

Numerische Simulationen von Dünnschichtsolