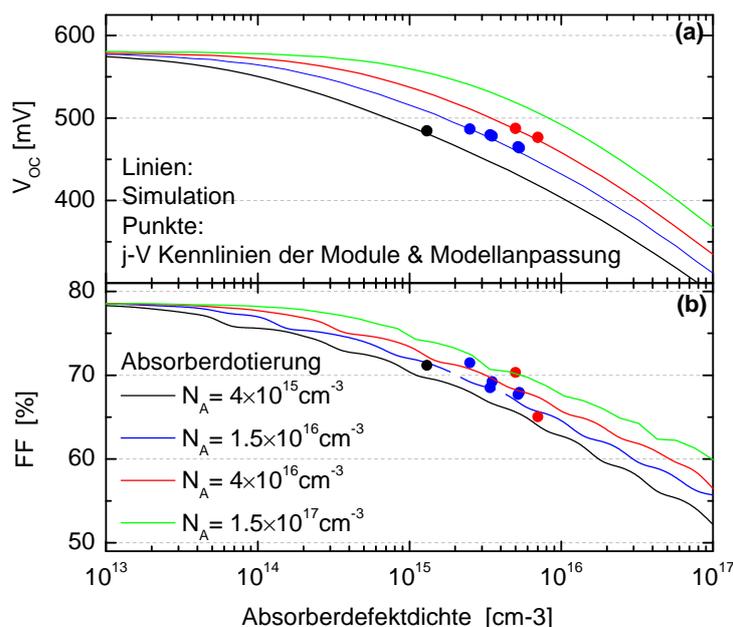


Abbildung 7.12.: Sensitivität von Leerlaufspannung (a) und Füllfaktor (b) auf die Absorberdefektdichte für verschieden Absorberdotierungen. Die Simulationsstudie wurde mit der Standardmodellzelle aus Abb. 7.2 durchgeführt. Zusätzlich sind die experimentellen Daten (Punkte), der j-V-Kennlinien der Minimodulserien eingetragen. Die Farbkodierung ist auch bei den experimentellen Daten entsprechend der Absorberdotierung gewählt. In der Simulation wurden für alle Variationen die Widerstände und die interne Reflexion der Standardmodellzelle angenommen

In Abb. 7.12 ist zu erkennen, dass die Leerlaufspannung unabhängig von der Absorberdotierung für geringe Absorberdefektdichten gegen einen Wert bei ca. 575 mV konvergiert. Dies liegt daran, dass die Ladungsträgertrennung zwischen Emitter/BSF und Absorber nicht perfekt ist und auch in den Kontaktschichten oder an der Grenzfläche zu den metallischen Kontakten Rekombinationsprozesse stattfinden können. Die Rekombination in Abhängigkeit der Position in der Standardmodellzelle unter Leerlaufbedingungen ist in Abb. 7.13 dargestellt. Die Rekombinationsrate ist maximal im Bereich der Raumladungszone, an dem Punkt, an dem die Elektronen- und Löcherdichten gleich sind. Während an den Grenzflächen zum BSF und Emitter eine Feldeffektpassivierung stattfindet, kann sich der Punkt maximaler Rekombination im Absorber entsprechend der Bandverbiegung verschieben. Wie zu erkennen ist, können auch die Kontaktschichten rekombinationsaktiv sein.

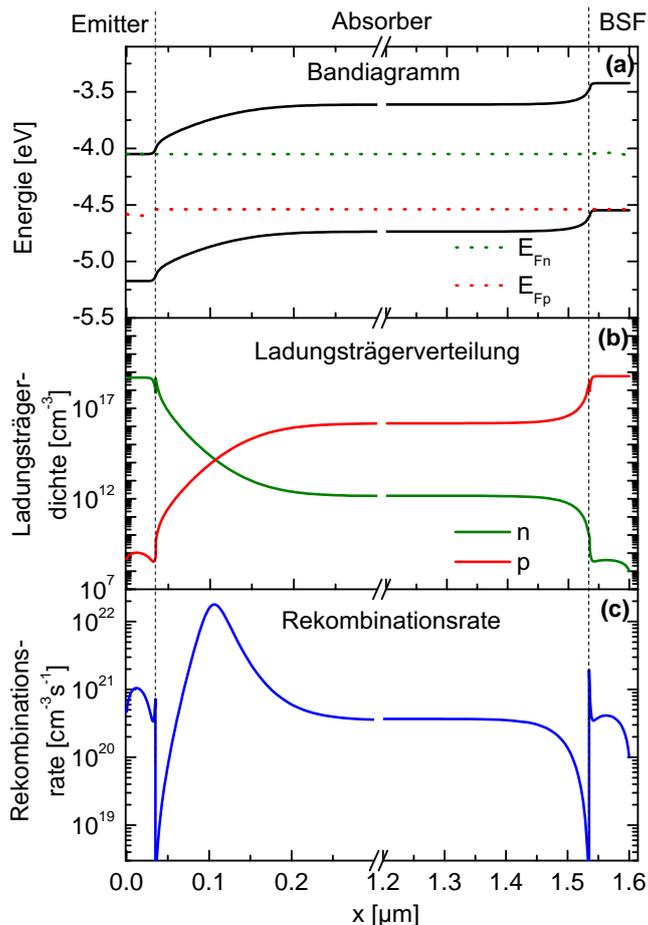


Abbildung 7.13.: Banddiagramm (a) Ladungsträgerverteilung (b) und Rekombinationsrate (c) der Standardmodellzelle unter Leerlaufbedingungen. Um den Fokus auf die Randbereiche der Zelle zu legen, ist der Bereich zwischen $0.3 \mu\text{m}$ und $1.2 \mu\text{m}$ ausgeblendet. Die maximale Rekombination findet an der Stelle im Absorber statt, an der gleich viele Elektronen und Löcher vorliegen. An den Grenzflächen wird die Rekombination durch eine Feldeffektpassivierung abgesenkt. Auch in den Emitter und Absorberschichten finden Rekombinationsprozesse statt, die bei exzellenter Absorberqualität die Leerlaufspannung limitieren können.

7.4.2. Einfluss der Kontaktschichten

In Abb. 7.14 ist die Sensitivität der Leerlaufspannung auf Variationen der Kontaktschichten dargestellt. Es ist zu erkennen, dass durch Optimierung der Kontaktschichten das Limit der Leerlaufspannungen für Absorber hoher Qualität verbessert wird. Ideale Kontaktschichten (keine Rekombination, idealer Elektronen- und Löcherkontakt⁵) ermöglichen bei geringen Absorberdefektdichten Leerlaufspannungen bis zum Augerlimit bei 833 mV. Das Augerlimit liegt hier höher als bei der in Kapitel 6 diskutierten a-Si:H/c-Si-Waferzelle, da die mittlere Generationsrate, aufgrund des dünnen Absorbers und des guten Lichteinfangs, höher ist ($G_{av} = 1.33 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$). Berechnet werden kann dieses Limit mit Gl. (5.26), Gl. (2.29) und Gl. (2.63) entsprechend dem Vorgehen bei der a-Si:H/c-Si-Zelle (Abb. 5.16) oder alternativ mit AFORS-HET unter Annahme idealer Kontakte und eines defektfreien Absorbers. Es wird allerdings deutlich, dass selbst eine idealisierte Kontaktschicht noch keinen Einfluss auf die Leerlaufspannung der untersuchten Zellen hat, die aufgrund der hohen Ab-

⁵Idealer Elektronenkontakt bedeutet, dass nur Elektronen den Kontakt passieren können. Dieser idealisierte Kontakt, der in der Praxis nicht realisierbar ist, dient hier nur dazu, das theoretische Limit zu diskutieren.

sorberdefektdichte durch die Rekombination über Volumendefekte limitiert ist. Im Rahmen des eingesetzten Simulationsmodells zeigt sich also, dass keine in der Praxis realisierbaren Optimierungen der Kontaktschichten einen positiven Einfluss auf die Leerlaufspannung der untersuchten Zellen haben kann.

Nach der Diskussion des theoretischen Limits sollen realisierbare Variationen der Kontaktschichten diskutiert werden. Der Einsatz einer a-Si:H-BSF-Schicht ist beispielsweise mit dem Zelldesign kompatibel, da die BSF-Schicht als letzte Schicht deponiert wird. Hier ist zu erwarten, dass der Leitungsband-Offset eine weitere Barriere für die Elektronen darstellt und diese von dem rekombinationsaktiven Rückkontakt fernhält. Tatsächlich ist in Abb. 7.14 zu erkennen, dass die Leerlaufspannung für geringe Defektdichten gegen den Wert 625 mV konvergiert und somit der hier untersuchten poly-Si-BSF-Schicht überlegen wäre.

Der Emitter erzeugt aufgrund seiner hohen Dotierung in den Zellen eine starke Bandverbiegung von über 800 mV. Bei dieser hohen Bandverbiegung reagiert die Zelle nicht auf Variationen der Emitterdefektdichte oder auf Details des Frontkontakts, wie Grenzflächenrekombination oder Austrittsarbeit. Eine Absenkung der Emitterdotierung macht sich allerdings negativ bemerkbar, so dass unterhalb von $N_D^{\text{Emitter}} = 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ auch die Leerlaufspannung im Bereich der untersuchten Zellen abgesenkt wird (Abb. 7.14). Bei dieser geringen Emitterdotierung spielt dann auch der Frontkontakt eine Rolle. Hier wurde exemplarisch ein Frontkontakt mit einer Austrittsarbeit von 4.5 eV angenommen, wodurch in das System eine der Dunkelbandverbiegung entgegengesetzte Bandverbiegung von 0.35 mV eingebracht wird. Eine derartig schlechte Bandanpassung macht sich dann auch in der Leerlaufspannung bemerkbar und könnte bereits einen Einfluss auf die reale Zelle haben wie in Abb. 7.14 zu erkennen ist.

7.5. Vergleich der a-Si:H/c-Si - mit der poly-Si-Solarzelle

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde die a-Si:H/c-Si -Zelle auf n- und p-Typ Wafern, sowie die poly-Si-Zelle mit p-Typ Absorber untersucht. Es konnte aufgezeigt werden, welche Mechanismen die Leerlaufspannung in den verschiedenen limitieren.

Für die a-Si:H/c-Si -Zelle ist bekannt, dass die Optimierung der Grenzflächenrekombination entscheidend ist, um hohe Leerlaufspannungen zu erreichen [96]. Dabei werden offene Silizium-Bindungen an der a-Si:H/c-Si -Grenzfläche als rekombinationsbestimmende Defekttypen diskutiert [32]. Im Rahmen dieser Arbeit wurde das Zusammenspiel von Defekt- und Feldeffektpassivierung der Grenzfläche detailliert analysiert. Es wurde gezeigt, dass die a-Si:H/c-Si -Zelle auf n-Typ Wafern im aktuellen Entwicklungsstand am HZB durch die Grenzflächendefektdichte auf ca. 715mV limitiert ist und dass der a-Si:H(p)-Emitter nur eine Dunkelbandverbiegung von ca. 620 mV ermöglicht. Sowohl bei der Absenkung der Defektdichte, als auch bei der Erhöhung der Dunkelbandverbiegung gibt es Optimierungsbedarf, um Rekordsolarzellen herzustellen. Es ist folglich wichtig, den a-Si:H-Schichtstapel weiterzuentwickeln. Weiterhin zeigt sich, dass sich der ZnO-Frontkontakt ungünstig auf die Passiviereigenschaften des a-Si:H-Schichtstapels auswirken kann.

Die a-Si:H/c-Si -Zelle auf p-Typ Wafer hat im Gegensatz dazu bereits ein Emitter-

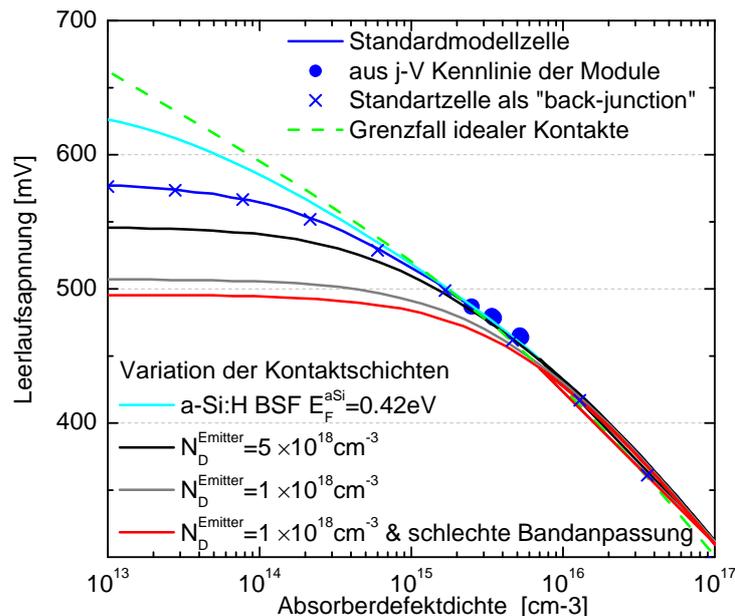


Abbildung 7.14.: Sensitivität der Leerlaufspannung auf Variationen der Kontaktschichten (Emitter und BSF). Zum Vergleich ist die Standardmodellzelle aus Abb. 7.2 und die experimentellen Daten (Punkte), der j-V-Kennlinien der Minimodulserien mit entsprechender Absorberdotierung ($N_A = 1.5 \times 10^{16}$) dargestellt. Gezeigt ist der Einfluss einer a-Si:H-BSF-Schicht, sowie Variationen des Emitterkontakts. Für kleine Emitterdotierungen ist auch die Bandanpassung des Frontkontakts entscheidend. Hier dargestellt ist die Absenkung der Leerlaufspannung bei $N_A = 1 \times 10^{16}$ für einen Frontkontakt mit einer Austrittsarbeit von 4.5 eV.

schichtstapel der Rekordsolarzellen mit Leerlaufspannungen von $>733\text{mV}$ ermöglicht. Hier wird die Rekombination, die die Leerlaufspannung limitiert, bereits zu großen Teilen durch die Augerrekombination und die Rekombination über Defekte im Wafer bestimmt. Die Optimierung der Grenzfläche bietet kaum noch Verbesserungspotential. Sollten Rekordeffizienzen mit dieser Zelle nicht erreicht werden können, muss der Grund in der eingesetzten BSF-Schicht oder im Frontkontakt gesucht werden.

Die poly-Si-Zelle hingegen ist durch die Absorberdefektdichte limitiert. Der limitierende Defektyp im Absorber konnte allerdings noch nicht identifiziert werden. Möglich sind Defekte an Korngrenzen, Versetzungsdefekte oder Defekte durch Fremdatome. Die in dieser Arbeit durchgeführten Lebensdauerermessungen geben ein Indiz dafür, dass Korngrenzendefekte vorhanden sind. Nur so kann das Auftreten des DRM-Effekts bei den Absorberschichten auf Glas erklärt werden. In der Literatur finden sich jedoch Untersuchungen, die darauf hindeuten, dass die Lebensdauer durch Versetzungsdefekte bestimmt wird [146]. In Untersuchungen am HZB zeigt sich weiterhin, dass bei Zellen auf ZnO eine hohe Verunreinigung durch Zn- und Al-Atome im Absorber vorliegt [46]. Im Rahmen einer Sensitivitätsanalyse konnte festgestellt werden, dass sich der Einsatz einer a-Si:H-BSF-Schicht vorteilhaft auf die Leerlaufspannung auswirkt, sobald Absorber mit $N_{\text{tr}}^{\text{min}} \times \sigma < 20 \text{ cm}$ bei einer Dotierung von $N_A = 1.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ realisiert werden können. Bei exzellenter Absorberqualität und

mit Einsatz einer a-Si:H-BSF-Schicht hat auch die Dünnschichtzelle das Potential, so hohe Leerlaufspannungen wie die Waferzelle zu erreichen.

7.6. Zusammenfassung der Ergebnisse

Es wurde ein einfaches Simulationsmodell entwickelt und anhand von j-V-Kennlinien an die reale Zelle angepasst. Es hat sich gezeigt, dass es möglich ist, mit diesem einfachen Modell das Zellverhalten unter Parametervariationen von Dotierung, Defektdichte und Dicke des Absorbers zu simulieren. Anhand der j-V-Kennlinien konnte gezeigt werden, dass die effizienzlimitierenden Defekte zumindest anteilig im Volumen des Absorbers lokalisiert sind. Weiterhin zeigt sich, dass die Absorberdefektdichte mit der Dotierung steigt.

Das Produkt aus Defektdichte und Einfangquerschnitt, das durch Modellanpassung an die experimentellen j-V-Kennlinien bestimmt werden kann, beträgt minimal $N_{\text{tr}}^{\text{min}} \times \sigma = 13 \text{ cm}$ bei einer Leerlaufspannung von $V_{\text{oc}} = 484 \text{ mV}$ bei der Zelle mit der geringsten Dotierung $N_{\text{A}} = 4 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ und der kleinsten Abscheiderate. Die maximale Defektdichte von $N_{\text{tr}}^{\text{min}} = 70 \text{ cm}$ bei einer Leerlaufspannung von $V_{\text{oc}} = 477 \text{ mV}$ hat die Zelle mit der stärksten Dotierung $N_{\text{A}} \times \sigma = 4 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ und der höchsten Abscheiderate.

Im Rahmen einer Sensitivitätsanalyse konnte festgestellt werden, dass sich der Einsatz einer a-Si:H-BSF-Schicht vorteilhaft auf die Leerlaufspannung auswirkt, sobald Absorber mit $N_{\text{tr}}^{\text{min}} \times \sigma < 20 \text{ cm}$ bei einer Dotierung von $N_{\text{A}} = 1.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ realisiert werden können.

Die Messung und Simulationen von effektiven Ladungsträgerlebensdauern in dünnen Schichten zeigen, dass diese im Messbereich $< 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, in den auch das Injektionsniveau bei AM1.5 Beleuchtung fällt, eine starke Injektionsabhängigkeit aufweisen. Ladungsträgerlebensdauern an dünnen Schichten müssen somit immer mit Injektionsniveau angegeben werden.

Die aus den Leerlaufspannungen berechneten effektiven Lebensdauern der poly-Si-Absorber liegen zwischen 0.1 ns und 10 ns, während die mit der HS-PCD-Methode bestimmten Lebensdauern bei 1 μs bis 100 μs liegen. Es wurde anhand von numerischen Simulationen qualitativ gezeigt, dass die hohen Lebensdauern und die Injektionsabhängigkeit mit Hilfe des DRM-Effekts erklärt werden können. Zur Bestimmung der Defektdichte mit Hilfe von Lebensdauermessungen sind Messungen bei höheren Injektionsdichten nötig, bei denen der DRM-Effekt nicht mehr relevant ist. Hierzu müssen die experimentelle Methoden erweitert werden.

Sobald der DRM-Effekt auftritt ist der logarithmische Zusammenhang zwischen effektiver Lebensdauer und Leerlaufspannung (Gl. (2.61)) nicht mehr gültig und eine hohe Leerlaufspannung ist nicht mehr mit hohen Lebensdauern verbunden. Die Lebensdauermessungen und die j-V-Kennlinien können somit konsistent mit einem Modell erklärt werden.

8. Zusammenfassung und Ausblick

Ziel der Arbeit war es, die effizienzlimitierenden Rekombinationsprozesse in zwei am HZB entwickelten Siliziumsolarzellen zu identifizieren und ein Verständnis für die physikalischen Mechanismen zu erarbeiten, die diese Rekombinationsprozesse bestimmen. Untersucht wurden die a-Si:H/c-Si-Heterostruktursolarzelle auf n- und p-dotierten Siliziumwafern sowie eine Dünnschichtsolarzelle mit poly-Si(p)-Absorberschicht. Es konnte aufgezeigt werden, welche Mechanismen die Leerlaufspannung in den verschiedenen Zelltypen limitieren.

Die a-Si:H/c-Si Zellen ermöglichen hohe Leerlaufspannungen von bis zu 730 mV, wobei in der Literatur bereits bekannt ist, dass dabei die Minimierung der a-Si:H/c-Si-Grenzflächenrekombination entscheidend ist. Mit Hilfe einer im Rahmen dieser Arbeit entwickelten computergestützten Auswertung der injektionsabhängigen Ladungsträgerlebensdauer (CA-PCD Methode) war es möglich zu analysieren, wie sich die Grenzflächenrekombination durch das Zusammenspiel von Defekt- und Feldefektpassivierung minimieren lässt und unter welchen Bedingungen das Schichtsystem so weit optimiert ist, dass die Augerrekombination die implizite Leerlaufspannung limitiert.

Die poly-Si-Dünnschichtsolarzelle erreicht beim aktuellen Entwicklungsstand Leerlaufspannungen von knapp 500 mV, hat dafür aber potenziell einen Vorteil gegenüber der a-Si:H/c-Si-Zelle was die Produktionskosten betrifft. Durch die Analyse von Strom-Spannungs-Kennlinien mit Hilfe von numerischen AFORS-HET-Simulationen konnten elektronische Defekte im Volumen der poly-Si-Absorberschicht als effizienzlimitierend identifiziert werden.

Im Folgenden werden die wichtigsten Ergebnisse zu den einzelnen Zelltypen und die im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Analysemethoden zur Charakterisierung der Zellen zusammengefasst. Weiterhin wird als Ausblick diskutiert, wie die Zellen in Zukunft experimentell untersucht werden könnten, und es werden verbesserte Modelle zur Simulation der einzelnen Zelltypen empfohlen.

8.0.1. Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse

Rekombination und Leerlaufspannung in der a-Si:H/c-Si-Zelle

Bei der Optimierung der a-Si:H/c-Si-Zelle ist die Reduktion der Grenzflächenrekombination der Schlüssel zu hohen Leerlaufspannungen [96]. Dabei wird angenommen, dass die Rekombination über elektronische Defekte durch offene Si-Bindungen stattfindet [32]. In Hocheffizienzzellen wird eine a-Si(i) Pufferschicht eingesetzt, um die Defekte an der Wafergrenzfläche zu minimieren, während eine dotierte, aber defektreichere a-Si:H(n,p) Emitterschicht eine Bandverbiegung im Wafer erzeugt. Die Leerlaufspannung dieses Systems wird durch die Rekombination an der Grenzfläche limitiert,

die von der Grenzflächendefektdichte und der Bandverbiegung abhängt. Die Optimierung dieses Schichtstapels aus dotierten und intrinsischen amorphen Schichten wurde in dieser Arbeit mit Messungen der Bandverbiegung (SPV) und der Ladungsträgerlebensdauer (QSSPC/PCD) mit simulationsgestützter Auswertung (CA-PCD) untersucht.

Es zeigt sich, dass die Grenzflächenpassivierung mit einer reinen i-Schicht auf beiden Wafertypen vergleichbare Qualität ermöglicht. Demgegenüber ist die Defektdichte ohne i-Schicht und mit Emitter auf beiden Systemen über eine Größenordnung schlechter, und sie verschlechtert sich mit steigender Emitterdotierung. Durch den Einbau einer i-Schicht kann der negative Einfluss des Emitters auf die Defektdichte teilweise kompensiert werden. Das sind typische Ergebnisse für a-Si:H/c-Si-Schichtstapel, die bereits mehrfach in der Literatur diskutiert wurden [93, 96, 97].

In den am HZB hergestellten Zellen ermöglicht der bezüglich der impliziten Leerlaufspannung optimale Schichtstapel bei möglichst dünner i-Schicht auf p-dotierten Wafern aufgrund der geringeren Defektdichten $D_{it} = (1.0 \pm 0.2)10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ eine hohe implizite Leerlaufspannung von $(733 \pm 5) \text{ mV}$. Dabei werden hohe Bandverbiegungen von 850 mV erreicht. Das System auf p-Wafer erlaubt damit Leerlaufspannungen von 730 mV, wie sie auch in der Sanyo HIT-Weltrekordzelle erreicht werden [2]. Der Emitterschichtstapel ist weitgehend fertig optimiert, und die Leerlaufspannung wird im wesentlichen durch die Augerrekombination und die Waferqualität limitiert. Sollten diese hohen Leerlaufspannungen in fertig prozessierten Zellen nicht erreicht werden können, muss der Grund bei der eingesetzten BSF-Schicht oder dem Frontkontakt gesucht werden.

Die Grenzflächendefektdichten der besten Probe auf n-typ Wafer hingegen liegen bei $D_{it} = (4.0 \pm 0.9)10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$, und es ergibt sich eine Leerlaufspannung von maximal $(714 \pm 5) \text{ mV}$. Die höhere Defektdichte führt zu einer maximalen impliziten Leerlaufspannung von nur 714 mV. Da die Augerlimitierung noch nicht erreicht ist, besteht die Möglichkeit durch Absenken der Defektdichte die Leerlaufspannung zu erhöhen. Ein großes Problem besteht in der Bandverbiegung, die bei der Probe mit maximaler impliziter Leerlaufspannung nur 620 mV beträgt und mit einer schlechteren Feldeffektpassivierung einhergeht. Der eingesetzte Frontkontakt hat ebenfalls einen negativen Einfluss auf die Feldeffektpassivierung und scheint die Bandverbiegung weiter abzusenken. Es besteht also Optimierungsbedarf beim Absenken der a-Si:H/c-Si-Grenzflächendefektdichte, beim Emitterdesign, das die Dunkelbandverbiegung bestimmt, und bei der Austrittsarbeit des Frontkontakts.

Auch für andere Kombinationen von Emitterdotierung und i-Schichtdicke ist das System auf p-Wafer überlegen. Dies betrifft die implizite Leerlaufspannung, die Dunkelbandverbiegung und die Defektdichte. Dieses Ergebnis ist spezifisch für die am HZB deponierten Schichtstapel. Theoretisch ist das Schichtsystem mit n-dotiertem Wafer nicht unterlegen. Ganz im Gegenteil hat die Sanyo HIT Weltrekordzelle einen n-dotierten Absorber [2]. Ein prinzipieller Vorteil des a-Si:H(p)/c-Si(n) Schichtstapel könnte darin bestehen, dass durch den höheren Valenzbandoffset das a-Si:H Fermi-niveau nicht so nah an der Bandkante liegen muss, um dieselbe Dunkelbandverbiegung im c-Si zu erzeugen. Dieser Vorteil kann in den HZB Schichtstapeln offensichtlich noch nicht ausgenutzt werden.

Rekombination und Leerlaufspannung in der poly-Si-Zelle

Die Dünnschichtsolarzelle mit poly-Si-Absorber wurde als sehr komplexes System vorgestellt, für das viele Details, wie räumliche und energetische Defektverteilung im Absorber und an den Grenzflächen, nicht bekannt sind. Für eine exakte Beschreibung der Zelle sind 3D Simulationen nötig, da die Defektverteilung im Absorber vermutlich inhomogen ist und Punktkontakte eingesetzt werden. In dieser Arbeit wurde jedoch gezeigt, dass auch der vereinfachende Ansatz von numerischen 1D Simulationen mit AFORS-HET sinnvoll ist. So war es möglich, das Zellverhalten unter Parametervariationen von Dotierung, Defektdichte und Dicke des Absorbers zu simulieren.

Durch simulationsgestützte Analyse der Strom-Spannungs-Kennlinien konnte gezeigt werden, dass die effizienzlimitierenden Defekte zumindest anteilig im Volumen des Absorbers lokalisiert sind und dass die Absorberdefektdichte mit der Dotierung steigt. Das Produkt aus Defektdichte und Einfangquerschnitt, das durch Modellanpassung an die experimentellen Strom-Spannungs-Kennlinien bestimmt werden kann, beträgt minimal $N_{\text{tr}}^{\text{min}} \times \sigma = 13 \text{ cm}$, bei einer Leerlaufspannung von $V_{\text{oc}} = 484 \text{ mV}$, bei der Zelle mit der geringsten Dotierung. Die maximale Defektdichte von $N_{\text{tr}}^{\text{min}} \times \sigma = 70 \text{ cm}$ und eine Leerlaufspannung von $V_{\text{oc}} = 477 \text{ mV}$ hat die Zelle mit der stärksten Dotierung.

Der limitierende Defekttyp im Absorber konnte allerdings noch nicht identifiziert werden. Möglich sind Defekte an Korngrenzen, Versetzungsdefekte oder Defekte durch Fremdatome. Die in dieser Arbeit durchgeführten Lebensdauermessungen geben ein Indiz dafür, dass Korngrenzendefekte vorhanden sind. Unter der Annahme von Korngrenzen mit Potentialbarrieren können die hohen Ladungsträgerlebensdauern von bis zu $100 \mu\text{s}$, die in den Absorberschichten auf Glas gemessen wurden, mit dem Depletion Region Modulation-Effekt (DRM-Effekt, Modulation der Verarmungszone) erklärt werden können. In der Literatur finden sich jedoch Untersuchungen, die darauf hindeuten, dass die Ladungsträgerlebensdauer durch Versetzungsdefekte bestimmt wird [146]. In Untersuchungen am HZB zeigt sich weiterhin, dass bei Zellen auf ZnO eine hohe Verunreinigung durch Zn und Al Atome im Absorber vorliegt [46].

Im Rahmen einer Sensitivitätsanalyse konnte festgestellt werden, dass sich der Einsatz einer a-Si:H BSF Schicht vorteilhaft auf die Leerlaufspannung auswirkt sobald Absorber mit $N_{\text{tr}}^{\text{min}} \times \sigma < 20 \text{ cm}$ bei einer Dotierung von $N_{\text{A}} = 1.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ realisiert werden können. Bei exzellenter Absorberqualität und mit Einsatz einer a-Si:H BSF Schicht hat auch die Dünnschichtzelle das Potenzial, so hohe Leerlaufspannungen wie die Waferzelle zu erreichen. Absorber höherer Qualität, die mit alternativen Kristallisierungsmethoden erreicht werden, sind auch am HZB in Entwicklung. So wurden mit der Methode der Elektronenstrahl-Kristallisation bereits Korngrößen von 10 cm^2 realisiert [151].

Allgemeine Ergebnisse zur Analyse von Ladungsträgerlebensdauern in a-Si:H/c-Si-Schichtsystemen

Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine Analytik entwickelt, die es ermöglicht die $\tau(\Delta n)$ -Kurve mit Hilfe eines semi-analytischen Modells auszuwerten. Diese computergestützte Auswertung der Photoleitfähigkeit (computer-aided PCD, CA-PCD) erlaubt es

zwischen Defekt- und Feldeffektpassivierung an der a-Si:H/c-Si-Grenzfläche zu unterscheiden und ermöglicht es so Grenzflächendefektdichten und die effektive Ladungen der a-Si:H/c-Si-Grenzfläche und der a-Si:H-Schicht zu bestimmen.

Die CA-PCD Methode bietet einen großen Vorteil gegenüber dem sonst in der Literatur üblichen Vergleich der Ladungsträgerlebensdauer bei einer festen Überschussladungsträgerkonzentration, da sich typischerweise Feld- und Defektpassivierung bei unterschiedlichen Injektionsniveaus unterschiedlich stark überlagern und aus der Ladungsträgerlebensdauer somit keine direkten Schlüsse auf die Defektdichte gezogen werden können. Die Analyse der Ladungsträgerlebensdauer bei einer Sonne korreliert für gut passivierte Proben mit identischem Absorber gut mit der Defektdichte. Für einen Vergleich von Strukturen auf verschiedenen dotierten Absorbern oder mit schlecht passivierten Grenzflächen muss die implizite Leerlaufspannung berechnet und die Defektdichte und effektive Festladung mit der CA-PCD Methode bestimmt werden.

Die CA-PCD Methode wurde mit einem semi-analytischen Simulator durchgeführt, der im Rahmen dieser Arbeit entwickelt wurde. Er beinhaltet alle wichtigen in der Literatur bekannten Modelle zur Beschreibung der Ladungsträgerlebensdauer in a-Si:H/c-Si-Strukturen und geht damit über die bisher in der Literatur [30, 32] genutzten Simulationen zur Auswertung von QSSPC/PCD-Messungen hinaus. Insbesondere wurde in dieser Arbeit eine Näherung zur Berechnung der injektionsabhängigen Umladung der Defekte in der a-Si:H Schicht und der a-Si:H/c-Si-Grenzfläche entwickelt und in den semi-analytischen Simulator integriert.

Es konnte in einer Simulationsstudie gezeigt werden, dass sich die Defekte im a-Si:H und an der Grenzfläche umladen und dass sich im Allgemeinen keine Festladung an der Grenzfläche finden lässt, die die Bandverbiegung über den gesamten Injektionsbereich beschreiben kann. Allerdings lässt sich eine effektive Festladung einführen, die zumindest im Messbereich der QSSPC/PCD Messung eine gute Näherung bei der Berechnung der Bandverbiegung darstellt. Diese Näherung wurde bei der CA-PCD Methode eingesetzt. Die experimentellen Ergebnisse zur Bandverbiegung und Feldeffektpassivierung, die mit der CA-PCD Methode und der SPV-Methode gewonnen werden, können jedoch nur unter Beachtung der injektionsabhängigen Umladung der Defekte konsistent erklärt werden.

Allgemeine Ergebnisse zur Analyse von Ladungsträgerlebensdauern in dünnen poly-Si-Absorbern

Die Sensitivität des QSSPC/PCD-Aufbaus für Waferproben reicht nicht aus, um Dünnschichtproben zu untersuchen. Deshalb wurde in dieser Arbeit ein hochempfindlicher Eigenbau für PCD-Messungen (HS-PCD) auf die Eignung zur Messung von dünnen poly-Si-Absorberschichten untersucht. Die mit der HS-PCD Methode bestimmten Ladungsträgerlebensdauern betragen $1 \mu\text{s}$ bis $100 \mu\text{s}$, während die aus den Leerlaufspannungen berechneten effektiven Ladungsträgerlebensdauern der poly-Si-Absorber zwischen 0.1 ns und 10 ns liegen. Es wurde anhand von numerischen Simulationen qualitativ gezeigt, dass die hohen Ladungsträgerlebensdauern und die Injektionsabhängigkeit mit Hilfe des DRM-Effekts erklärt werden können. Sobald der DRM-Effekt auftritt, ist der Zusammenhang zwischen effektiver Ladungsträgerlebensdauer und Leerlaufspannung wesentlich komplizierter als in den Waferzellen, und eine hohe Leer-

laufspannung ist nicht mehr mit hohen Ladungsträgerlebensdauern verbunden. Die Lebensdauermessungen konnten unter Berücksichtigung des DRM-Effekts konsistent zu den mit Strom-Spannungs-Kennlinien erklärt werden.

Als wichtiges Ergebnis zu der Messung von effektiven Ladungsträgerlebensdauern in dünnen Schichten soll hier weiterhin festgehalten werden, dass diese im Messbereich $< 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, in dem auch das Injektionsniveau bei AM1.5 Beleuchtung fällt, eine starke Injektionsabhängigkeit aufweisen. Lebensdauermessungen an dünnen Schichten müssen deshalb immer mit Injektionsniveau angegeben werden. Zur Bestimmung der Defektdichte mit Hilfe von Lebensdauermessungen sind Messungen bei höheren Injektionsdichten nötig, in denen der DRM-Effekt nicht mehr relevant ist. Hierzu müssen die experimentellen Methoden weiterentwickelt werden.

Ergebnisse zur Bestimmung von Ladungsträgerlebensdauern mit SPV-Transienten

Es wurde eine Methode zur Berechnung der Ladungsträgerlebensdauer aus der SPV-Transiente entwickelt (TrSPV). Unter Berücksichtigung der Demberspannung erfordert dieses Verfahren eine numerische Rechnung. Unter Vernachlässigung der Demberspannung konnte ein analytischer Zusammenhang zur Umrechnung der SPV-Transiente in die effektive Lebensdauer gefunden werden. Weiterhin zeigt sich, dass bei halb abgefallener Bandverbiegung die Lebensdauer in Näherung durch die reziproke Ableitung des SPV-Signals nach der Zeit gegeben ist. Dieser Bereich wurde somit als besonders günstig zur Berechnung der Lebensdauer identifiziert.

In diesem Bereich stimmen die mit der SPV- und der PCD Methode bestimmten Lebensdauern von einseitig passivierten SiO/Si-Proben in der Größenordnung überein. Für die a-Si:H/c-Si-Solarzellenstrukturen mit Emitter und BSF ergeben sich jedoch größere Abweichungen zwischen den beiden Methoden. Es wird vermutet, dass der Grund dafür in der injektionsabhängigen Umladung der a-Si:H Defekte liegt.

8.0.2. Ausblick

Charakterisierung und Simulation von a-Si:H/c-Si-Zellen

Zur CA-PCD Analyse der $\tau(\Delta n)$ -Kurve wurde hier das einfache Modell mit effektiver Festladung eingesetzt. Um die Genauigkeit der Analyse zu erhöhen und die Injektionsabhängigkeit der Ladung konkret zu berücksichtigen sowie den Zusammenhang zur Dunkelbandverbiegung direkt herstellen zu können, wäre es wünschenswert die CA-PCD Analyse unter Beachtung der injektionsabhängigen Umladung der Defekte durchzuführen. Dies wird momentan im Wesentlichen durch die erhöhte Rechenzeiten verhindert.

Da der injektionsabhängige Ladungszustand der Defekte die Feldeffektpassivierung bestimmt, ist diese auch für die Solarzellencharakteristik relevant. Es wäre somit interessant in einer Simulationsstudie zu analysieren, wie man durch Design der a-Si:H Schicht (Defektdichte und Lage im Volumen) diese Feldeffektpassivierung über einen möglichst weiten Injektionsbereich aufrechterhalten kann, um so die Solarzellencharakteristik zu verbessern. Unter diesem Gesichtspunkt wäre es auch wünschenswert, den genauen Zusammenhang zwischen der Lebensdauer in Niedriginjektion und der

Solarzellencharakteristik zu erarbeiten. Hinweise dazu finden sich in der Literatur zur Berechnung von pseudo-IU Kennlinien aus QSSPC/PCD-Messungen [137, 138].

Die Methode zur Bestimmung von Ladungsträgerlebensdauern aus SPV-Transienten hat eine höhere Sensitivität als die QSSPC/PCD-Messungen. Es ist somit möglich, die Ladungsträgerlebensdauer bei niedrigeren Injektionsniveaus zu bestimmen. Zudem bietet sich der Vorteil, dass die injektionsabhängige Bandverbiegung direkt bestimmt werden kann. Dazu muss die Auswertung dieser SPV-Transienten weiterentwickelt werden. Es wäre Möglich die injektionsabhängige Umladung der a-Si:H Schicht mit dem semi-analytischen Simulator zu berechnen, der für die Auswertungen der QSSPC/PCD-Messungen entwickelt wurde.

Bei der numerischen Simulation von a-Si:H/c-Si-Zellen beschränkt sich diese Arbeit bewusst auf die Leerlaufspannung. Dies liegt daran, dass bei der Berechnung von der Strom-Spannungs-Kennlinie von a-Si:H/c-Si-Zellen Tunnelprozesse relevant sind [8, 98–100]. Dazu wurden vom Autor in Zusammenarbeit mit dem LGEP¹ bereits zwei Tunnelmodelle in AFORS-HET implementiert, die in dieser Arbeit jedoch nicht diskutiert wurden. Die implementierten Tunnelprozesse beschreiben das Intraband-tunneln entsprechend dem Model von Wu und Yang [152] und das Tunneln von Band in Defekte entsprechend dem Modell von Hurkx et al. [153, 154]. Hier wird allerdings die These vertreten, dass insbesondere der Zweistufenprozess aus Tunneln zwischen c-Si Band und a-Si:H Defekten und der Emissions- bzw. Rekombinationsprozess im a-Si:H entscheidend für den Transport sein könnte. Es wäre interessant, eine Näherung für diesen Prozess zu erarbeiten, die sich in AFORS-HET implementieren lässt.

Charakterisierung und Simulation von poly-Si-Zellen

Eine experimentelle Untersuchung der Lebensdauer in dünnen Schichten erfordert alternative Methoden, die eine Zeitauflösung im Bereich von Nanosekunden ermöglichen und eine Messung im Injektionsbereich außerhalb von DRM- und Trapping-Effekten erlauben. Eine Möglichkeit, die Schwierigkeiten bei der Zeitauflösung zu beheben und gleichzeitig transiente Effekte bei der Messung auszuschließen, wären Photoleitfähigkeitsmessungen im Gleichgewicht bei konstanter Beleuchtung mit variabler Intensität durchzuführen.

Die poly-Si-Zelle wurde als sehr komplexes System vorgestellt, das mit großen Herausforderungen für die numerische Simulation verbunden ist. Sollten sich durch hohe Defektdichten an den Korngrenzen Potentialbarrieren im poly-Si-Absorber ausbilden, so sind die Bandstruktur, die Ladungsträgerdichten und die Ladungsträgerströme lateralen Inhomogenitäten unterworfen, und es müssen echte 3D Simulationen eingesetzt werden. In Zusammenarbeit mit dem WIAS Institut Berlin wurde begonnen, die Zelle mit einem 2D Simulator unter Ausnutzung der Zylindersymmetrie eines Kornes zu simulieren, und in Zusammenarbeit mit dem TU Berlin soll eine echte 3D Simulation entwickelt werden, mit der auch das Punktkontaktschema untersucht werden kann. Als Methode, die Aufschluss darüber geben könnte ob Potentialbarrieren an den Korngrenzen auftreten, wäre die Kelvin-Sonden-Kraftmikroskopie einzusetzen [148, 149].

¹Laboratoire de Génie Électrique de Paris, Paris, Frankreich

A. Experimentelle Methoden

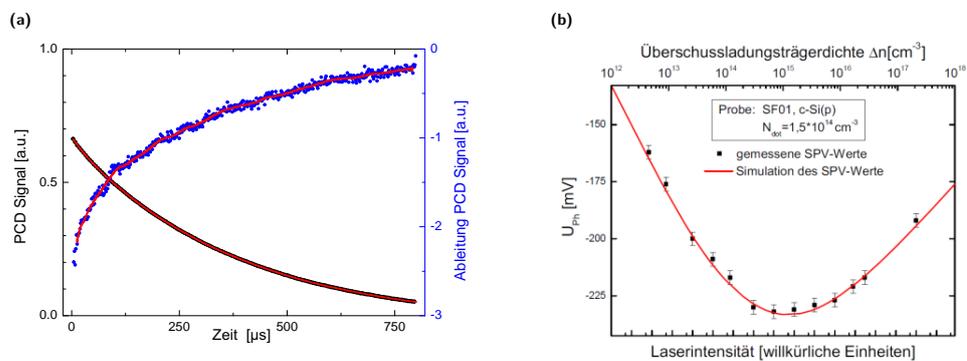


Abbildung A.1.: Abb. (a) zeigt HS-PCD Signal und Signalleitung mit Glättung (rot). Abb (b) zeigt die Bestimmung der Überschussladungsträgerkonzentration des SPV Aufbaus mit Homogenisierer (aus [109]).

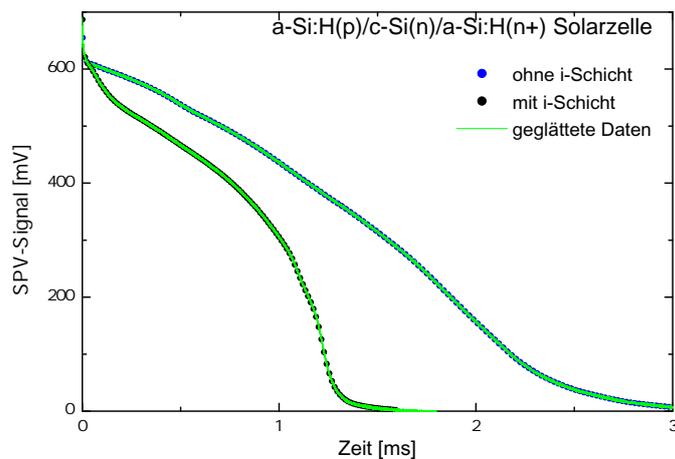


Abbildung A.2.: SPV-Transienten von a-Si:H/c-Si Solarzellenproben mit Emitter und BSF. Verglichen wird eine Probe mit und eine Probe ohne i-Schicht.

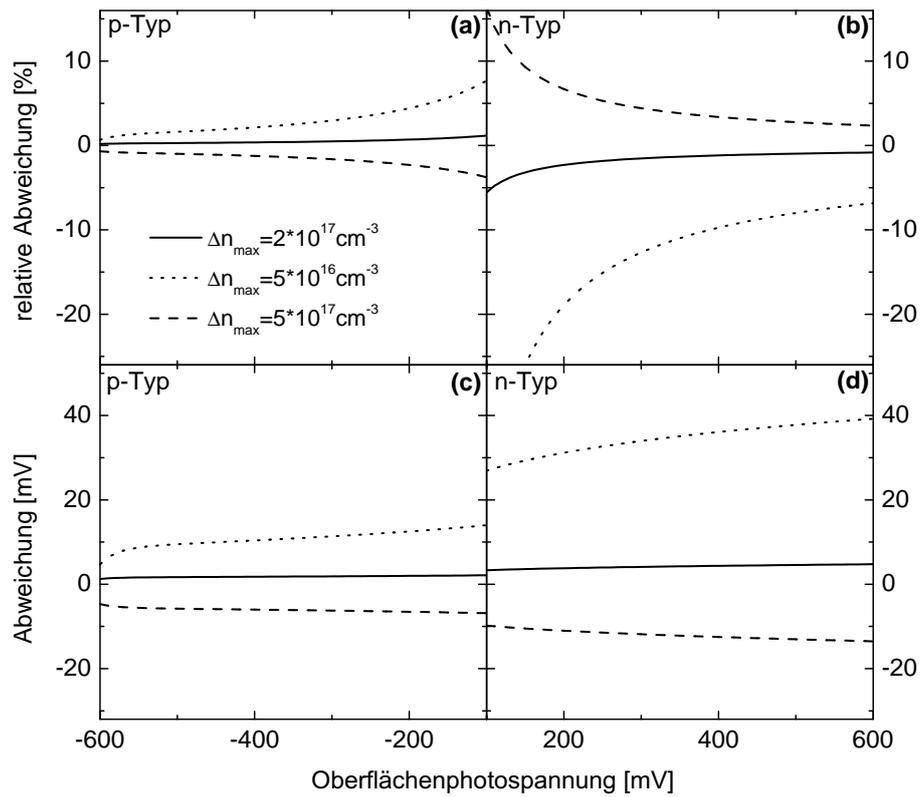


Abbildung A.3.: Relativer (a,b) und absoluter Fehler (c,d) bei der Bestimmung der Dunkelbandverbiegung mittels SPV Messungen durch unbekannte initialer Ladungsträgerkonzentration nach der Laseranregung Δn_{laser} für Siliziumwaferproben mit unterschiedlichem Dotiertyp und mit einer Dotierung von 10^{15} cm^{-3} .

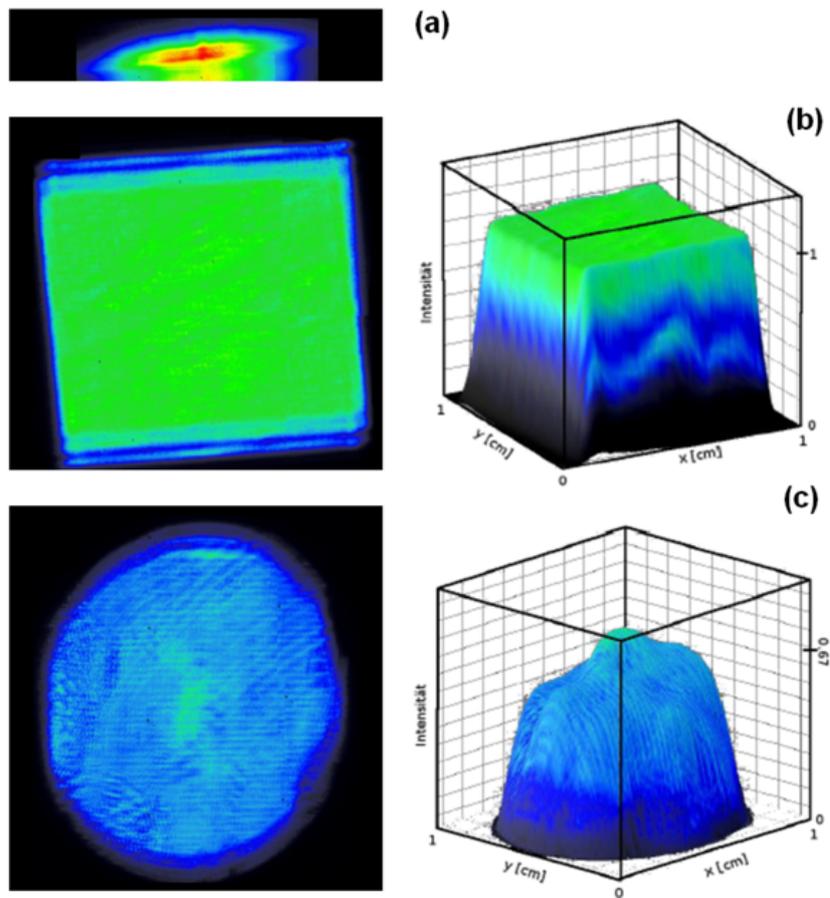
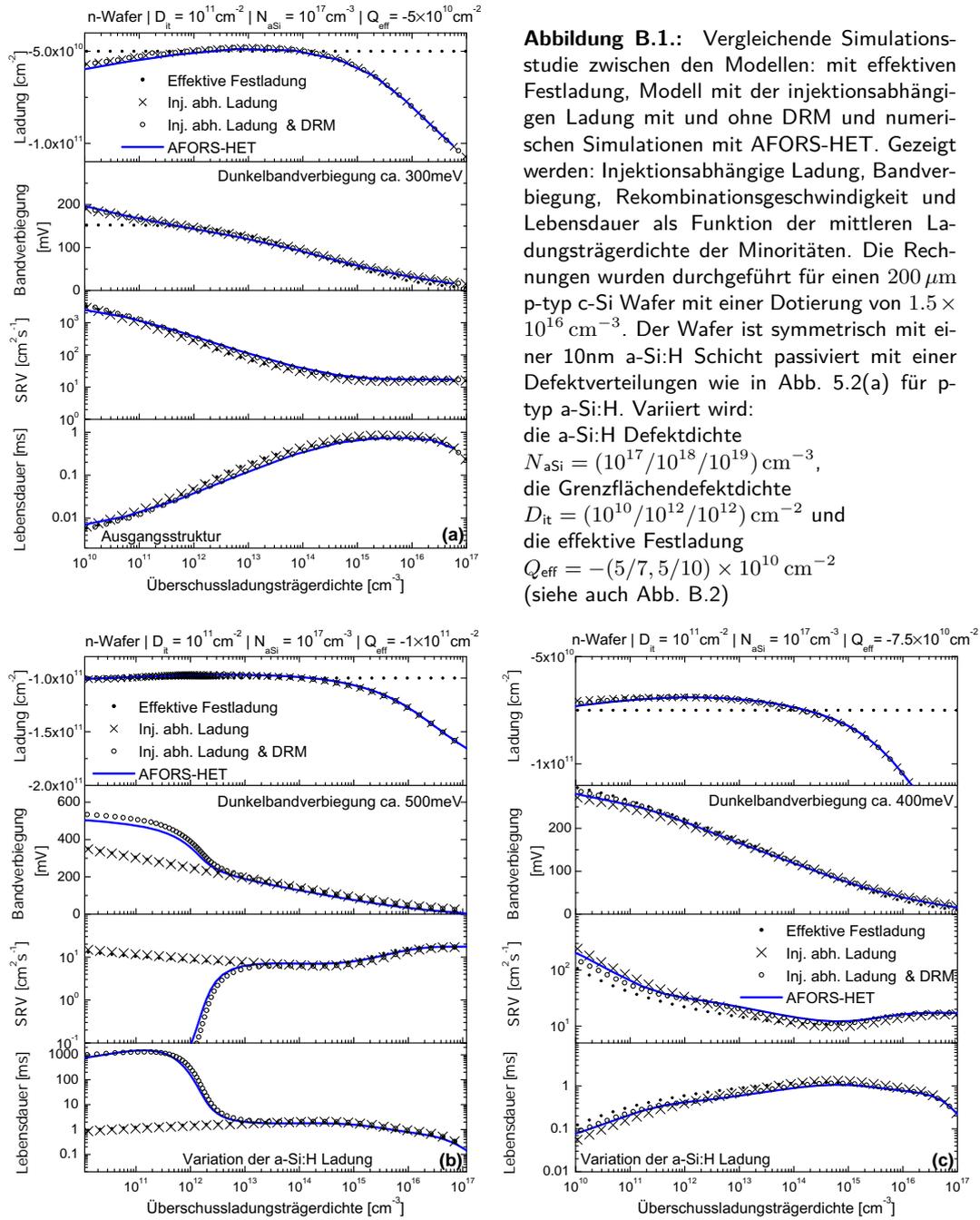


Abbildung A.4.: Strahlaufweitung und Homogenisierung im SPV-Messplatz. Laserintensitätsprofil ohne Homogenisierer (a), nach durchgang durch den Homogenisierer (b) und nach durchgang durch den Homogenisierer und das TCO beschichtete Quarzfenster des SPV-Aufbaus (c).

B. Simulationsstudie zur Ladungsträgerlebensdauer



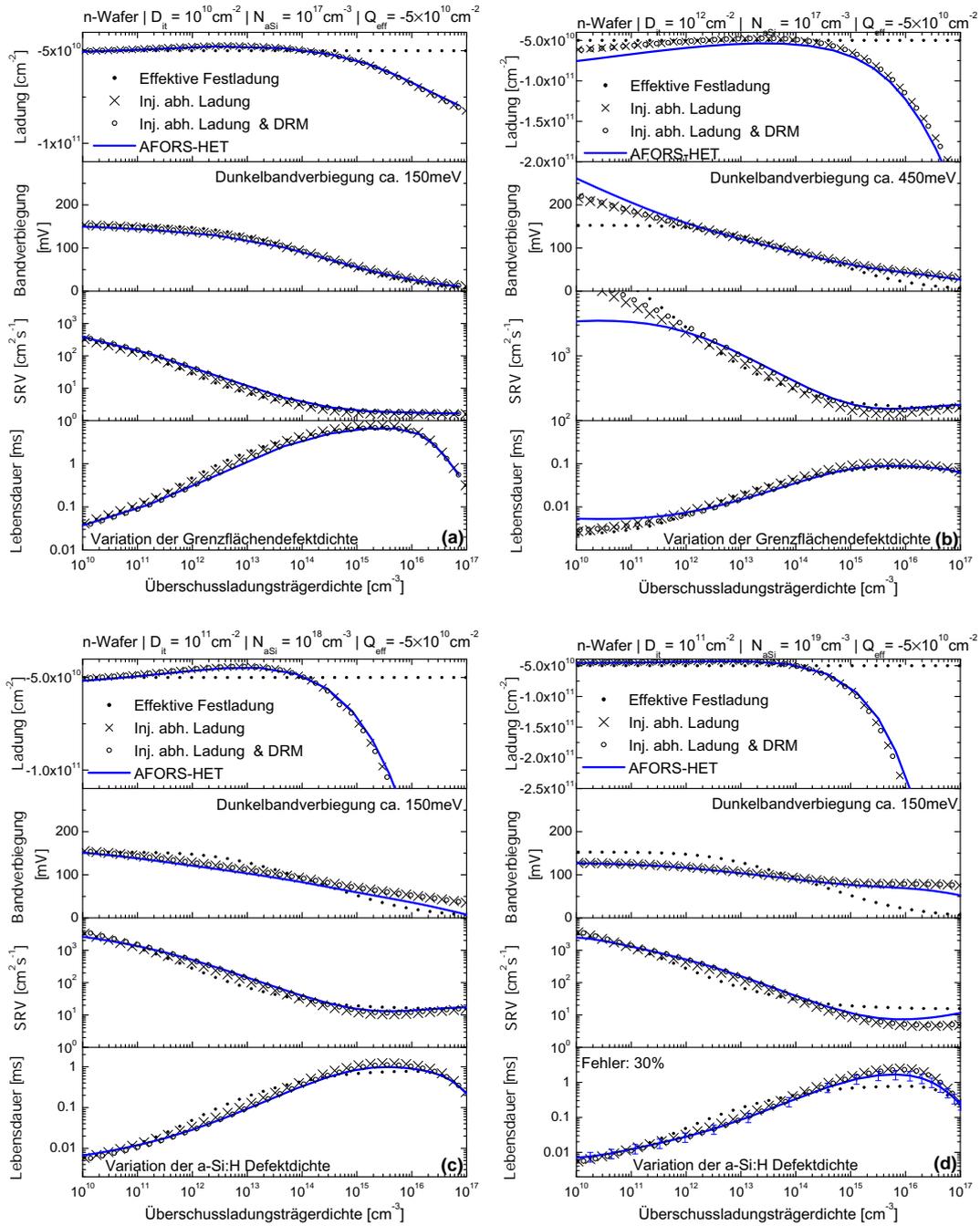


Abbildung B.2.: Vergleichende Simulationsstudie (n-typ Wafer)

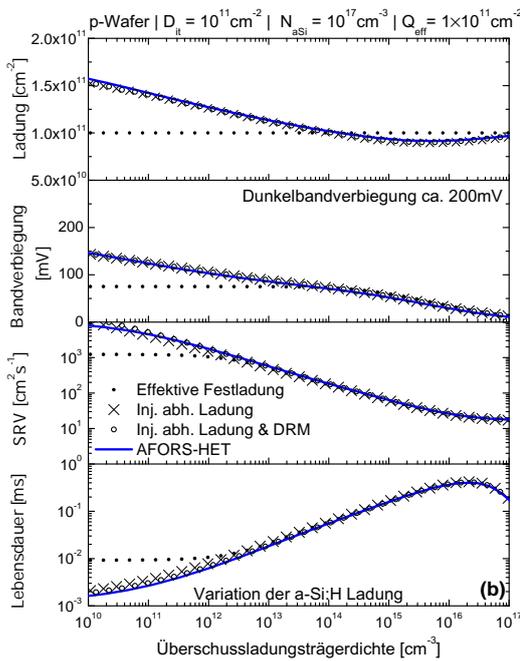
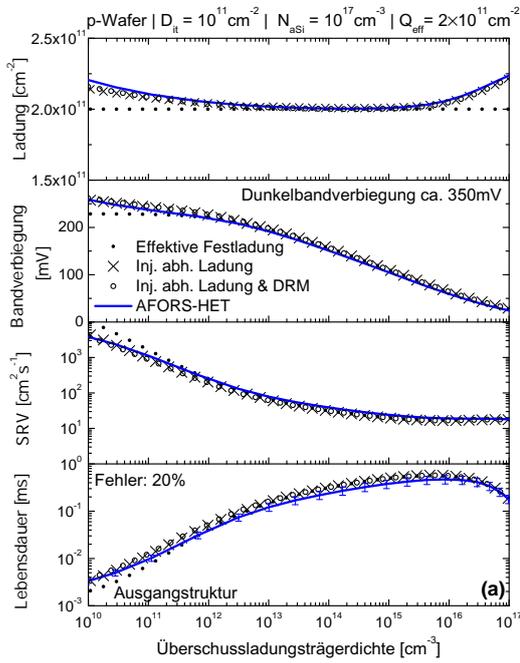
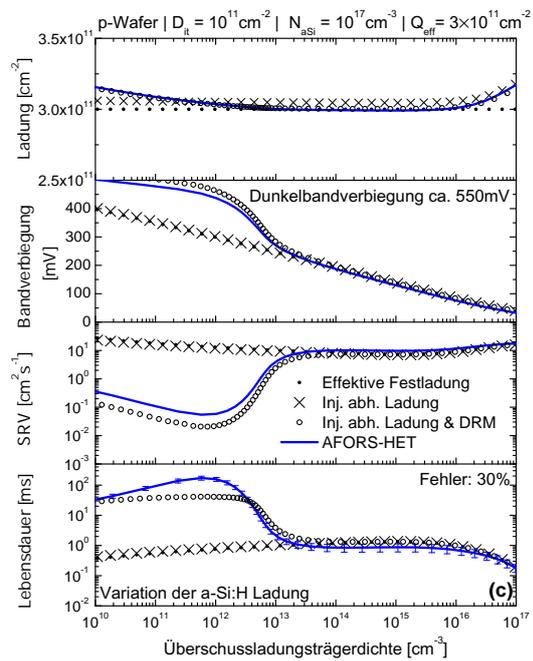


Abbildung B.3.: Vergleichende Simulationstudie zwischen den Modellen: mit effektiven Festladung, Modell mit der injektionsabhängigen Ladung mit und ohne DRM und numerischen Simulationen mit AFORS-HET. Gezeigt werden: Injektionsabhängige Ladung, Bandverbiegung, Rekombinationsgeschwindigkeit und Lebensdauer als Funktion der mittleren Ladungsträgerdichte der Minoritäten.

Die Rechnungen wurden durchgeführt für einen 200 μm p-typ c-Si Wafer mit einer Dotierung von $1.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Der Wafer ist symmetrisch mit einer 10nm a-Si:H passiviert mit Defektverteilungen wie in Abb. 5.2 für n-typ a-Si:H. Variiert wird:

- die a-Si:H Defektdichte $N_{\text{aSi}} = (10^{17}/10^{18}/10^{19}) \text{ cm}^{-3}$,
 - die Grenzflächendefektdichte $D_{\text{it}} = (10^{10}/10^{12}/10^{12}) \text{ cm}^{-2}$ und
 - die effektive Festladung $Q_{\text{eff}} = (1/2/3)10^{11} \text{ cm}^{-2}$
- (siehe auch: Abb. B.4 und Abb. B.5)



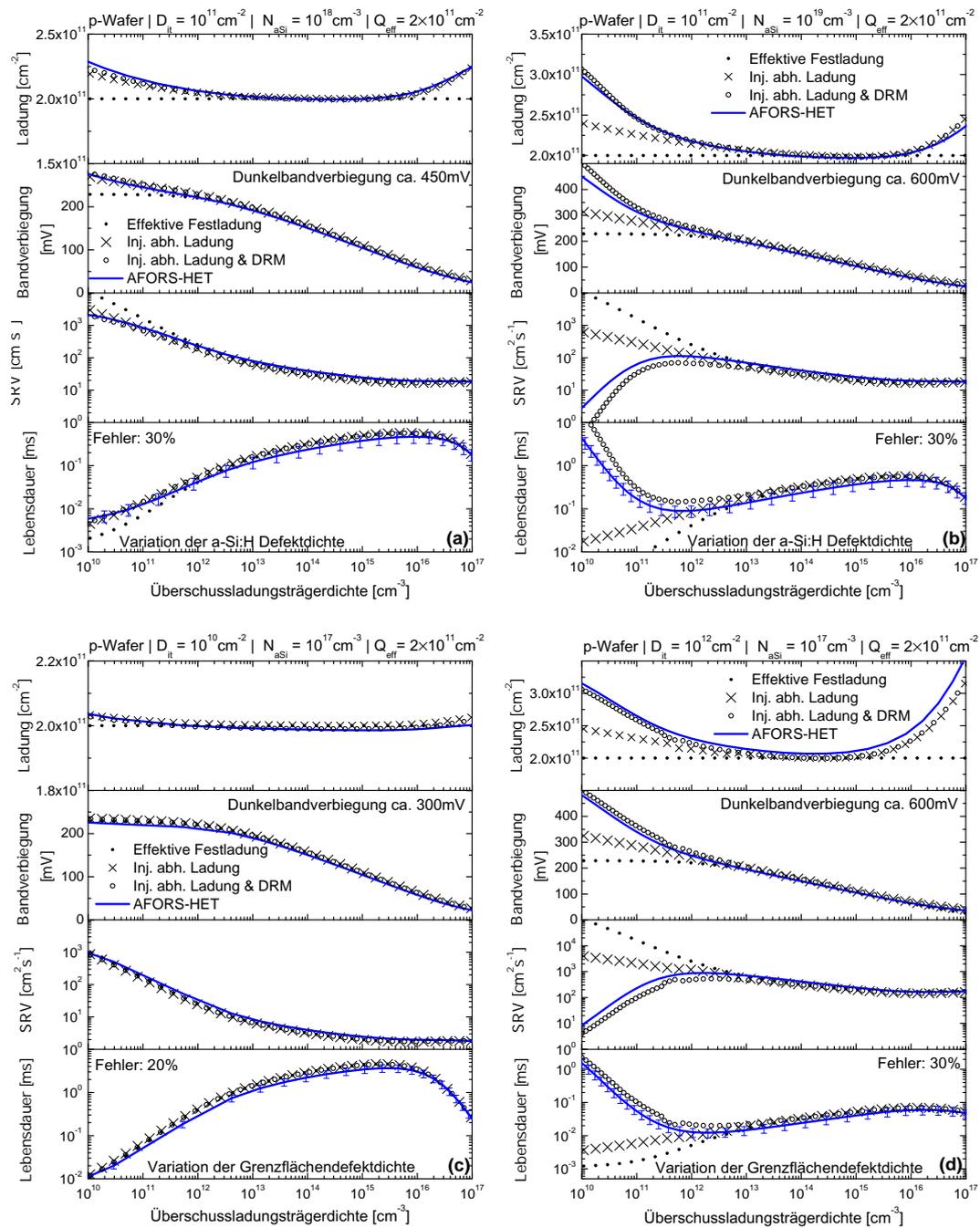


Abbildung B.4.: Vergleichende Simulationstudie (p-typ Wafer)

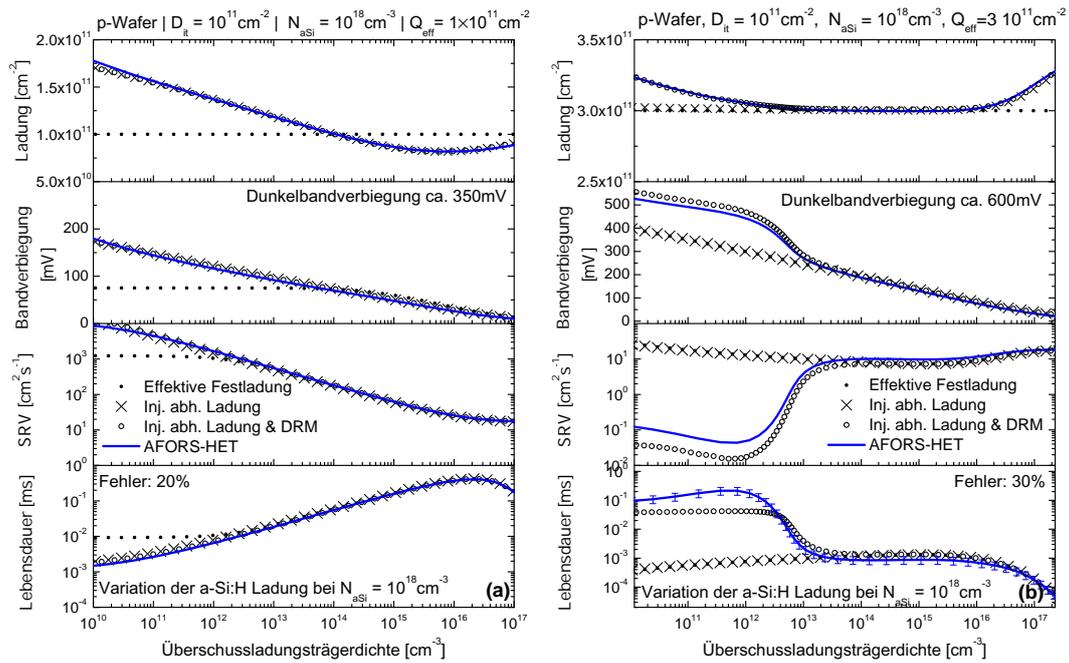


Abbildung B.5.: Vergleichende Simulationstudie (p-typ Wafer)

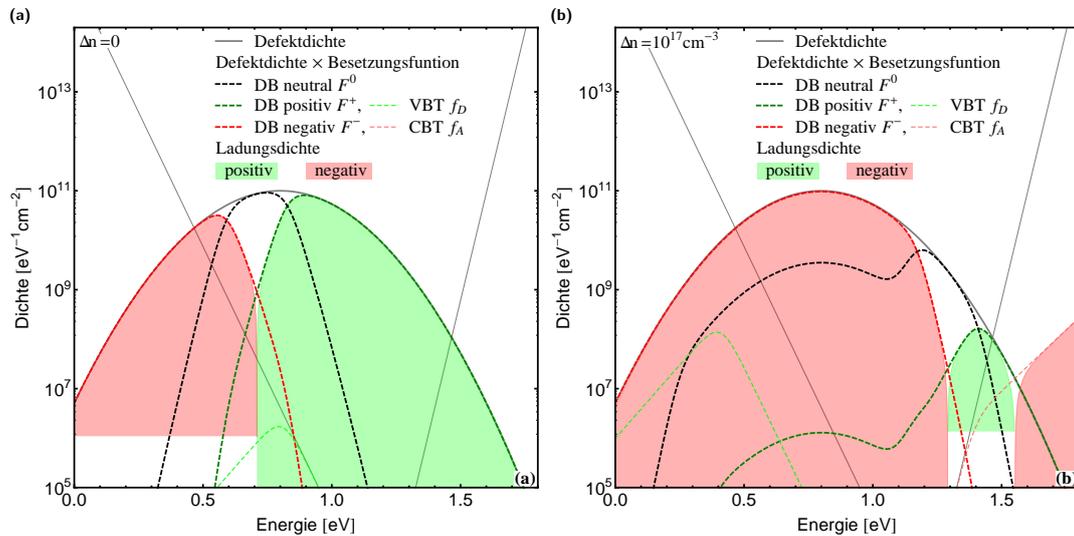


Abbildung B.6.: Defektverteilung, Defektbesetzung und Ladungsdichten für n-typ a-Si:H im Dunkeln mit $\Delta n = 0$ (a) und bei starker Anregung, $\Delta n = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (b). Im Gegensatz zu Abb. 5.5 wurde die Rechnung hier mit den Gleichungen für korrelierte amphoterische Defekte durchgeführt. Für die hier gewählten Parameter sind die Abweichungen bei der Berechnung der Ladung vernachlässigbar klein (Vergleiche injektionsabhängige Ladung für korrelierte und unkorrelierte Defekte in Abb. 5.4(a)).

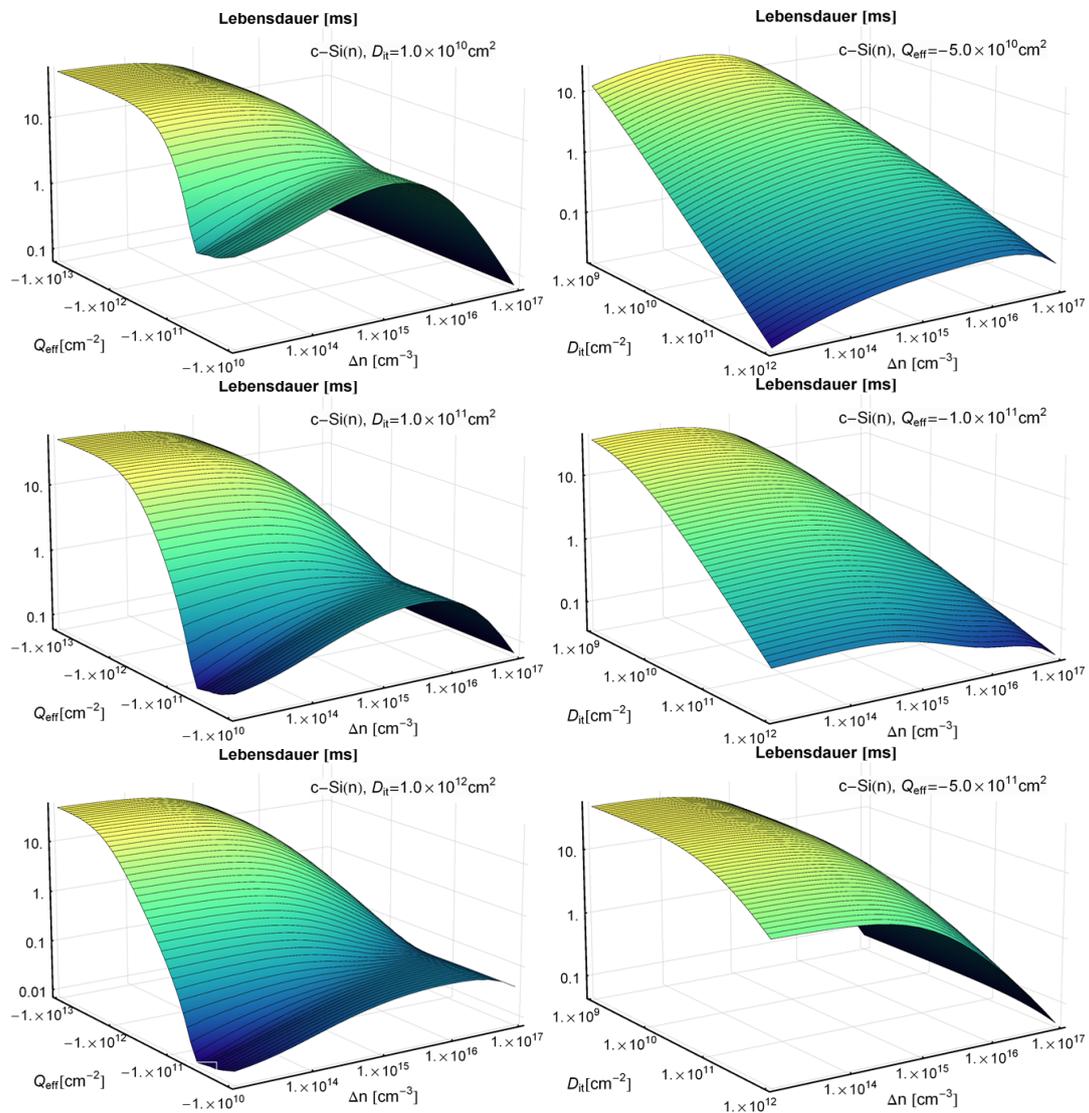


Abbildung B.7.: Ladungsträgerlebensdauer in Abhängigkeit der effektiven Festladung (Abbildungen linke Spalte) und der Grenzflächendefektdichte (Abbildungen rechte Spalte) für einen 3 Ohm cm $c\text{-Si}(n)$ Wafer. Für die amorphe Schicht wurde eine Defektverteilung wie in Abb. 5.2(a) für $a\text{-Si:H}(p)$ mit einer maximalen DB-Defektdichte von $N_{a,Si} = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ angenommen. Die Grenzflächendefektverteilung wird als Gaußverteilung in der Bandmitte angenommen (Vergleiche Abb. 5.2(a)). Die Rekombination wird mit den Gleichungen für korrelierte amphotere DB-Defekte berechnet.

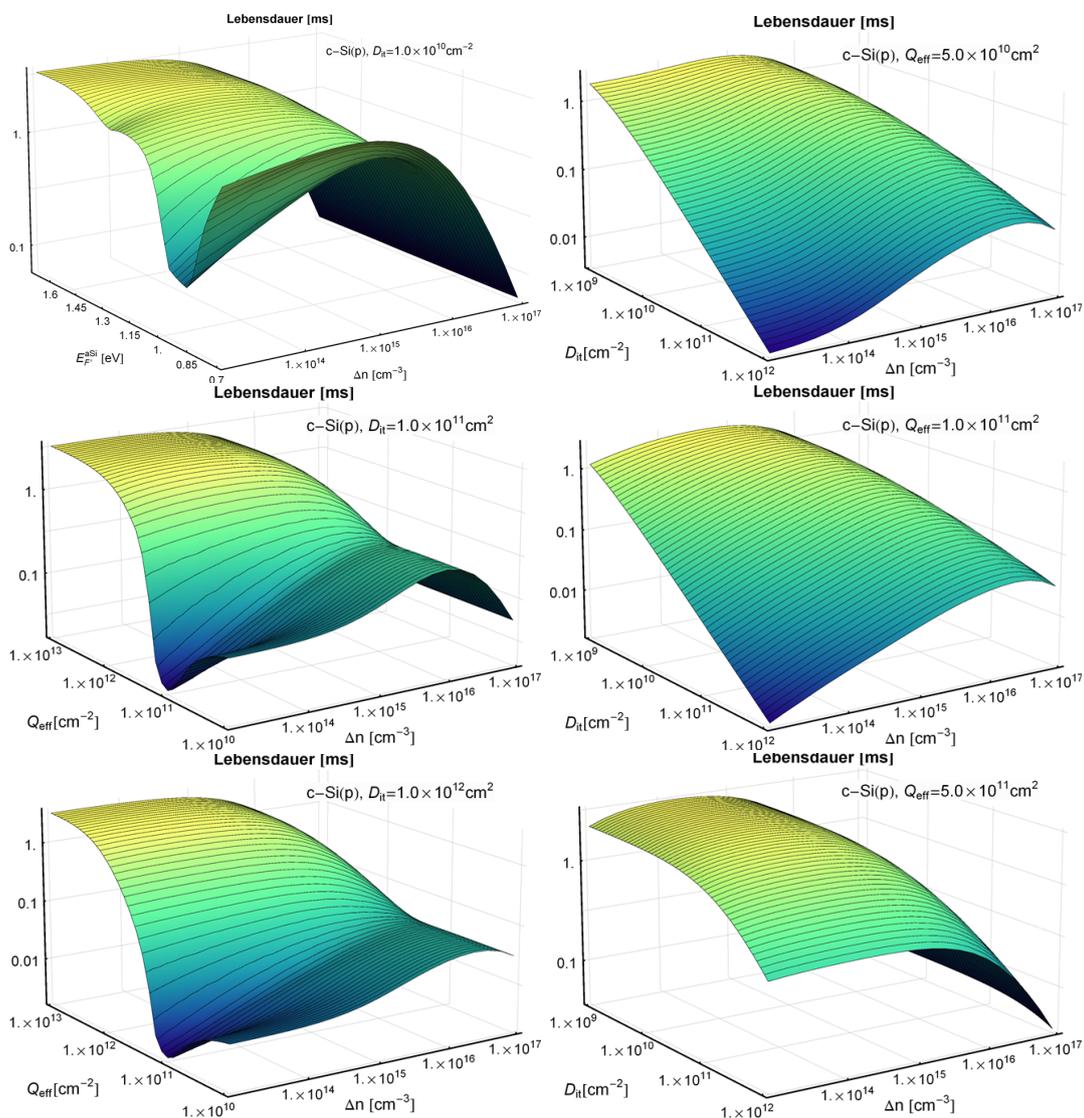


Abbildung B.8.: Ladungsträgerlebensdauer in Abhängigkeit der effektiven Festladung (Abbildungen linke Spalte) und der Grenzflächendefektdichte (Abbildungen rechte Spalte) für einen 1 Ohm cm c-Si(p) Wafer. Für die amorphe Schicht wurde eine Defektverteilung wie in Abb. 5.2(a) für a-Si:H(n) mit einer maximalen DB-Defektdichte von $N_{\text{aSi}} = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ angenommen. Die Grenzflächendefektverteilung wird als Gaußverteilung in der Bandmitte angenommen (Vergleiche Abb. 5.2(a)). Die Rekombination wird mit den Gleichungen für korrelierte amphotere DB-Defekte berechnet.

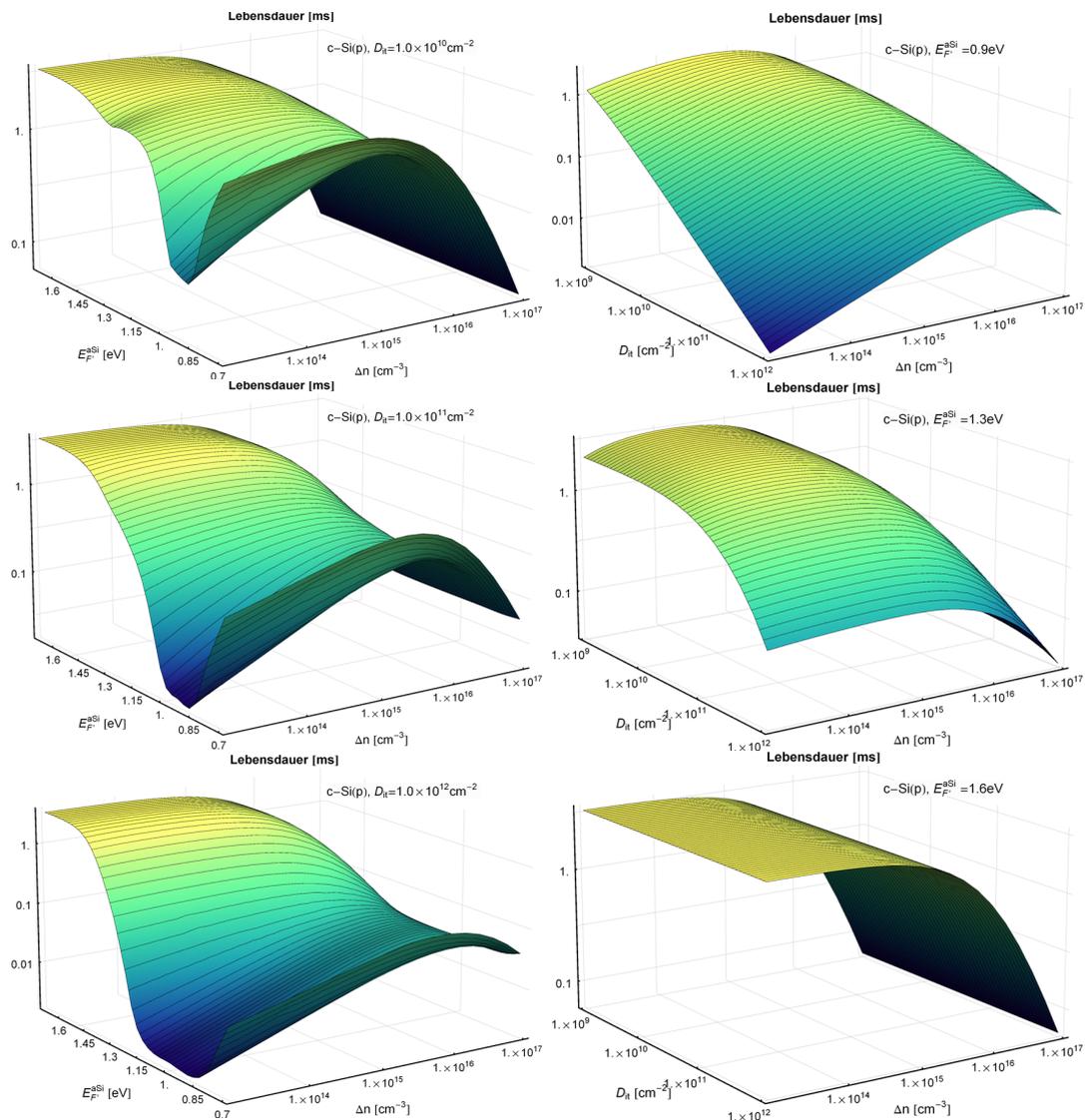


Abbildung B.9.: Ladungsträgerlebensdauer in Abhängigkeit des a-Si:H Fermi-niveaus (Abbildungen linke Spalte) und der Grenzflächendefektdichte (Abbildungen rechte Spalte) für einen 1 Ohm cm $c\text{-Si}(p)$ Wafer. Die a-Si:H Defektverteilung ist in Abhängigkeit des Fermi-niveaus bei der Glastemperatur berechnet. Die inj. abhängige Ladung wurde unter Beachtung korrelierter amphotere DB-Defekte und SRH Defekten in den Bandausläufern berechnet. Die Grenzflächendefektverteilung wird als Gaußverteilung in der Bandmitte angenommen. Die Rekombination wird mit den Gleichungen für korrelierte amphotere DB-Defekte berechnet.

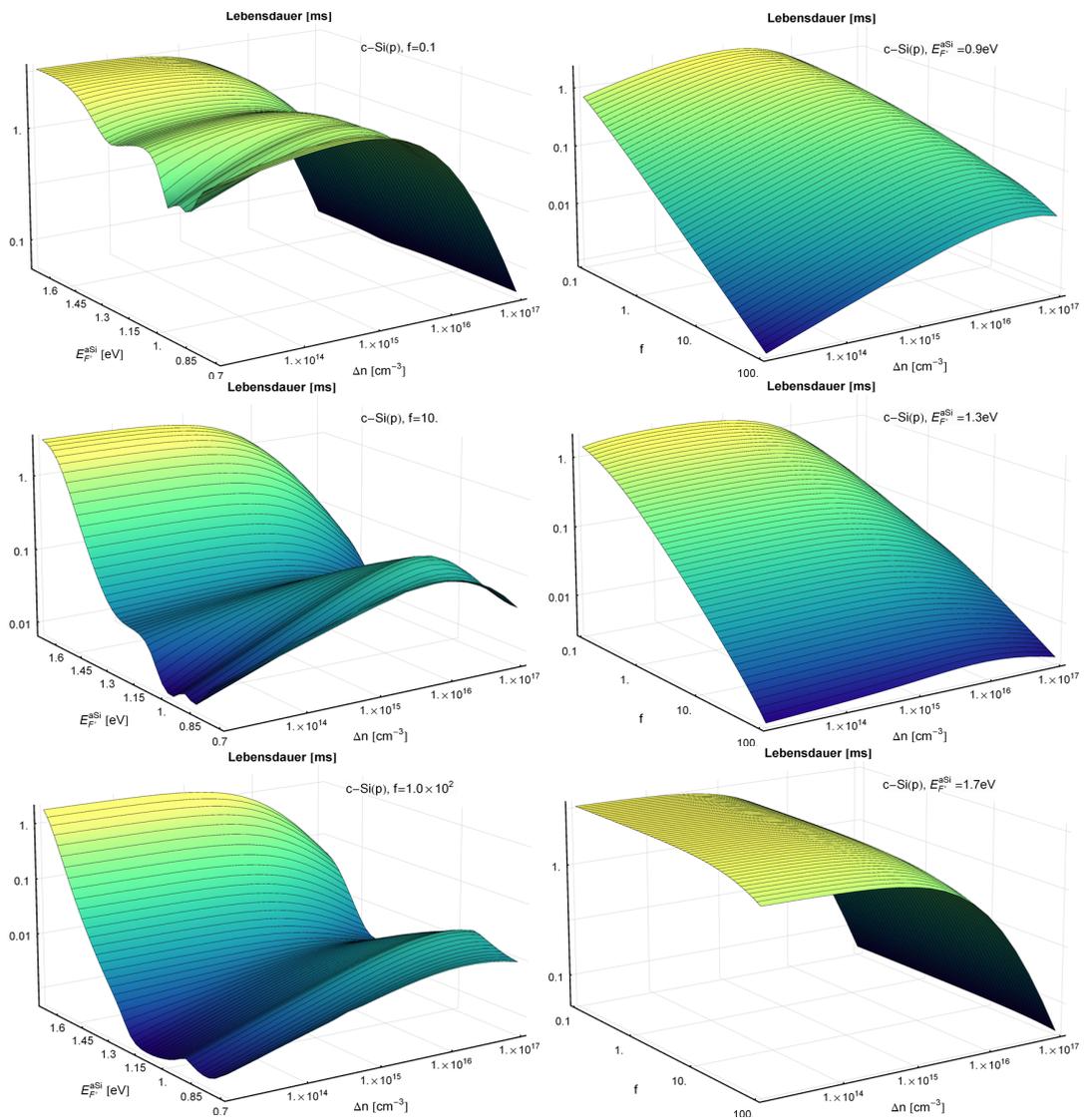


Abbildung B.10.: Ladungsträgerlebensdauer in Abhängigkeit des a-Si:H Fermi-niveaus (Abbildungen linke Spalte) und dem Projektionsfaktor f (Abbildungen rechte Spalte) für einen 1 Ohm cm c-Si(p) Wafer. Die a-Si:H Defektverteilung ist in Abhängigkeit des Fermi-niveaus bei der Glastemperatur berechnet. Die inj. abhängige Ladung wurde unter Beachtung korrelierter amphotere DB-Defekte und SRH Defekten in den Bandausläufern berechnet. Die Grenzflächendefektdichte und -Verteilung ergibt sich aus der Projektion der a-Si:H Defektdichte im Volumen nach $D_{it} = N_{aSi} \times f \times 10^{-7} \text{ cm}$ und ist somit ebenfalls vom Fermi-niveau bei der Glastemperatur abhängig. Die Rekombination wird mit den Gleichungen für korrelierte amphotere DB-Defekte berechnet.

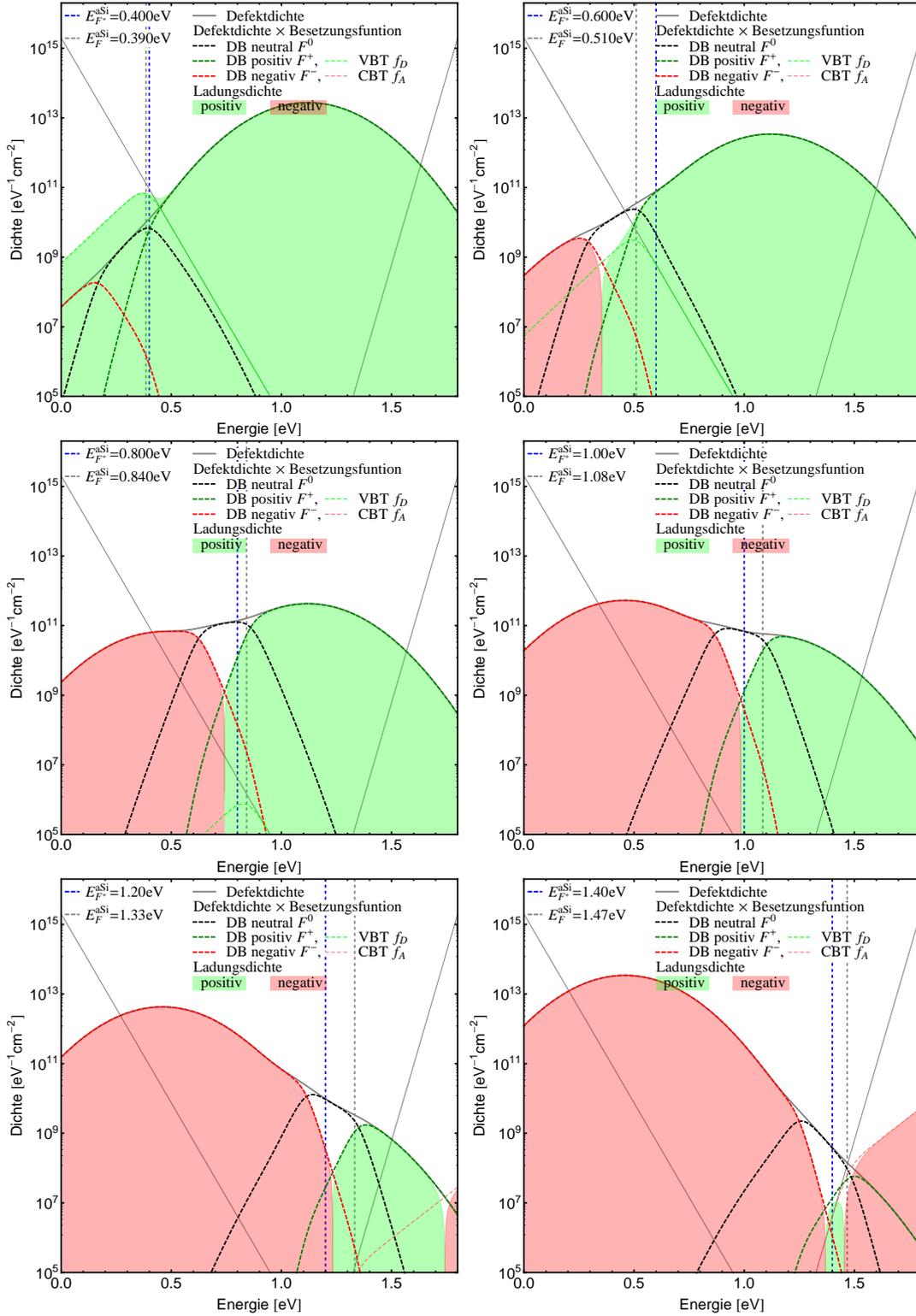


Abbildung B.11.: Defektdichte, Defektbesetzung und Defektladung in Abhängigkeit des a-Si:H Fermi-niveaus bei der Glastemperatur $E_{F^*}^{\text{aSi}}$ (blau gestrichelt). Die Defektdichte und -Verteilung ist mit dem Defekt-Pool Modell berechnet (Defekt-Pool Parameter siehe Abschnitt 3.1.2 oder [59], VBT Urbachenergie $E_{\text{VBT}} = 0.04\text{eV}$). Das Fermi-niveau bei Raumtemperatur ist E_F^{aSi} grau gestrichelt. Bei dieser Rechnung wurde exemplarisch ein 3 Ohm cm c-Si(n)) Wafer angenommen.

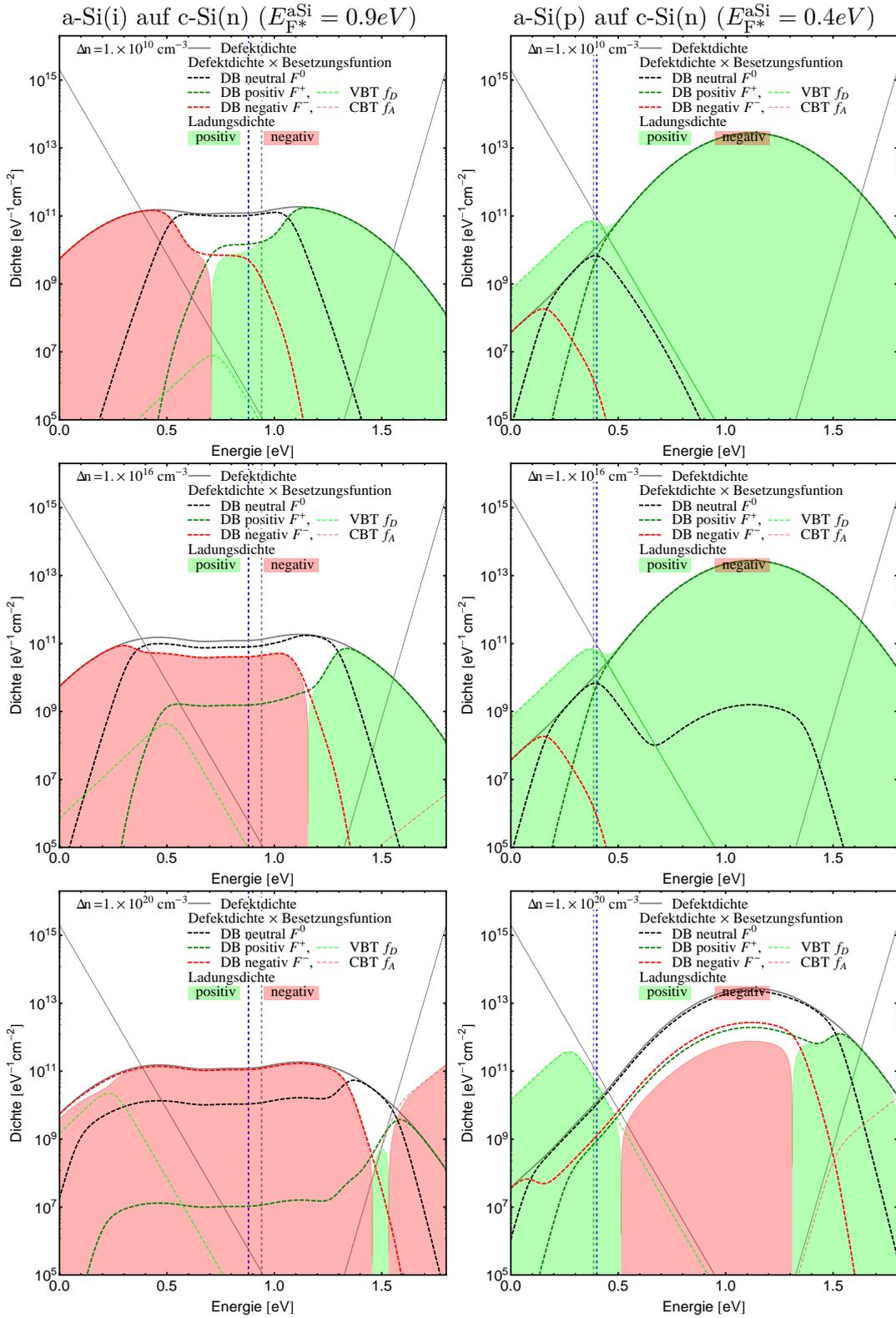


Abbildung B.12.: Defektdichte, Defektbesetzung und Defektladung in Abhängigkeit des Injektionsniveaus Δn für a-Si:H(i) (linke Spalte) und a-Si:H(p) (rechte Spalte). Die Defektdichte und -verteilung ist mit dem Defekt-Pool Modell berechnet (Defekt-Pool Parameter siehe Abschnitt 3.1.2 oder [59], VBT Urbachenergie $E_{VBT} = 0.04$). Dabei geht das a-Si:H Fermi-niveau bei der Glastemperatur $E_{F^*}^{aSi}$ (blau gestrichelt) ein, das i. Allg. vom Fermi-niveau bei Raumtemperatur E_F^{aSi} (grau gestrichelt) abweicht.

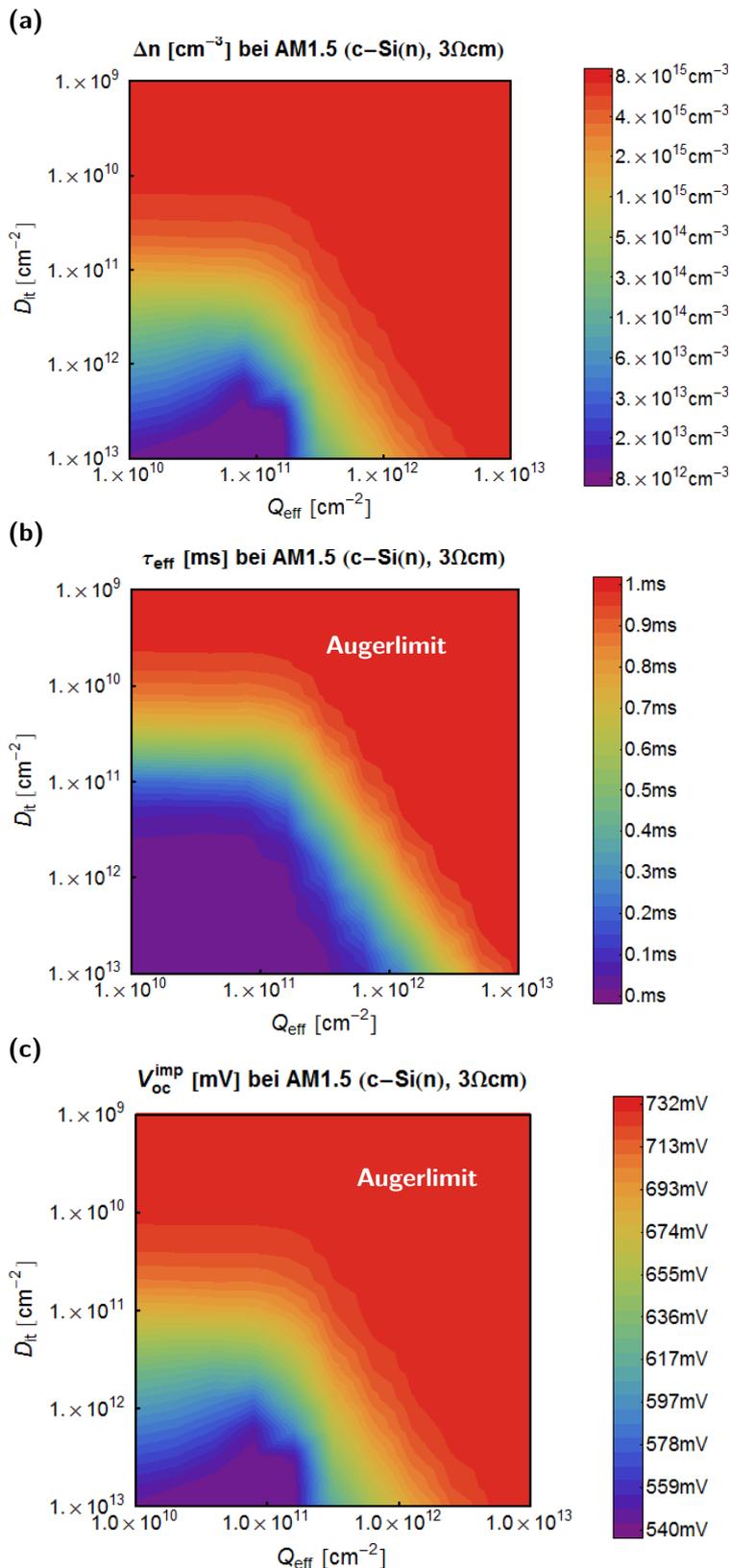


Abbildung B.13.: Ladungsträgerdichte (a), Lebensdauer (b) und Leerlaufspannung (c) bei Beleuchtung mit AM1.5 in Abhängigkeit der Grenzflächendefektdichte und der effektiven Festladung. Die Modellrechnung erfolgt hier für eine symmetrisch a-Si:H(n)/c-Si(p) Struktur mit einem $1\Omega\text{cm}$ Wafer. Die injektionsabhängige Bandverbiegung wurde unter Annahme einer effektiven Festladung berechnet ($\tau(\Delta n, Q_{\text{eff}}, D_{\text{it}})$). Die Achsenorientierung ist so gewählt, dass sie in Richtung steigender Passivierungswirkung zeigen.

C. Strom-Spannungs-Kennlinien der poly-Si Zelle

Tabelle C.1.: Parameter der Minimodule mit poly-Si Absorber

| | Modul [nm] | Schichtdicke [cm ⁻³] | Dotierung [nm/min] | Abscheiderate |
|----------------|---------------|-------------------------------------|-----------------------|---------------|
| n^+ Emitter | | 35 | 1.2×10^{20} | |
| p^- Absorber | 1 | 1625 | 1.3×10^{16} | 300 |
| Mimo8 | 2 | 1400 | 4.9×10^{15} | 300 |
| Variation | 3 | 1470 | 4×10^{16} | 300 |
| der Dotierung | 4 | 1646 | 2×10^{16} | 600 |
| | 5 | 1676 | 7×10^{15} | 600 |
| | 6 | 1573 | 4.2×10^{16} | 600 |
| Mimo9 | 1 | 1507 | 1.5×10^{16} | 300 |
| Variation | 2 | 1778 | 1.5×10^{16} | 300 |
| der Dicke | 3 | 1980 | 1.5×10^{16} | 300 |
| | 4 | 2206 | 1.5×10^{16} | 300 |
| p^+ BSF | | 65 | 1.5×10^{19} | |

Tabelle C.2.: Durch Modellanpassung bestimmte Parameter der Minimodule mit poly-Si Absorber

| Mim08 Modul | $R_S[\Omega\text{cm}^2]$ | $N_t[\text{cm}^{-3}]$ | $R_P[\Omega\text{cm}^2]$ | r_i |
|-------------|--------------------------|-----------------------|--------------------------|-------|
| 1 | 1 | 2.5×10^{15} | 7000 | 0.69 |
| 2 | 1.05 | 1.3×10^{15} | 5000 | 0.67 |
| 3 | 0.9 | 5×10^{15} | 1700 | 0.62 |
| 4 | 1.44 | 4×10^{15} | 5000 | 0.74 |
| 5 | 1.03 | 2×10^{15} | 5500 | 0.72 |
| 6 | 1.32 | 7×10^{15} | 2500 | 0.64 |
| Mimo9 Modul | | | | |
| 1 | 1.11 | 3.4×10^{15} | 5000 | 0.67 |
| 2 | 0.86 | 3.5×10^{15} | 5000 | 0.58 |
| 3 | 0.9 | 5.2×10^{15} | 4500 | 0.73 |
| 4 | 0.83 | 5.3×10^{15} | 8000 | 0.75 |

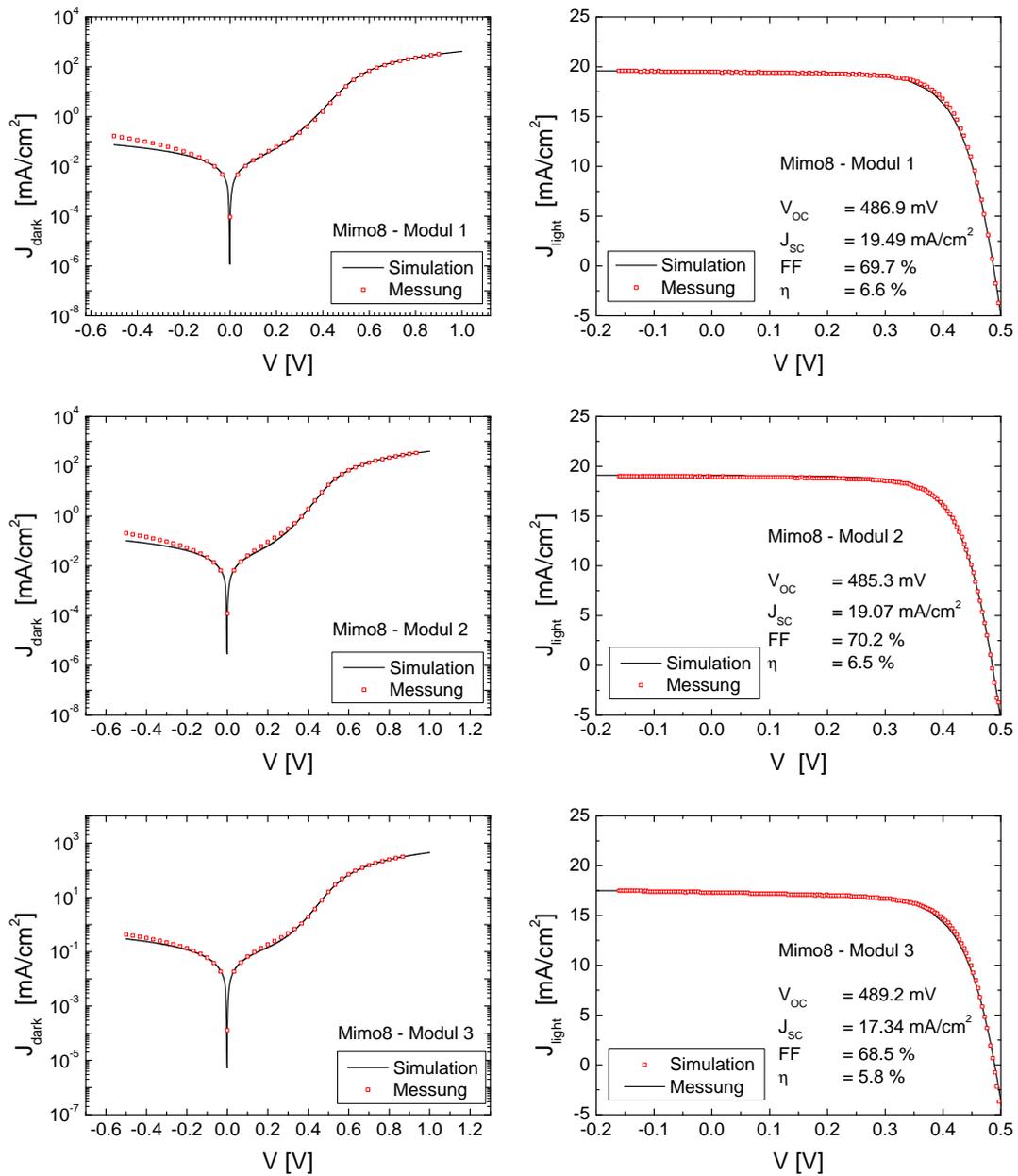


Abbildung C.1.: j - V Kennlinien der poly-Si Zellen und Simulationen mit dem angepassten AFORS-HET Modell. Details zu den Proben sind in Tab. C.1 und die Ergebnisse der Modellanpassung in Tab. C.2 zusammengefasst.

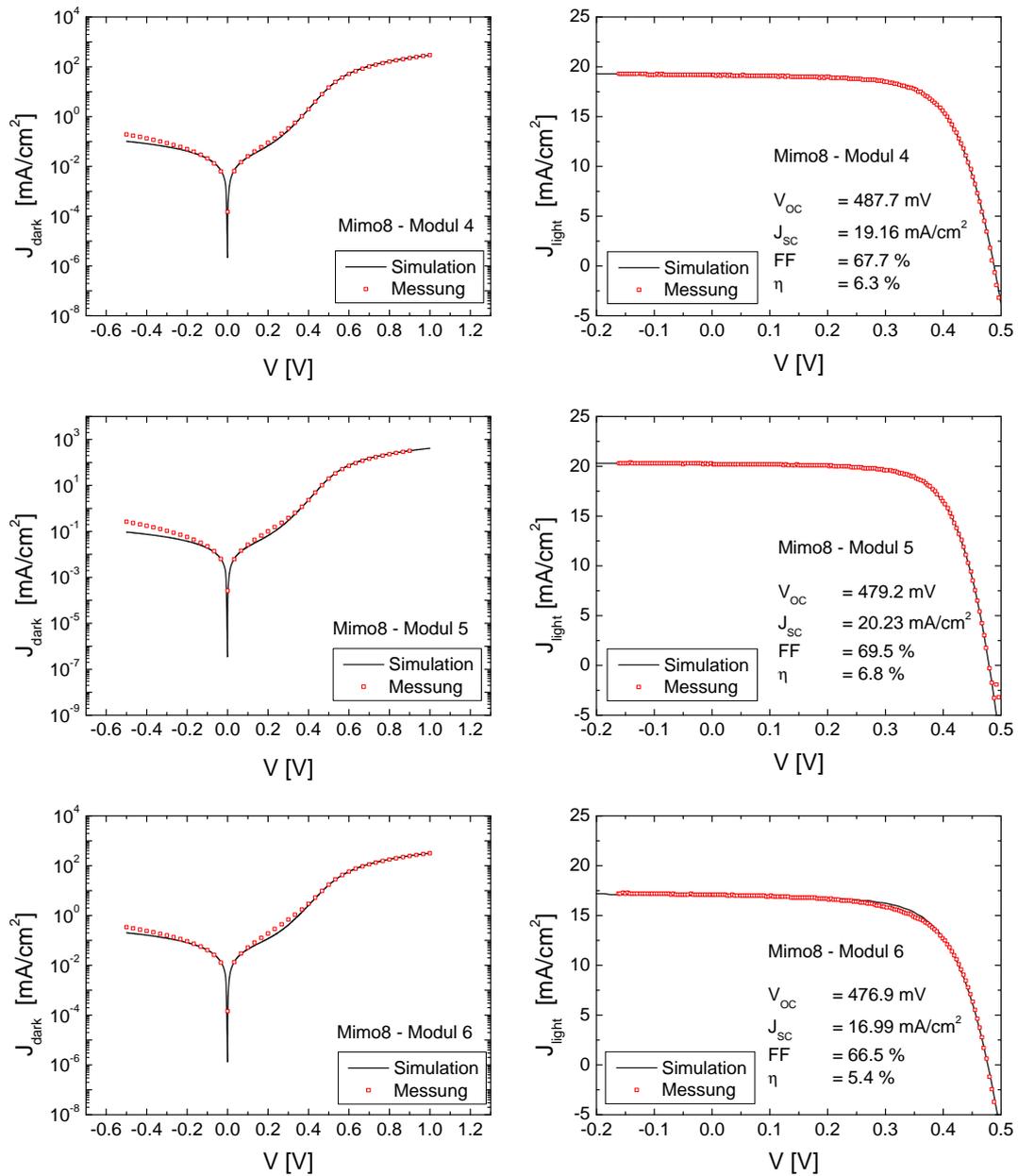


Abbildung C.2.: j - V Kennlinien der poly-Si Zellen und Simulationen mit dem angepassten AFORS-HET Modell. Details zu den Proben sind in Tab. C.1 und die Ergebnisse der Modellanpassung in Tab. C.2 zusammengefasst.

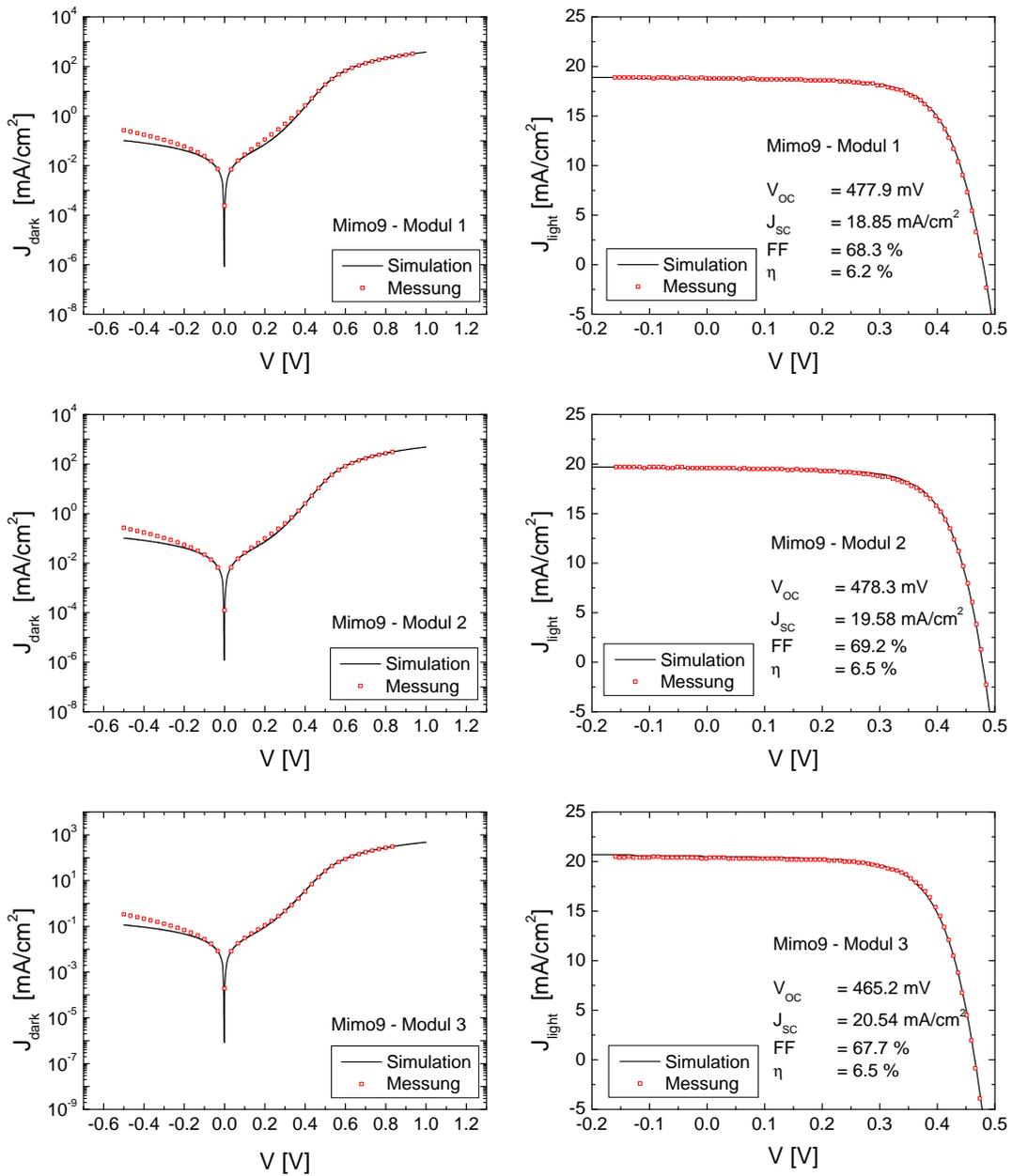


Abbildung C.3.: j - V Kennlinien der poly-Si Zellen und Simulationen mit dem angepassten AFORS-HET Modell. Details zu den Proben sind in Tab. C.1 und die Ergebnisse der Modellanpassung in Tab. C.2 zusammengefasst.

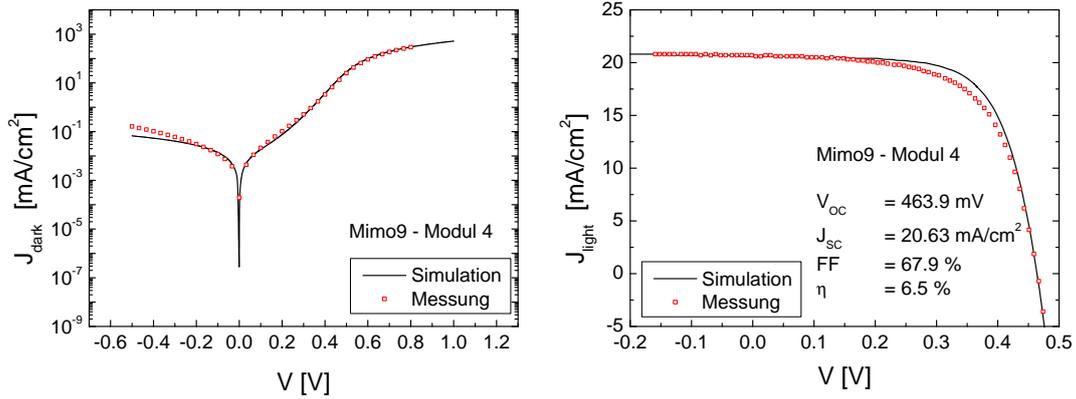


Abbildung C.4.: j-V Kennlinien der poly-Si Zellen und Simulationen mit dem angepassten AFORS-HET Modell. Details zu den Proben sind in Tab. C.1 und die Ergebnisse der Modellanpassung in Tab. C.2 zusammengefasst.

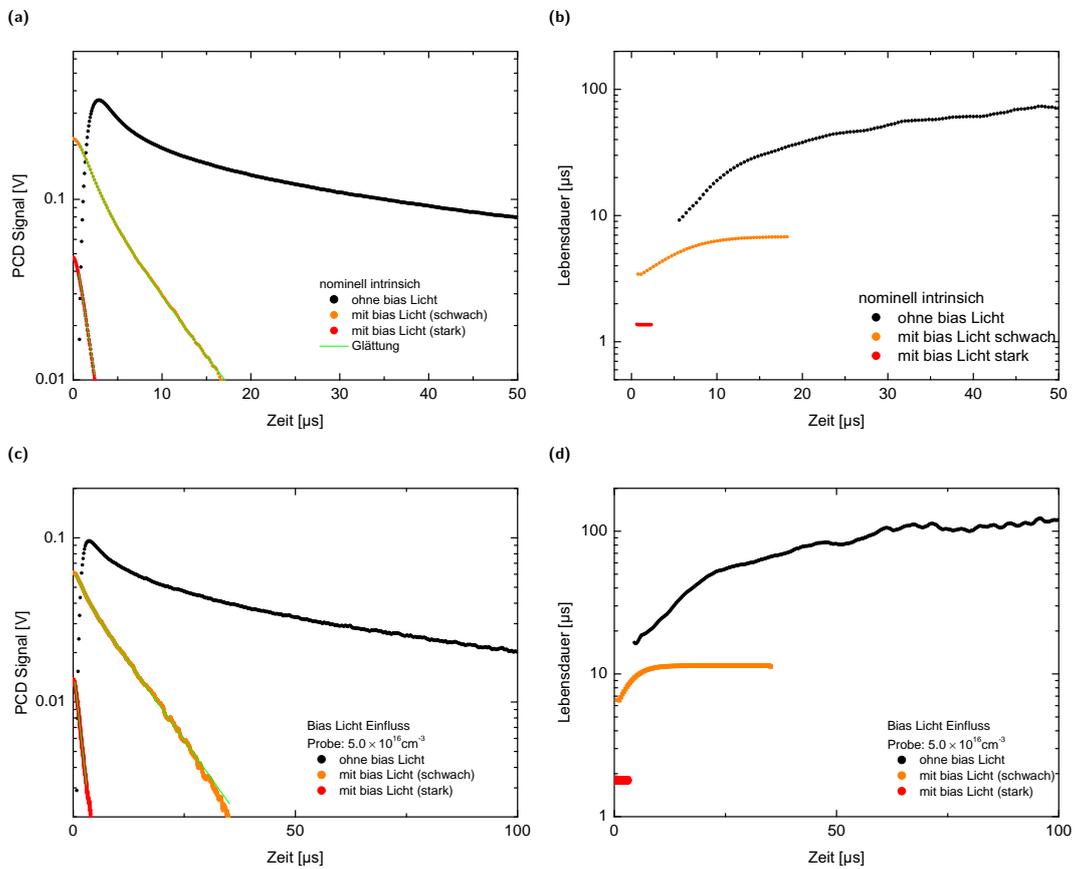


Abbildung C.5.: HS-PCD Transienten (linke Spalte) der Probe mit nominal intrinsischem Absorber (a) und (b) und Absorberdotierung $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ (c) und (d) ohne bias Licht und mit bias Licht in zwei unterschiedlichen Intensitätsstufen. In der rechten Spalte ist die Lebensdauer dargestellt, die mit Gl. (4.4) berechnet wurde. Für die Transienten mit bias Licht ist die Glättung eingezeichnet. Eine Glättung ist nötig, da in die Berechnung der Lebensdauer die Ableitung der Transiente ingeht.

Abbildungsverzeichnis

| | | |
|-------|--|----|
| 1.1. | Jährliche Solarzellenproduktion | 2 |
| 1.2. | Anteil der Solarzellentechnologien an der jährlichen Produktion | 3 |
| 2.1. | Oberflächenbandverbiegung | 9 |
| 2.2. | Ladungsträgerdichten in der Raumladungszone | 11 |
| 2.3. | Shockley-Read-Hall Defekte | 17 |
| 2.4. | Demarkationsniveaus | 20 |
| 2.5. | Amphotere Defekte | 21 |
| 2.6. | Volumenlebensdauer | 24 |
| 2.7. | Leerlaufspannung | 27 |
| 2.8. | Leerlaufspannung in Abhängigkeit von Volumenlebensdauer und SRV | 28 |
| 2.9. | Transport über Heterogrenzflächen in AFORS-HET | 33 |
| 2.10. | Metall-Halbleiterkontakt in AFORS-HET | 35 |
| 3.1. | a-Si:H Netzwerk und Zustandsdichte | 39 |
| 3.2. | Dotierabhängige Leitfähigkeit und Defektdichte in a-Si:H | 42 |
| 3.3. | Defekt-Pool-Modell zur Berechnung der Defektdichte | 44 |
| 3.4. | Ladung und Potentialbarriere an Korngrenzen (Seto-Modell) | 46 |
| 3.5. | Defektverteilung an Korngrenzen in Poly-Si Schichten | 46 |
| 3.6. | Defekte an Versetzungen in Poly-Si Schichten | 47 |
| 3.7. | Weltrekord a-Si:H/c-Si -Solarzellen | 48 |
| 3.8. | Banddiagramm des a-Si:H/c-Si-Heterokontakts | 50 |
| 3.9. | Die a-Si:H/c-Si-Heterokontaktsolarzelle | 52 |
| 3.10. | Zusammenhang zwischen Leerlaufspannung und Bandoffsets | 53 |
| 3.11. | Die poly-Si Solarzelle | 54 |
| 4.1. | QSSPC/PCD-Messaufbau | 59 |
| 4.2. | QSSPC/PCD-Messung | 60 |
| 4.3. | Hochsensitiver PCD-Messaufbau | 61 |
| 4.4. | Induktive Kopplung bei der Photoleitfähigkeitsmessung | 63 |
| 4.5. | Ladungsträgerbewegung im HS-PCD-Aufbau | 64 |
| 4.6. | HS-PCD-Messung | 65 |
| 4.7. | SPV-Messaufbau | 66 |
| 4.8. | Laserpuls und Signaltransiente bei der SPV-Messung | 67 |
| 4.9. | Zusammenhang zwischen SPV-Signal und Dunkelbandverbiegung | 70 |
| 4.10. | SPV-Signal in Abhängigkeit der Überschussladungsträgerkonzentration | 71 |
| 4.11. | Bestimmung der maximalen Überschussladungsträgerdichte bei SPV-Messungen | 72 |

| | |
|---|-----|
| 4.12. SPV-Signal der Transiente in Abhängigkeit der Überschussladungsträgerkonzentration | 73 |
| 4.13. SPV-Signal der Transiente in Abhängigkeit der Zeit | 73 |
| 4.14. Zusammenhang zwischen SPV-Transienten und Ladungsträgerlebensdauer | 75 |
| 4.15. SPV-Transiente einer SiO/Si-Proben mit einem Minimum durch den Einfluss der Demberspannung | 76 |
| 4.16. SPV-Transienten von SiO/Si-Proben und daraus berechnete Ladungsträgerlebensdauer | 77 |
| 4.17. SPV-Transienten von a-Si:H/c-Si -Solarzellenproben und daraus berechnete Ladungsträgerlebensdauer | 79 |
| | |
| 5.1. Berechnung der injektionsabhängigen a-Si:H- und Grenzflächenladung | 86 |
| 5.2. Defektdichten in der a-Si:H Schicht und der Grenzfläche | 89 |
| 5.3. Struktur zur Berechnung von Lebensdauern mit AFORS-HET | 94 |
| 5.4. Vergleich der semi-analytischen Modelle zur Berechnung der Ladungsträgerlebensdauer: Festladung versus injektionsabhängige Ladung | 97 |
| 5.5. Injektionsabhängiger Ladungszustand der Defekte | 98 |
| 5.6. Gültigkeitsbereich des semi-analytischen Modells zur Berechnung der Bandverbiegung | 99 |
| 5.7. Vergleich der semi-analytischen Modelle zur Berechnung der Ladungsträgerlebensdauer unter Berücksichtigung des DRM-Effekts | 100 |
| 5.8. Überschussladungsträgerdichte in Volumen und Raumladungszone | 101 |
| 5.9. Numerische Berechnung der Ladungsträgerlebensdauer mit AFORS-HET im Vergleich zu semi-analytischen Rechnungen mit ELifAnT | 103 |
| 5.10. Semi-analytische Berechnung der injektionsabhängigen Ladungsträgerlebensdauer (Modell mit effektiver Festladung, n-Typ Wafer) | 106 |
| 5.11. Semi-analytische Berechnung der injektionsabhängigen Ladungsträgerlebensdauer (Modell mit inj. abh. a-Si:H-Defektladung und fester Grenzflächendefektverteilung, p-Typ Wafer) | 109 |
| 5.12. Defektdichte und -besetzung in Abhängigkeit von der Lage des a-Si:H-Ferminiveaus und des Injektionsniveaus | 110 |
| 5.13. Semi-analytische Berechnung der injektionsabhängigen Ladungsträgerlebensdauer (Modell mit inj. abh. a-Si:H-Defektladung und projizierter Grenzflächendefektverteilung, p-Typ Wafer) | 111 |
| 5.14. Passiviermechanismen an der a-Si:H/c-Si Grenzfläche (n-Typ-Wafer, $\Delta n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$) | 112 |
| 5.15. Passiviermechanismen an der a-Si:H/c-Si Grenzfläche (p-Typ-Wafer, $\Delta n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$) | 114 |
| 5.16. Limitierung der Ladungsträgerlebensdauer und Leerlaufspannung durch Augerrekombination | 115 |
| 5.17. Passiviermechanismen an der a-Si:H/c-Si Grenzfläche (n-Typ-Wafer, AM1.5) | 117 |
| | |
| 6.1. Probenserie zur Untersuchung der Passivierqualität des a-Si:H(p)/a-Si:H(i)/c-Si(n) Schichtstapels | 122 |

| | | |
|-------|--|-----|
| 6.2. | $\tau(\Delta n)$ -Kurve n eines a-Si:H/c-Si -Schichtsystems während thermischer Nachbehandlung | 123 |
| 6.3. | Fehlerrechnung bei der CA-PCD Methode | 125 |
| 6.4. | QSSPC/PCD -Messungen symmetrischer a-Si:H/c-Si -Emitterschichtstapel (n-Wafer) | 126 |
| 6.5. | Ergebnisse von CA-PCD- und SPV-Methode bei Variation der a-Si:H Schichtstapels auf n-Wafer | 127 |
| 6.6. | QSSPC/PCD -Messungen symmetrischer a-Si:H/c-Si -Emitterschichtstapel mit ZnO Kontaktschichten (n-Wafer) | 130 |
| 6.7. | Experimentelle und theoretische Lebensdauer und implizite Leerlaufspannung in Abhängigkeit der Grenzflächenpassivierung (n-Wafer) . . | 131 |
| 6.8. | Dunkelbandverbiegung und die Bandverbiegung bei $\Delta n = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. | 132 |
| 6.9. | QSSPC/PCD -Messungen symmetrischer a-Si:H/c-Si -Emitterschichtstapel (p-Wafer) | 136 |
| 6.10. | Ergebnisse von CA-PCD- und SPV-Methode bei Variation der a-Si:H Schichtstapels auf p-Wafer | 137 |
| 6.11. | Experimentelle und theoretische Lebensdauer und implizite Leerlaufspannung in Abhängigkeit der Grenzflächenpassivierung (p-Wafer) . . | 139 |
| 7.1. | Schemazeichnung der poly-Si-Zelle | 144 |
| 7.2. | Poly-Si Standardmodellzelle für die Modellierung | 147 |
| 7.3. | Einfluss der Zellparameter auf Dunkel- und Hellkennlinie der poly-Si-Zelle | 148 |
| 7.4. | Experimentelle j-V-Kennlinien der poly-Si-Zelle bei Variation der Dotation und Abscheiderate | 150 |
| 7.5. | Ergebnisse der Modellanpassung für die poly-Si-Zellserien | 151 |
| 7.6. | Ladungsträgerlebensdauer in poly-Si-Absorberschichten bestimmt aus Quanteneffizienzmessungen | 152 |
| 7.7. | Implizite Leerlaufspannung von poly-Si Schichten in Abhängigkeit der Ladungsträgerlebensdauer und SRV | 153 |
| 7.8. | HS-PCD-Transienten von poly-Si Schichten auf SiN_x | 154 |
| 7.9. | HS-PCD-Transienten von poly-Si Schichten auf Glas | 155 |
| 7.10. | Simulation von Ladungsträgerlebensdauern in poly-Si-Absorberschichten auf SiN_x | 156 |
| 7.11. | Simulation von Ladungsträgerlebensdauern in poly-Si-Absorberschichten auf Glas | 157 |
| 7.12. | Simulationsstudie zur Untersuchung der Leerlaufspannung und Füllfaktor in Abhängigkeit der poly-Si Absorberdefektdichte | 159 |
| 7.13. | Banddiagramm, Ladungsträgerverteilung und Rekombinationsrate einer typischen poly-Si Dünnschichtsolarzelle unter Leerlaufbedingungen | 160 |
| 7.14. | Simulationsstudie zur Untersuchung der Leerlaufspannung in Abhängigkeit der Kontaktschichten der poly-Si Dünnschichtsolarzelle | 162 |
| A.1. | Exemplarische Darstellung des HS-PCD Signals und der Signalableitung | III |
| A.2. | SPV-Transienten von Solarzellenproben mit Emitter und BSF | III |

| | |
|---|-------|
| A.3. Fehlerabschätzung aufgrund unbekannter Überschussladungsträgerkonzentration bei SPV-Messungen | IV |
| A.4. Strahlaufweitung und Homogenisierung im SPV-Messplatz | V |
| B.1. Vergleich der Simulationsmodelle zur Berechnung der Ladungsträgerlebensdauer 1 (n-Wafer) | VIII |
| B.2. Vergleich der Simulationsmodelle zur Berechnung der Ladungsträgerlebensdauer 2 (n-Wafer) | IX |
| B.3. Vergleich der Simulationsmodelle zur Berechnung der Ladungsträgerlebensdauer 1 (p-Wafer) | X |
| B.4. Vergleich der Simulationsmodelle zur Berechnung der Ladungsträgerlebensdauer 2 (p-Wafer) | XI |
| B.5. Vergleich der Simulationsmodelle zur Berechnung der Ladungsträgerlebensdauer 3 (p-Wafer) | XII |
| B.6. Injektionsabhängige Umladung amphoterer Defekte | XII |
| B.7. Semi-analytische Berechnung der injektionsabhängigen Ladungsträgerlebensdauer (Modell mit effektiver Festladung, n-Typ Wafer) | XIII |
| B.8. Semi-analytische Berechnung der injektionsabhängigen Ladungsträgerlebensdauer (Modell mit effektiver Festladung, p-Typ Wafer) | XIV |
| B.9. Semi-analytische Berechnung der injektionsabhängigen Ladungsträgerlebensdauer (Modell mit inj. abh. a-Si:H-Defektladung und fester Grenzflächendefektverteilung, p-Typ Wafer) | XV |
| B.10. Semi-analytische Berechnung der injektionsabhängigen Ladungsträgerlebensdauer (Modell mit inj. abh. a-Si:H-Defektladung und projizierter Grenzflächendefektverteilung, p-Typ Wafer) | XVI |
| B.11. Defektdichte in Abhängigkeit des a-Si:H Fermi-niveaus | XVII |
| B.12. Defektbesetzung in Abhängigkeit der Injektionsdichte | XVIII |
| B.13. Passivierungsmechanismen an der a-Si:H/c-Si Grenzfläche (p-Typ-Wafer, AM1.5) | XIX |
| C.1. J-V Kennlinien der poly-Si Zellen 1 | XXII |
| C.2. J-V Kennlinien der poly-Si Zellen 2 | XXIII |
| C.3. J-V Kennlinien der poly-Si Zellen 3 | XXIV |
| C.4. J-V Kennlinien der poly-Si Zellen 4 | XXV |
| C.5. HS-PCD Messungen mit Bias-Licht zur Bestimmung der Ladungsträgerlebensdauer in poly-Si Absorberschichten | XXV |

Tabellenverzeichnis

| | | |
|------|---|-----|
| 2.1. | Parameter zur Berechnung der Generationsrate mit AFORS-HET . . . | 30 |
| 2.2. | Externe Parameter und Lösungen der elektrischen Rechnung mit AFORS-HET | 30 |
| 2.3. | Parameter der elektrischen Rechnung im Volumen mit AFORS-HET . | 33 |
| 2.4. | Parameter zur Definition des Schottky-Kontakts in AFORS-HET . . . | 34 |
| 3.1. | c-Si-Materialparameter | 39 |
| 3.2. | Materialparameter von amorphem Silizium | 42 |
| 4.1. | Vergleich von SPV und PCD Ladungsträgerlebensdauer von SiO/Si-Proben | 78 |
| 5.1. | Ausgabegrößen von ELifAnT | 84 |
| 6.1. | Vergleich der besten Emitterstrukturen auf n- und p-Typ Wafer | 141 |
| 7.1. | Parameter der poly-Si-Solarzelle | 146 |
| C.1. | Parameter der Minimodule mit poly-Si Absorber | XXI |
| C.2. | Durch Modellanpassung bestimmte Parameter der Minimodule mit poly-Si Absorber | XXI |

Abkürzungsverzeichnis

| | |
|--|---|
| α | Absorptionskoeffizient Englisch: absorption coefficient |
| χ | Elektronenaffinität Englisch: electron affinity |
| $\Delta\varphi$ | Potentialdifferenz Englisch: potential difference |
| $\Delta\varphi_D$ | Demberspannung Englisch: Dember voltage |
| $\Delta\varphi_{EQ}, \Delta\varphi_0$ | Dunkelbandverbiegung im c-Si Wafer Englisch: dark (equilibrium) band bending in the c-Si wafer |
| $\Delta\varphi_Q$ | Potentialdifferenz aufgrund von Oberflächenladungen Englisch: potential difference due to surface charges |
| $\Delta\varphi_{SPV}$ | SPV-Signal Englisch: SPV signal |
| $\Delta\varphi_S$ | Oberflächenbandverbiegung Englisch: surface band bending |
| ΔE_{CB} | Energiedifferenz der Leitungsbandkanten an Grenzflächen Englisch: change in energy of the conduction band edge at interfaces |
| ΔE_{VB} | Energiedifferenz der Valenzbandkanten an Grenzflächen Englisch: change in energy of the valence band edge at interfaces |
| Δn | Überschussladungsträgerdichte der Elektronen (Injektionsniveau) Englisch: excess charge carrier density of electrons |
| Δn_{av} | mittlere Überschussladungsträgerdichte der Elektronen im Absorber Englisch: average excess charge carrier density of electrons in the absorber |
| Δp | Überschussladungsträgerdichte der Löcher Englisch: excess charge carrier density of holes |
| Δp_{av} | mittlere Überschussladungsträgerdichte der Löcher im Absorber Englisch: average excess charge carrier density of holes in the absorber |
| ϵ | elektrische Feldkonstante Englisch: electric constant |
| ϵ_r | Dielektrizitätskonstante Englisch: dielectric constant |
| η | Wirkungsgrad der Solarzelle Englisch: Solar cell conversion efficiency |
| λ | Wellenlänge Englisch: wave length |

| | |
|------------------------------|---|
| Φ | Photonenfluss Englisch: photon flux |
| ρ | Ladungsdichte [m^{-3}] Englisch: charge density |
| ρ_D | Ladungsdichte in Defekten [m^{-3}] Englisch: defect charge density |
| σ | Breite des a-Si:H Defekt-Pools Englisch: width of the a-Si:H defect pool |
| $\sigma_{n,p}$ | Shockley-Read-Hall Einfangquerschnitte für Elektronen und Löcher Englisch: Shockley-Read-Hall capture cross section for electrons and holes |
| $\sigma_{n,p}^{-,0,+}$ | Einfangquerschnitt amphoterer Defekte für Elektronen und Löcher (der obere Index gibt den Ladungszustand an) Englisch: capture cross sections of amphoteric defects for electrons and holes (the superscript specifies the charge state) |
| σ_G | Breite der Gauß-Verteilung Englisch: width of gaussian distribution |
| τ | Ladungsträgerlebensdauer Englisch: charge carrier lifetime |
| τ_{AM15} | Ladungsträgerlebensdauer bei Beleuchtung (AM1.5 Spektrum) Englisch: charge carrier lifetime under illumination (AM1.5 spectra) |
| τ_A | Ladungsträgerlebensdauer aufgrund der Augerrekombination Englisch: carrier lifetime due to Auger recombination |
| τ_{BB} | Ladungsträgerlebensdauer aufgrund der radiativen Rekombination Englisch: carrier lifetime due to radiative recombination |
| τ_b | Ladungsträgerlebensdauer im Halbleitervolumen Englisch: carrier lifetime in the semiconductor bulk |
| τ_{eff} | effektive Ladungsträgerlebensdauer Englisch: effective carrier lifetime |
| τ_{SRH} | Ladungsträgerlebensdauer aufgrund der Shockley-Read-Hall Rekombination Englisch: carrier lifetime due to Shockley-Read-Hall recombination |
| φ | elektrisches Potential Englisch: electric potential |
| φ^S | elektrisches Potential an der Oberfläche Englisch: electric potential at the surface |
| φ^V | elektrisches Potential im Volumen Englisch: electric potential in the bulk |
| D_{it} | Grenzflächendefektdichte [cm^{-2}] Englisch: interface defect density |
| $D_{n,p}$ | Diffusionskonstante für Elektronen und Löcher Englisch: diffusion constant of electrons and holes |
| e | Elementarladung Englisch: elementary charge |

| | |
|-------------------------|---|
| E_F^* | Ferminiveau im Gleichgewicht bei der Glastemperatur Englisch: Fermi-level at the glass temperature |
| $e_{n,p}$ | Shockley-Read-Hall Emissionskoeffizienten für Elektronen und Löcher Englisch: Shockley-Read-Hall emission coefficient for electrons and holes |
| $e_{n,p}^{-,0,+}$ | Emissionskoeffizienten amphoterer Defekte für Elektronen und Löcher (der obere Index gibt den Ladungszustand an) Englisch: emission coefficient of amphoteric defects for electrons and holes (the superscript specifies the charge state) |
| E_{VBT0}^* | Steigung a-Si:H Valenzbandausläufer bei der Glastemperatur Englisch: a-Si:H valence band tail slope at the a-Si:H glass temperature |
| E_{CBT0} | Steigung a-Si:H Leitungsbandausläufer Englisch: a-Si:H conduction band tail slope |
| E_C | Leitungsbandkante Englisch: conduction band edge |
| E_{DB} | Energielage DB-Defekt Englisch: energy level of dangling bond defects |
| E_{Fn} | quasi-Ferminiveau für Elektronen Englisch: electron quasi Fermi-level |
| E_{Fp} | quasi-Ferminiveau für Löcher Englisch: hole quasi Fermi-level |
| E_F | Ferminiveau im Gleichgewicht Englisch: equilibrium Fermi-level |
| E_G | Bandlücke Englisch: band gap |
| E_i | intrinsisches Ferminiveau Englisch: intrinsic Fermi-level |
| E_{tr} | Energielage von elektronischen Defekten Englisch: energy level of electronic defects |
| E_{VBT0} | Steigung a-Si:H Valenzbandausläufer, Urbachenergie Englisch: a-Si:H valence band tail slope, Urbach energy |
| E_V | Valenzbandkante Englisch: valence band edge |
| f | Fermi-Verteilung Englisch: Fermi-Dirac distribution |
| $F^{0,+,-}$ | Besetzungsfunktion für die drei Ladungszustände der DB-Defekte Englisch: Occupancy functions for the three charge states of dangling bonds |
| G | Generationsrate Englisch: generation rate |
| G_{av}^{AM15} | mittlere Generationsrate bei Beleuchtung (AM1.5 Spektrum) Englisch: average generation rate under illumination (AM1.5 spectra) |
| G_{av} | mittlere Generationsrate im Absorber |

| | |
|----------------------|--|
| | Englisch: average generation rate in the absorber |
| $G_{n,p}$ | Generationsrate für Elektronen und Löcher |
| | Englisch: generation rate of electrons and holes |
| $j_{n,p}$ | Stromdichte der Elektronen und Löcher |
| | Englisch: electron and hole current density |
| k_B | Boltzmannkonstante |
| | Englisch: Boltzmann constant |
| n | Ladungsträgerdichte der Elektronen |
| | Englisch: charge carrier density of electrons |
| N_A^- bzw. N_A | Dichte der ionisierten Akzeptoren |
| | Englisch: density of ionised acceptors |
| N_D^+ bzw. N_D | Dichte der ionisierten Donatoren |
| | Englisch: density of ionised donors |
| n_0 | Ladungsträgerdichte der Elektronen im Gleichgewicht |
| | Englisch: charge carrier density of electrons under equilibrium conditions |
| N_C | effektive Zustandsdichten des Leitungsbands |
| | Englisch: effective conduction band density |
| N_{DB} | Defektdichte von DB-Defekten |
| | Englisch: defect density of dangling bond defects |
| n_S | Ladungsträgerdichte der Elektronen an Ober- bzw. Grenzflächen |
| | Englisch: excess charge carrier density of electrons at interfaces or surfaces |
| N_{tr} | Defektdichte |
| | Englisch: defect density |
| N_V | effektive Zustandsdichten des Valenzbands |
| | Englisch: effective valence band density |
| p | Ladungsträgerdichte der Löcher |
| | Englisch: charge carrier density of holes |
| p_0 | Ladungsträgerdichte der Löcher im Gleichgewicht |
| | Englisch: charge carrier density of holes under equilibrium conditions |
| p_S | Ladungsträgerdichte der Löcher an Ober- bzw. Grenzflächen |
| | Englisch: excess charge carrier density of holes at interfaces or surfaces |
| Q_{eff} | effektive Festladung [cm^{-2}] |
| | Englisch: effective fixed charge |
| Q_{SCR} | Gesamtladung der Raumladungszone projiziert auf die Oberfläche [cm^{-2}] |
| | Englisch: total charge in the space charge region projected to the surface |
| $Q^{Akzeptor}$ | Ladungsdichte von akzeptorischen Shockley-Read-Hall Defekten |
| | Englisch: charge density of Shockley-Read-Hall acceptor defects |
| Q^{db} | Ladungsdichte von amphoteren Defekte |
| | Englisch: charge density of amphoteric defects |
| $Q^{Donator}$ | Ladungsdichte von donatorischen Shockley-Read-Hall Defekten |

| | |
|------------------------------------|--|
| | Englisch: charge density of Shockley-Read-Hall donator defects |
| R_{Auger} | Augerrekombinationsrate |
| | Englisch: Auger recombination rate |
| R_{BB} | radiative Rekombinationsrate |
| | Englisch: radiative recombination rate |
| $R_{\text{n,p}}$ | Rekombinationsrate der Elektronen und Löcher |
| | Englisch: recombination rate of electrons and holes |
| R_{P} | Parallelwiderstand |
| | Englisch: parallel resistance |
| R_{S} | Serienwiderstand |
| | Englisch: series resistance |
| R^{Akzeptor} | Rekombinationsrate von akzeptorischen Shockley-Read-Hall Defekten |
| | Englisch: recombination rate of Shockley-Read-Hall acceptor defects |
| R^{db} | Rekombinationsrate von amphoteren Defekten |
| | Englisch: recombination rate of amphoteric defects |
| R^{Donator} | Rekombinationsrate von donatorischen Shockley-Read-Hall Defekten |
| | Englisch: recombination rate of Shockley-Read-Hall donator defects |
| T | Temperatur |
| | Englisch: temperature |
| t | Zeit |
| | Englisch: time |
| T^* | Glastemperatur von amorphen Silizium |
| | Englisch: glass temperature of amorphous silicon |
| U_{DB} | Korrelationsenergie der DB-Defekte |
| | Englisch: correlation energy of dangling bond defects |
| U_{SPV} | SPV-Signal |
| | Englisch: SPV signal |
| $V_{\text{oc}}^{\text{imp}}$ | implizite Leerlaufspannung |
| | Englisch: implied open circuit voltage |
| $v_{\text{th}}^{\text{n,p}}$ | thermische Geschwindigkeit |
| | Englisch: thermal velocity |
| V_{oc} | Leerlaufspannung |
| | Englisch: open circuit voltage |
| W | Probendicke |
| | Englisch: sample thickness |
| $\mu_{\text{n,p}}$ | Mobilität der Elektronen und Löcher |
| | Englisch: electron and hole mobility |
| a-Si:H | amorphes hydrogenisiertes Silizium |
| | Englisch: amorphous hydrogenised silicon |
| AFORS-HET .. | ‘Automat for the simulation of heterostructures’, numerischer Solarzellensimulator |
| | Englisch: numeric solar cell simulation software |
| AM1.5 Spektrum | Sonnenspektrum nach 1.5 fachem durchlaufen der Erdatmosphäre |

| | |
|-----------------|--|
| | re) |
| | Englisch: solar spectrum after passage through earth atmosphere with a path length factor of 1.5 |
| c-Si | kristallines Silizium |
| | Englisch: crystalline silicon |
| CA-PCD | Computergestützte PCD |
| | Englisch: computer aided PCD |
| CB | Leitungsband |
| | Englisch: conduction band |
| CB-Offset | Energiedifferenz der Leitungsbandkanten an Grenzflächen |
| | Englisch: change in energy of the conduction band edge at interfaces |
| CBT | Leitungsbandausläufer |
| | Englisch: conduction band tail |
| CFSYS | Photoelektronenspektroskopie mit Detektion von Elektronen bei fester Energie (und Anregung mit Photonen variabler Energie) |
| | Englisch: constant-final-state yield photoelectron spectroscopy |
| DB-Defekte | Defekte durch offene Bindungen |
| | Englisch: dangling bond defects |
| E | elektrische Feldstärke |
| | Englisch: electric field intensity |
| H | Wasserstoff |
| | Englisch: Hydrogen |
| HS-PCD | hochsensitive PCD |
| | Englisch: high sensitivity photoconductance decay |
| HZB | Helmholtz-Zentrum Berlin |
| i-Schicht | nominell intrinsische a-Si:H Schicht |
| | Englisch: nominal intrinsic a-Si:H layer |
| KOH | Kaliumhydroxid |
| | Englisch: Potassium hydroxide |
| PCD | transiente Photoleitfähigkeit |
| | Englisch: photoconductance decay |
| PECVD | Plasma-gestützte chemische Gasphasen-Deposition |
| | Englisch: plasma-enhanced chemical vapor deposition |
| PES | Photoelektronenspektroskopie |
| | Englisch: Photoelectron spectroscopy |
| poly-Si | polykristallines Silizium |
| | Englisch: polycrystalline silicon |
| QSSPC | quasi-statische Photoleitfähigkeit |
| | Englisch: quasi-static photoconductance |
| RCA | Silizium Reinigungsmethode der Radio Company of America |
| | Englisch: silicon cleaning procedure of the Radio Company of America |
| SiN | Siliziumnitrid |
| | Englisch: silicon nitride |
| SPV | Oberflächenphotospannung |
| | Englisch: surface photo voltage |

| | |
|-----------------|--|
| SRH | Shockley-Read-Hall |
| SRV | Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit Englisch: surface recombination velocity |
| TCO | transparentes, leitendes Oxid Englisch: transparent conductive oxide |
| VB | Valenzband Englisch: valence band |
| VB-Offset | Energiedifferenz der Valenzbandkanten an Grenzflächen Englisch: change in energy of the valence band edge at interfaces |
| VBT | Valzbandausläufer Englisch: valence band tail |
| ZnO | Zinkoxid Englisch: zinc oxide |

Literaturverzeichnis

- [1] G. Hering. Cell production survey 2010 . *Photon International*, 2010.
- [2] Y. Tsunomura, Y. Yoshimine, M.Taguchi, T. Baba, T. Kinoshita, H. Kanno, H. Sakata, E. Maruyama, and M. Tanaka. Twenty-two percent efficiency HIT solar cell. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 93:670–3, 2009.
- [3] M.J. Keevers, T.L. Young, U. Schubert, and M.A. Green. 10% efficient csg minimodules. In *22nd European Photovoltaic Solar Energy Conference, Milan*, 2007.
- [4] H. Ibach and H. Lüth. *Festkörperphysik: Einführung in die Grundlagen*. Springer, 2008.
- [5] D.R. Frankl and H.K. Henisch. *Electrical properties of semiconductor surfaces*. Pergamon Press, 1967.
- [6] S. M. Sze and K. Ng Kwok. *Physics of Semiconductor Devices*. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 3 edition, 2007.
- [7] S. Selberherr. *Analysis and simulation of semiconductor devices*. Springer Verlag, Vienna, Austria, 1984.
- [8] Ana Kanevce and Wyatt K. Metzger. The role of amorphous silicon and tunneling in heterojunction with intrinsic thin layer (HIT) solar cells. *J. Appl. Phys.*, 105:094507–7, 2009.
- [9] P. Würfel. *Physik der Solarzellen*. Spektrum, Akad. Verl., 1995.
- [10] YP Varshni. Band-to-Band Radiative Recombination in Groups IV, VI, and III-V Semiconductors (I). *physica status solidi (b)*, 19(2):459–514, 1967.
- [11] T. Trupke, M. A. Green, P. Würfel, P. P. Altermatt, A. Wang, J. Zhao, and R. Corkish. Temperature dependence of the radiative recombination coefficient of intrinsic crystalline silicon. *Journal of applied physics*, 94:4930, 2003.
- [12] S. M. Sze. *Physics of Semiconductor Devices*. Wiley Interscience, 2nd ed. edition, 1981.
- [13] J. Dziewior and W. Schmid. Auger coefficients for highly doped and highly excited silicon. *Applied Physics Letters*, 31(5):346–348, 1977.
- [14] A. Hangleiter and R. Haecker. Enhancement of band-to-band auger recombination by electron-hole correlations. *Physical Review Letters*, 65(2):215, July 1990.

- [15] P.P. Altermatt, J. Schmidt, G. Heiser, and A.G. Aberle. Assessment and parameterisation of Coulomb-enhanced Auger recombination coefficients in lowly injected crystalline silicon. *Journal of applied physics*, 82:4938, 1997.
- [16] M. J. Kerr and A. Cuevas. General parameterization of auger recombination in crystalline silicon. *J. Appl. Phys.*, 91:2473–2480, 2002.
- [17] W. Shockley and W. T. Read. Statistics of the recombinations of holes and electrons. *Physical Review*, 87(5):835, 1952. Copyright (C) 2008 The American Physical Society; Please report any problems to prola@aps.org.
- [18] R. N. Hall. Electron-hole recombination in germanium. *Phys. Rev.*, 87:387, 1952.
- [19] J. G. Simmons and G. W. Taylor. Nonequilibrium steady-state statistics and associated effects for insulators and semiconductors containing an arbitrary distribution of traps. *Physical Review B*, 4(2):502, 1971.
- [20] Chih-Tang Sah and W. Shockley. Electron-hole recombination statistics in semiconductors through flaws with many charge conditions. *Phys. Rev.*, 109:1103, 1958.
- [21] K. Tanaka, E. Maruyama, T. Shimada, and H. Okamoto. *Amorphous Silicon*. John Wiley & Sons, 1999.
- [22] R. Schropp and M. Zeman. *Amorphous and Microcrystalline Silicon Solar Cells*. Kluwer Academic Publishers, 1998. chapter 6.
- [23] V. Halpern. The statistics of recombination via dangling bonds in amorphous silicon. *Philos. Mag. B*, 54:473–482, 1986.
- [24] J. A Willemen. *Modelling of amorphous silicon single- and multi-junction solar cells*. Dissertation, Technische Universität Delft, October 1998.
- [25] J. Hubin, A. V. Shah, and E. Sauvain. Effects of dangling bonds on the recombination function in amorphous semiconductors. *Mag. Lett.*, 66(3):115, 1992.
- [26] T. A. Li, Keith R. McIntosh, and A. Cuevas. Limitations of a simplified dangling bond recombination model for a-si:h. *J. Appl. Phys.*, 104:113718, 2008.
- [27] C. Leendertz, R. Stangl, T. F. Schulze, M. Schmidt, and L. Korte. A recombination model for a-si:h/c-si heterostructures. *Phys. Status Solidi C*, 7:1005, 2010.
- [28] AS Grove and DJ Fitzgerald. Surface effects on pn junctions: Characteristics of surface space-charge regions under non-equilibrium conditions. *Solid-State Electronics*, 9(8):783–806, 1966.
- [29] DJ Fitzgerald and AS Grove. Surface recombination in semiconductors. *Surface Science*, 9(2):347–369, 1968.

- [30] R.B.M. Girisch, R.P. Mertens, and R.F. De Keersmaecker. Determination of si-sio₂ interface recombination parameters using a gate-controlled point-junction diode under illumination. *Electron Devices, IEEE Transactions on*, 35(2):203–222, 1988.
- [31] Armin G. Aberle, Stefan Glunz, and Wilhelm Warta. Impact of illumination level and oxide parameters on shockley–read–hall recombination at the si-sio₂ interface. *Journal of Applied Physics*, 71(9):4422–4431, May 1992.
- [32] S. Olibet, E. Vallat-Sauvain, and C. Ballif. Model for a-si:h/c-si interface recombination based on the amphoteric nature of silicon dangling bonds. *Phys. Rev. B*, 76:35326, 2007.
- [33] Henning Nagel, Christopher Berge, and Armin G. Aberle. Generalized analysis of quasi-steady-state and quasi-transient measurements of carrier lifetimes in semiconductors. *Appl. Phys.*, 86(11):6218–6221, December 1999.
- [34] Dieter K. Schroder. *Semiconductor Material and Device Characterization*. John Wiley and Sons, Inc., 1st edition, 1990.
- [35] V. Grivickas, D. Noreika, and J. Tellefsen. Surface and Auger recombinations in silicon wafers of high carrier density. *Lietuvos Fizikos Rinkinys*, 29(5):591–8, 1989.
- [36] A. B. Sproul. Dimensionless solution of the equation describing the effect of surface recombination on carrier decay in semiconductors. *J. Appl. Phys.*, 76:2851–2854, 1994.
- [37] J.S. Blakemore. *Semiconductor statistics*. Dover Pubns, 2002.
- [38] Rolf Stangl, Caspar Leendertz, and Jan Haschke. Numerical simulation of solar cells and solar cell characterization methods: the open-source on demand program afors-het. In R. D. Rugescu, editor, *Solar Energy*. IN-TECH, 2010. ISBN: 978-953-307-052-0.
- [39] Rolf Stangl and Caspar Leendertz. General principles of solar cell simulation and introduction to afors-het. In *Physics and Technology of Amorphous-Crystalline Heterostructure Silicon Solar Cells*. Springer Verlag, in press.
- [40] Caspar Leendertz and Rolf Stangl. Modeling an a-Si:H/c-Si Solar Cell with AFORS-HET. In *Physics and Technology of Amorphous-Crystalline Heterostructure Silicon Solar Cells*. Springer Verlag, in press.
- [41] A. Froitzheim, K. Brendel, L. Elstner, W. Fuhs, K. Kliefoth, and M. Schmidt. Interface recombination in heterojunctions of amorphous and crystalline silicon. *J. Non-Cryst. Sol.*, 299-302:663–7, 2002.
- [42] R. Stangl, A. Froitzheim, M. Schmidt, and W. Fuhs. Design criteria for amorphous/crystalline silicon heterojunction solar cells - a simulation study. In *Proceedings of the 3rd World Conference in Photovoltaic Energy Conversion*, pages 1005–1008, Osaka, Japan, 2004.

- [43] R. Stangl, A. Froitzheim, L. Elstner, and W. Fuhs. Amorphous/crystalline silicon heterojunction solar cells, a simulation study. In *Proceedings of the 17th European Photovoltaic Solar Energy Conference*, page 1383, Munich, Germany, 2001.
- [44] HK Gummel. A self-consistent iterative scheme for one-dimensional steady state transistor calculations. *Electron Devices, IEEE Transactions on*, 11(10):455–465, 1964.
- [45] T. F. Schulze. *Structural, electronic and transport properties of amorphous/crystalline silicon heterojunctions*. PhD thesis, Fakultät II Mathematik und Naturwissenschaften der Technischen Universität Berlin, 2011.
- [46] T. Sontheimer. *Design of electron beam evaporated Si thin films for solid phase crystallized solar cells on glass*. PhD thesis, Technischen Universität Berlin, Fakultät IV, Elektrotechnik und Informatik, 2011.
- [47] AA Istratov, H. Hieslmair, and ER Weber. Iron and its complexes in silicon. *Applied Physics A: Materials Science & Processing*, 69(1):13–44, 1999.
- [48] D. Macdonald and A. Cuevas. Lifetime spectroscopy of feb pairs in silicon. In *Proc. 11th Workshop on Crystalline Silicon Solar Cell Materials and Processes (East Park, Colorado)*, pages 24–31, 2001.
- [49] D. Macdonald, J. Tan, and T. Trupke. Imaging interstitial iron concentrations in boron-doped crystalline silicon using photoluminescence. *Journal of applied physics*, 103:073710, 2008.
- [50] K. Bothe, R. Sinton, and J. Schmidt. Fundamental boron–oxygen-related carrier lifetime limit in mono-and multicrystalline silicon. *Progress in photovoltaics: Research and Applications*, 13(4):287–296, 2005.
- [51] K. Bothe and J. Schmidt. Electronically activated boron-oxygen-related recombination centers in crystalline silicon. *Journal of applied physics*, 99:013701, 2006.
- [52] D.A. Clugston and P.A. Basore. PC1D version 5: 32-bit solar cell modeling on personal computers. In *Proceedings of the 26th IEEE Photovoltaic Specialists Conference*, Anaheim, USA, 1997.
- [53] G. Masetti, R. SEVERI, and S. Solmi. Modeling of Carrier Mobility Against Carrier Concentration in Arsenic-, Phosphorus-, and Boron-lhped Silicon. *IEEE Trans. Elec. Dev.*, ED-30:764, 1983.
- [54] J. Del A., S. Swirhun, and R. M. Swanson. Simultaneous measurement of hole lifetime, hole mobility and bandgap narrowing in heavily doped n-type silicon. *International Electron Devices Meeting*, 31:290–293, 1985.
- [55] JR Hauser. The effects of distributed base potential on emitter-current injection density and effective base resistance for stripe transistor geometries. *Electron Devices, IEEE Transactions on*, 11(5):238–242, 1964.

- [56] J. M. Dorkel and Ph. Leturcq. Carrier mobilities in silicon semi-empirically related to temperature, doping and injection level. *Solid-State Electronics*, 24(9):821–825, September 1981.
- [57] S. K. Pang and A. Rohatgi. A new methodology for separating shockley–read–hall lifetime and auger recombination coefficients from the photoconductivity decay technique. *Journal of Applied Physics*, 74(9):5554–5560, November 1993.
- [58] R. A. Street. *Hydrogenated Amorphous Silicon*. Cambridge University Press, 1991.
- [59] M. J. Powell and S. C. Deane. Improved defect-pool model for charged defects in amorphous silicon. *Phys. Rev. B*, 48:10815–27, 1993.
- [60] M. J. Powell and S. C. Deane. Defect-pool model and the hydrogen density of states in hydrogenated amorphous silicon. *Phys. Rev. B*, 53:10121–32, 1996.
- [61] R. A. Street, J. Kakalios, and M. Hack. Electron drift mobility in doped amorphous silicon. *Phys. Rev. B*, 38:5603–9, 1988.
- [62] RA Street. Trapping parameters of dangling bonds in hydrogenated amorphous silicon. *Applied Physics Letters*, 41(11):1060–1062, 1982.
- [63] RA Street, J. Zesch, and MJ Thompson. Effects of doping on transport and deep trapping in hydrogenated amorphous silicon. *Applied Physics Letters*, 43(7):672–674, 1983.
- [64] R. Meaudre and M. Meaudre. Method for the determination of the capture cross sections of electrons from space-charge-limited conduction in the dark and under illumination in amorphous semiconductors. *Applied physics letters*, 85:245, 2004.
- [65] R. Meaudre and M. Meaudre. Relaxation of electrons following trapping in the space-charge-limited conduction regime of n+-in+ hydrogenated amorphous silicon structures. *Philosophical magazine letters*, 82(5):303–312, 2002.
- [66] N. Beck, N. Wyrsh, C. Hof, and A. Shah. Mobility lifetime product - a tool for correlating a-si: H film properties and solar cell performances. *Journal of applied physics*, 79(12):9361–9368, 1996.
- [67] Heiko Plagwitz, Barbara Terheiden, and Rolf Brendel. Formation of defects at the amorphous silicon - crystalline silicon interface during annealing. In G. Willeke, H. Ossenbrink, and P. Helm, editors, *Proceedings of the 22nd European Photovoltaic Solar Energy Conference, 3-7 September 2007, Milan, Italy*, pages 936–9. WIP-Renewable Energies, Munich, Germany, 2007.
- [68] Heiko Plagwitz, Barbara Terheiden, and Rolf Brendel. Staebler - wronski-like formation of defects at the amorphous-silicon-crystalline silicon interface during illumination. *Journal of Applied Physics*, 103(9):094506–4, May 2008.

- [69] L. Korte and M. Schmidt. Doping type and thickness dependence of band offsets at the amorphous/crystalline silicon heterojunction. *Journal of Applied Physics*, 109:063714–1–6, 2011.
- [70] T. F. Schulze, F. Ruske, B. Rech, and L. Korte. Band lineup in amorphous/crystalline silicon heterojunctions and the impact of hydrogen microstructure and topological disorder. *Phys. Rev. B*, 18:165314, 2011.
- [71] P.G. Le Comber and W.E. Spear. Electronic transport in amorphous silicon films. *Phys. Rev. Lett.*, 25:509–11, 1970.
- [72] M. Stutzmann, D.K. Biegelsen, and R.A. Street. Detailed investigation of doping in hydrogenated amorphous silicon and germanium. *Phys. Rev. B*, 35:5666–701, 1987.
- [73] WE Spear and P.L. Comber. Electronic properties of substitutionally doped amorphous si and ge. *Philosophical Magazine*, 33(6):935–949, 1976.
- [74] BE Pieters, J. Krc, and M. Zeman. Advanced numerical simulation tool for solar cells-asa5. In *Photovoltaic Energy Conversion, Conference Record of the 2006 IEEE 4th World Conference on*, volume 2, pages 1513–1516. IEEE, 2006.
- [75] M. Schmidt, L. Korte, A. Laades, R. Stangl, Ch. Schubert, H. Angermann, E. Conrad, and K.v. Maydell. Physical aspects of a-si:h/c-si hetero-junction solar cells. *Thin Solid Films*, 515:7475–80, 2007.
- [76] M. Stutzmann. A comment on thermal defect creation in hydrogenated amorphous silicon. *Philosophical magazine letters*, 66(3):147–150, 1992.
- [77] John Y. W. Seto. The electrical properties of polycrystalline silicon films. *Journal of Applied Physics*, 46(12):5247–5254, December 1975.
- [78] M. Cao, T.J. King, and K.C. Saraswat. Determination of the densities of gap states in hydrogenated polycrystalline Si and Si_{0.8}Ge_{0.2} films. *Applied physics letters*, 61(6):672–674, 1992.
- [79] S. Hirae, M. Hirose, and Y. Osaka. Energy distribution of trapping states in polycrystalline silicon. *Journal of Applied Physics*, 51(2):1043–1047, 1980.
- [80] P.P. Altermatt and G. Heiser. Predicted electronic properties of polycrystalline silicon from three-dimensional device modeling combined with defect-pool model. *Journal of applied physics*, 92:2561, 2002.
- [81] S. Hasegawa, S. Takenaka, and Y. Kurata. Plasma-hydrogenation effects on conductivity and electron spin resonance in undoped polycrystalline silicon. *Journal of Applied Physics*, 53(7):5022–5027, 1982.
- [82] W.B. Jackson, NM Johnson, and DK Biegelsen. Density of gap states of silicon grain boundaries determined by optical absorption. *Applied Physics Letters*, 43(2):195–197, 1983.

- [83] P. Kebabli, SR Phillpot, D. Wolf, and H. Gleiter. Amorphous structure of grain boundaries and grain junctions in nanocrystalline silicon by molecular-dynamics simulation. *Acta materialia*, 45(3):987–998, 1997.
- [84] F. Cleri, P. Kebabli, L. Colombo, S.R. Phillpot, and D. Wolf. Correlation between atomic structure and localized gap states in silicon grain boundaries. *Physical Review B*, 57(11):6247, 1998.
- [85] P.P. Altermatt and G. Heiser. Development of a three-dimensional numerical model of grain boundaries in highly doped polycrystalline silicon and applications to solar cells. *Journal of applied physics*, 91:4271, 2002.
- [86] V. Kveder, M. Kittler, and W. Schröter. Recombination activity of contaminated dislocations in silicon: A model describing electron-beam-induced current contrast behavior. *Physical Review B*, 63(11):115208, 2001.
- [87] M. Kittler, W. Seifert, T. Arguirov, I. Tarasov, and S. Ostapenko. Room-temperature luminescence and electron-beam-induced current (EBIC) recombination behaviour of crystal defects in multicrystalline silicon. *Solar energy materials and solar cells*, 72(1-4):465–472, 2002.
- [88] V. V. Kveder, E. A. Steinman, S. A. Shevchenko, and H. G. Grimmeiss. Dislocation-related electroluminescence at room temperature in plastically deformed silicon. *Physical Review B*, 51(16):10520, 1995.
- [89] B. Rau, T. Weber, B. Gorka, P. Dogan, F. Fenske, KY Lee, S. Gall, and B. Rech. Development of a rapid thermal annealing process for polycrystalline silicon thin-film solar cells on glass. *Materials Science and Engineering: B*, 159:329–332, 2009.
- [90] B. Gorka. *Hydrogen Passivation of Polycrystalline Si Thin Film Solar Cells*. PhD thesis, Fakultät II Mathematik und Naturwissenschaften der Technischen Universität Berlin, 2010.
- [91] M. L. D. Scherff, A. Froitzheim, A. Ulyashin, M. Schmidt, W. R. Fahrner, and W. Fuhs. 16.2% efficiency for amorphous/crystalline silicon heterojunction solar cells on flat p-type silicon wafer. In J.-L. Bal u. a., editor, *PV in europe - From PV technology to energy solutions*, pages 216–9, Rome, Italy, 2002. WIP-Munich, ETA-Florence, WIP-Munich.
- [92] M. Tanaka, M. Taguchi, T. Matsuyama, T. Sawada, S. Tsuda, S. Nakano, H. Hanafusa, and Y. Kuwano. Development of new a-Si/c-Si heterojunction solar cells: ACJ-HIT (artificially constructed junction-heterojunction with intrinsic thin-layer). *Jpn. J. Appl. Phys.*, 31:3518–22, 1992.
- [93] H. Fujiwara and M. Kondo. Effects of a-si:h layer thicknesses on the performance of a-si:h/c-si heterojunction solar cells. *J. Appl. Phys.*, 101:054516–9, 2007.
- [94] J. P. Kleider, A. S. Gudovskikh, and P. Roca i Cabarrocas. Determination of the conduction band offset between hydrogenated amorphous silicon and crystalline

- silicon from surface inversion layer conductance measurements. *Appl. Phys. Lett.*, 92:162101, 2008.
- [95] Martin A. Green. *Solar Cells -Operating Principles, Technology and System Application*. The University of New South Wales, 1992.
- [96] M. Taguchi, A. Terakawa, E. Maruyama, and M. Tanaka. Obtaining a higher v_{oc} in hit cells. *Prog. Photovoltaics Res. Appl.*, 13:481–8, 2005.
- [97] S. de Wolf and M. Kondo. Boron-doped a-si:h/c-si interface passivation: Degradation mechanism. *Appl. Phys. Lett.*, 91:112109, 2007.
- [98] Hidenori Mimura and Yoshinori Hatanaka. The current transport mechanism of p-type a—Si:H/n-type c—Si heterojunctions and their application to an imaging device. *Applied Surface Science*, 48-49:472–477, 1991.
- [99] H Mimura and Y Hatanaka. Carrier transport mechanisms of p-type amorphous-n-type crystalline silicon heterojunctions. *Journal Of Applied Physics*, 71(5):2315–2320, March 1992.
- [100] T. F. Schulze, L. Korte, E. Conrad, M. Schmidt, and B. Rech. High-forward-bias transport mechanism in a-si:h/c-si heterojunction solar cells. *phys. stat. sol. a*, 1-4:in press, 2010.
- [101] W. Kern. The evolution of silicon wafer cleaning technology. *J. Electrochem. Soc.*, 137:1887–92, 1990.
- [102] A. Froitzheim, R. Stangl, L. Elstner, M. Schmidt, and W. Fuhs. Interface recombination in amorphous/crystalline silicon solar cells, a simulation study. In *Proceedings of the 29th IEEE Photovoltaic Specialists Conference*, pages 1238–41, New Orleans, USA, 2003.
- [103] M. Rahmouni, A. Datta, P. Chatterjee, J. Damon-Lacoste, C. Ballif, and P. Roca i Cabarrocas. Carrier transport and sensitivity issues in heterojunction with intrinsic thin layer solar cells on n-type crystalline silicon: A computer simulation study. *J. Appl. Phys.*, 107:054521, 2010.
- [104] C. Spinella, S. Lombardo, and F. Priolo. Crystal grain nucleation in amorphous silicon. *Journal of applied physics*, 84:5383, 1998.
- [105] M.A. Green, K. Emery, Y. Hishikawa, and W. Warta. Solar cell efficiency tables (version 36). *Prog. Photovolt: Res. Appl.*, 18:346–352, 2010.
- [106] T. Sontheimer, C. Becker, F. Ruske, C. Klimm, U. Bloeck, S. Gall, O. Kunz, T. Young, R. Egan, J. Huebkes, et al. Challenges and opportunities of electron beam evaporation in the preparation of poly-si thin film solar cells. In *Photovoltaic Specialists Conference (PVSC), 2010 35th IEEE*, pages 000614–000619. IEEE, 2010.

- [107] T. Sontheimer, C. Becker, C. Klimm, S. Gall, B. Rech, Q. Wang, B. Yan, S. Higashi, CC Tsai, and A. Flewitt. Crystallization kinetics in high-rate electron beam evaporated poly-si thin film solar cells on zno: Al. In *Materials Research Society Symposium Proceedings*, volume 1245. Materials Research Society, 9800 McKnight Rd., Suite 327 Pittsburgh PA 15237 USA, 2010.
- [108] K. Kliefoth and M. Franke. *Kontakloses Leitfaehigkeits-Messgeraet nach Curtis und Verkuil*. HZB, 2004.
- [109] F. Rieboldt. Bestimmung von ladungsträgerlebensdauern in silizium-heterostrukturen. Master’s thesis, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät I Institut für Physik Humboldt-Universität zu Berlin, September 2010.
- [110] A.-M. Teodoreanu. Charakterisierung und simulation von polykristallinen silizium dünnschichtszellzellen. Master’s thesis, Technischen Universität Berlin, Fakultät IV, Elektrotechnik und Informatik, Dezember 2010.
- [111] K. Kliefoth. Der SPV-messplatz. Arbeitsbericht, Helmholtz-Zentrum Berlin, 2003.
- [112] R.A. Sinton, A. Cuevas, and M. Stuckings. Quasi-steady-state photoconductance, a new method for solar cell material and device characterization. In *Photovoltaic Specialists Conference, 1996., Conference Record of the Twenty Fifth IEEE*, pages 457–460, 1996.
- [113] R. A. Sinton and A. Cuevas. Contactless determination of current–voltage characteristics and minority-carrier lifetimes in semiconductors from quasi-steady-state photoconductance data. *Appl. Phys. Lett.*, 69:2510–2512, October 1996.
- [114] A. Cuevas and R. A. Sinton. Prediction of the open-circuit voltage of solar cells from the steady-state photoconductance. *Prog. Photovoltaics Res. Appl.*, 5(2):79–90, 1997.
- [115] K.R. McIntosh and R.A. Sinton. Uncertainty in photoconductance lifetime measurements that use an inductive-coil detector. In *Proceedings of the 23rd European Photovoltaic Solar Energy Conference, 1-5 September 2008, Valencia, Spain*, pages 77–82, 2008.
- [116] H. W. Curtis and R. L. Verkuil. A high signal-to-noise oscillator for contactless measurement of photoinduced carrier lifetimes. *ASTM special technical publication*, (712):210–224, 1980.
- [117] W. Demtröder. *Experimentalphysik 2: Elektrizität und Optik*. Springer Verlag, 1999.
- [118] P. Drude. Electronic theory of metals i. *Ann. Phys*, 1(4), 1900.
- [119] L. Kronik and Y. Shapira. Surface photovoltage phenomena: Theory, experiment, and applications. *Surface Science Reports*, 37:5–206, 1999.

- [120] K. Heilig. Determination of surface properties by means of large signal photovoltage pulses and the influence of trapping. *Surf. Sci.*, 44:421–37, 1974.
- [121] L. Korte, A. Laades, K. Lauer, R. Stangl, D. Schaffarzik, and M. Schmidt. Surface photovoltage investigation of recombination at the a-si/c-si heterojunction. *Thin Solid Films*, 517:6396–400, 2009.
- [122] C. Leendertz, N. Mingirulli, T. F. Schulze, J. P. Kleider, B. Rech, and L. Korte. Physical insight into interface passivation of a-si:h/c-si heterostructures by analysis of injection-dependent lifetime and band bending. In *Proceedings of the 25rd European Photovoltaic Solar Energy Conference, 6-10 September 2010, Valencia, Spain*, pages 1377–1381. WIP Munich, 2010.
- [123] S. Steingrube, DS Steingrube, R. Brendel, and PP Altermatt. Comprehensive model for interface recombination at a-si: H/c-si interfaces based on amphoteric defects. *physica status solidi (c)*, 7(2):276–279, 2010.
- [124] Silke Steingrube, Pietro P. Altermatt, Daniel S. Steingrube, Jan Schmidt, and Rolf Brendel. Interpretation of recombination at c-si/sinx interfaces by surface damage. *J. Appl. Phys.*, 108:014506, 2010.
- [125] L. Korte, A. Laades, and M. Schmidt. Electronic states in a-si:h/c-si heterostructures. *J. Non-Cryst. Sol.*, 352:1217–20, 2006. Proceedings of the 21st International Conference on Amorphous and Nanocrystalline Semiconductors (ICANS 21).
- [126] C. Leendertz, N. Mingirulli, T. F. Schulze, J. P. Kleider, B. Rech, and L. Korte. Discerning passivation mechanisms at a-si:h/c-si interfaces by means of photoconductance measurements. *Appl. Phys. Lett.*, 98(20):202108, 2011.
- [127] M. Bail, M. Schulz, and R. Brendel. Space-charge region-dominated steady-state photoconductance in low-lifetime si wafers. *Applied Physics Letters*, 82(5):757–759, February 2003.
- [128] P.J. Cousins, D.H. Neuhaus, and J.E. Cotter. Experimental verification of the effect of depletion-region modulation on photoconductance lifetime measurements. *Journal of applied physics*, 95(4):1854–1858, 2004.
- [129] A. Cuevas and F. Recart. Capacitive effects in quasi-steady-state voltage and lifetime measurements of silicon devices. *Journal of Applied Physics*, 98(7):074507–7, October 2005.
- [130] D. Macdonald, M. Kerr, and A. Cuevas. Boron-related minority-carrier trapping centers in p-type silicon. *Applied physics letters*, 75:1571, 1999.
- [131] J. Schmidt, K. Bothe, and R. Hezel. Oxygen-related minority-carrier trapping centers in p-type czochralski silicon. *Applied physics letters*, 80(23):4395–4397, 2002.
- [132] J. A. Hornbeck and J. R. Haynes. Trapping of minority carriers in silicon. i. p-type silicon. *Phys. Rev.*, 97:311–21, 1955.

- [133] L. Korte and M. Schmidt. Investigation of gap states in phosphorous-doped ultra-thin a-si:h by near-uv photoelectron spectroscopy. *J. Non-Cryst. Sol.*, 354:2138–43, 2008.
- [134] T. F. Schulze, H. N. Beushausen, C. Leendertz, A. Dobrich, B. Rech, and L. Korte. Interplay of amorphous silicon disorder and hydrogen content with interface defects in amorphous/crystalline silicon heterojunctions. *Appl. Phys. Lett.*, 96(25):252102, 2010.
- [135] J.W.A. Schüttauf, K.H.M. van der Werf, I.M. Kielen, W.G. van Sark, J.K. Rath, and R.E.I. Schropp. Excellent crystalline silicon surface passivation by amorphous silicon irrespective of the technique used for chemical vapor deposition. *Applied Physics Letters*, 98:153514, 2011.
- [136] S. de Wolf, S. Olibet, and C. Ballif. Stretched-exponential a-si:h/c-si interface recombination decay. *Applied Physics Letters*, 93:032101–3, July 2008.
- [137] Daniel Macdonald and Andres Cuevas. Reduced fill factors in multicrystalline silicon solar cells due to injection-level dependent bulk recombination lifetimes. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 8(4):363–375, 2000.
- [138] Jan Schmidt, A. Cuevas, Stefan Rein, and Stefan W. Glunz. Impact of light-induced recombination centres on the current-voltage characteristic of czochralski silicon solar cells. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 9(4):249–255, 2001.
- [139] A.M. Goodman. A method for the measurement of short minority carrier diffusion lengths in semiconductors. *Journal of Applied Physics*, 32(12):2550–2552, 1961.
- [140] SA Edmiston, G. Heiser, AB Sproul, and MA Green. Improved modeling of grain boundary recombination in bulk and p-n junction regions of polycrystalline silicon solar cells. *Journal of applied physics*, 80(12):6783–6795, 1996.
- [141] T. Matsui, T. Yamazaki, A. Nagatani, K. Kino, H. Takakura, and Y. Hamakawa. 2d-numerical analysis and optimum design of thin film silicon solar cells. *Solar energy materials and solar cells*, 65(1-4):87–93, 2001.
- [142] K. Kurobe, Y. Ishikawa, Y. Yamamoto, T. Fuyuki, and H. Matsunami. Effects of grain boundaries in polycrystalline silicon thin-film solar cells based on the two-dimensional model. *Solar energy materials and solar cells*, 65(1-4):201–209, 2001.
- [143] M. Gloeckler, J.R. Sites, and W.K. Metzger. Grain-boundary recombination in cu (in, ga) se solar cells. *Journal of applied physics*, 98:113704, 2005.
- [144] WK Metzger and M. Gloeckler. The impact of charged grain boundaries on thin-film solar cells and characterization. *Journal of applied physics*, 98:063701, 2005.

- [145] M. Nerat, G. Cernivec, and F. Smole. Simulation study of the effects of grain shape and size on the performance of cu (in, ga) se₂ solar cells. *Journal of Applied Physics*, 104(8):083706–083706, 2008.
- [146] J. Wong, JL Huang, B. Eggleston, MA Green, O. Kunz, R. Evans, M. Keevers, and RJ Egan. Lifetime limiting recombination pathway in thin-film polycrystalline silicon on glass solar cells. *Journal of Applied Physics*, 107(12):123705–123705, 2010.
- [147] H.G. Wagemann and H. Eschrich. *Photovoltaik: Solarstrahlung und Halbleitereigenschaften, Solarzellenkonzepte und Aufgaben*. Vieweg+ Teubner, 2010.
- [148] C. Leendertz, F. Streicher, M.C. Lux-Steiner, and S. Sadewasser. Evaluation of kelvin probe force microscopy for imaging grain boundaries in chalcopyrite thin films. *Appl. Phys. Lett.*, 89:113120, 2006.
- [149] S. Sadewasser, T. Glatzel, M. Rusu, A. Jäger-Waldau, and M.C. Lux-Steiner. High-resolution work function imaging of single grains of semiconductor surfaces. *Applied physics letters*, 80:2979, 2002.
- [150] J. Schmidt and A.G. Aberle. Carrier recombination at silicon–silicon nitride interfaces fabricated by plasma-enhanced chemical vapor deposition. *Journal of applied physics*, 85:3626, 1999.
- [151] D. Amkreutz, J. Müller, M. Schmidt, T. Hänel, and T. F. Schulze. Electron-beam crystallized large grained silicon solar cell on glass substrate. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 2011.
- [152] Cm Wu and Es Yang. Carrier transport across heterojunction interfaces. *Solid-State Electronics*, 22(3):241–248, 1979.
- [153] G.A.M. Hurkx, D.B.M. Klaassen, and M.P.G. Knuvers. A new recombination model for device simulation including tunneling. *Electron Devices, IEEE Transactions on*, 39(2):331–338, 1992.
- [154] Joze Furlan, Zarko Gorup, Andrej Levstek, and Slavko Amon. Thermally assisted tunneling and the Poole–Frenkel effect in homogenous a-Si. *Journal of Applied Physics*, 94(12):7604–7610, December 2003.

Publikationsliste

Publikationen im Rahmen der Arbeit

Publikationen von Fachleuten geprüft

C. Leendertz, R. Stangl, T. F. Schulze, M. Schmidt, and L. Korte. A recombination model for a-si:h/c-si heterostructures. *Phys. Status Solidi C*, 7:1005, 2010.

C. Leendertz, N. Mingirulli, T. F. Schulze, J. P. Kleider, B. Rech, and L. Korte. Discerning passivation mechanisms at a-si:h/c-si interfaces by means of photoconductance measurements. *Appl. Phys. Lett.*, 98(20):202108, 2011.

C. Leendertz and R. Stangl. Modeling an a-Si:H/c-Si Solar Cell with AFORS-HET. In *Physics and Technology of Amorphous-Crystalline Heterostructure Silicon Solar Cells*. Springer Verlag, in press.

T. F. Schulze, H. N. Beushausen, C. Leendertz, A. Dobrich, B. Rech, and L. Korte. Interplay of amorphous silicon disorder and hydrogen content with interface defects in amorphous/crystalline silicon heterojunctions. *Appl. Phys. Lett.*, 96(25):252102, 2010.

R. Stangl and C. Leendertz. General principles of solar cell simulation and introduction to afors-het. In *Physics and Technology of Amorphous-Crystalline Heterostructure Silicon Solar Cells*. Springer Verlag, in press.

Sonstige Publikationen

C. Leendertz, N. Mingirulli, T. F. Schulze, J. P. Kleider, B. Rech, and L. Korte. Physical insight into interface passivation of a-si:h/c-si heterostructures by analysis of injection-dependent lifetime and band bending. In *Proceedings of the 25th European Photovoltaic Solar Energy Conference, 6-10 September 2010, Valencia, Spain*, pages 1377–1381. WIP Munich, 2010.

R. Stangl, C. Leendertz, and J. Haschke. Numerical simulation of solar cells and solar cell characterization methods: the open-source on demand program afors-het. In Radu D Rugesu, editor, *Solar Energy*. InTech, 2010.

T.F. Schulze, N. Mingirulli, C. Leendertz, H.N. Beushausen, B. Rech, and L. Korte. Impact of a-si:h structural properties on annealing behavior and voc of a-si:h/c-si heterojunction solar cells. In *25th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition / 5th World Conference on Photovoltaic Energy Conversion, 6-10 Septem-*

ber 2010, Valencia, Spain, pages 1276–81. WIP Munich, 2010.

T. F. Schulze, H. N. Beushausen, C. Leendertz, A. Dobrich, T. Hannappel, L. Korte, and B. Rech. Impact of a-si:h structural properties on the annealing behavior of a-si:h/c-si heterostructures used as precursors for high-efficiency solar cells. In *Defects in Inorganic Photovoltaic Materials*, volume 1268 of *MRS Symposia Proceedings*, 2010.

L. Korte, T. F. Schulze, C. Leendertz, M. Schmidt, and B. Rech. Band alignment at amorphous/crystalline silicon hetero-interfaces. In *MRS Symp Proc.*, volume 1321, page A15.3, 2011.

T.F. Schulze, C. Leendertz, N. Mingirulli, L. Korte, and B. Rech. Impact of fermi-level dependent defect equilibration on voc of amorphous/crystalline silicon heterojunction solar cells. *Energy Procedia*, 8:282 – 287, 2011. Proceedings of the SiliconPV 2011 Conference (1st International Conference on Crystalline Silicon Photovoltaics).

Publikationen des Autors zu anderen Themen

C. Leendertz, F. Streicher, M.C. Lux-Steiner, and S. Sadewasser. Evaluation of kelvin probe force microscopy for imaging grain boundaries in chalcopyrite thin films. *Appl. Phys. Lett.*, 89:113120, 2006.

S. Sadewasser, C. Leendertz, F. Streicher, and M.C. Lux-Steiner. The influence of surface topography on kelvin probe force microscopy. *Nanotechnology*, 20:505503, 2009.

S. Siebentritt, S. Sadewasser, M. Wimmer, C. Leendertz, T. Eisenbarth, and M.C. Lux-Steiner. Evidence for a neutral grain-boundary barrier in chalcopyrites. *Phys. Rev. Lett.*, 97(14):146601, 2006.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen, die diese Arbeit möglich gemacht haben und die mich in den letzten drei Jahren unterstützt haben, bedanken.

Besonderer Dank geht an Professor Dr. Bernd Rech und Dr. Lars Korte vom Helmholtz-Zentrum Berlin, Institut für Siliziumphotovoltaik, die meine Doktorarbeit betreut haben. Ich bin sehr dankbar für das interessante Forschungsthema, die fachliche Unterstützung und die vielen Ideen, die in diese Arbeit eingeflossen sind. Ganz besonderen Dank auch für das kritische Lesen meiner Doktorarbeit, meiner wissenschaftlichen Publikationen und beim Vorbereiten meiner Konferenzbeiträge.

Darüber hinaus danke ich Prof. Dr. Mario Dähne und Prof. Dr. Jean-Paul Kleider dafür, dass sie meine Arbeit begutachten. Bei Prof. Dr. Jean-Paul Kleider möchte ich mich auch sehr für die vielen Diskussionen und den fachlichen Rat bedanken, die insbesondere bei dem Erarbeiten des semi-analytischen Modells zur Analyse von Ladungsträgerlebensdauern geholfen haben. Zudem möchte ich mich bei Dr. Rolf Stangl und Dr. Manfred Schmidt bedanken, die mir mit ihrem tiefgreifenden Wissen zur Physik der Solarzellen weiterhelfen konnten. An Dr. Rolf Stangl geht besonderer Dank dafür, dass er mir im ersten Jahr meiner Arbeit die physikalischen Gleichungen und programmtechnischen Details des numerischen Solarzellensimulators AFORS-HET erklärt hat.

Großer Dank geht auch an die beiden Masterstudenten Anna-Maria Teodoreanu und Felix Rieboldt, die ich Rahmen dieser Arbeit betreut habe und mit denen ich viele Ergebnisse dieser Arbeit gemeinsam erarbeitet habe. So hat Anna-Maria Teodoreanu mit großem Fleiß und vielen Ideen bei den Arbeiten zur poly-Si Dünnschichtsolarzelle geholfen. Vielen Dank auch für das Korrekturlesen meiner Doktorarbeit. Mit Felix Rieboldts großer Hilfe war es möglich den SPV Aufbau und den HS-PCD Aufbau zu optimieren sowie die Auswertung der SPV Transienten zu erarbeiten.

Weiterhin danke ich ganz besonders auch Tim Schulze und Nicola Mingirulli, die viele interessante a-Si:H/c-Si Serien geplant und Deponiert habe und sowohl bei der Messung als auch in vielen Diskussionen zur Auswertung und Interpretation der Daten geholfen haben. Tim Schulze danke ich insbesondere auch dafür, dass er mir mit seinem umfangreichen Kenntnissen zu den amorphen Siliziumschichten immer weiterhelfen konnte.

Vielen Dank auch an Tobias Sontheimer für die Serienplanung und Deposition der poly-Si Absorberschichten und den fachlichen Diskussionen zu den Geheimnissen der poly-Si Zelle. Weiterhin danke ich Mahdi el Mhamdi und Robert Rössler für die Zusammenarbeit bei der Messung und Auswertung der a-Si:H/c-Si Lebensdauerproben.

Mein Dank geht auch an Marie Gueunier-Farret und Renaud Varache vom LGEP mit denen ich an der Implementierung von diversen Tunnelmodellen für AFORS-HET gearbeitet habe.

Weiterhin danke ich Dr. Klaus Kliefoth dafür, dass er mir die experimentelle und

theoretischen Details der SPV Methode näher gebracht hat. Thomas Lussky für die Hilfe bei diversen Arbeiten an der Elektronik von SPV und QSSPC/PCD Aufbau und Thorsten Seefeld für die Herstellung einiger kleiner Konstruktionen zur Verbesserung dieser Messplätze.

Erhard Conrad, Danke ich für die PECVD-Abscheidungen, der a-Si:H Schichten, Stefan Common für die e-beam-Abscheidungen und Martin Muske für die RTA Behandlungen der poly-Si Proben. Kerstin Jacob und Anja Scheu danke ich für die chemischen Prozesse zur Reinigung der Proben und Dagmar Patzek für die Hilfe bei der Probencharakterisierung.

Ich danke den vielen Mitarbeitern und Doktorandenkollegen für die tolle Arbeitatmosphäre und die gemeinsame Zeit, die wir auch abseits der Arbeit miteinander verbracht haben.

Darüber hinaus danke ich meinen Freunden und Schwestern und ganz besonders meinen Eltern, die mich während meines gesamten Studiums in vielfacher Hinsicht unterstützt haben.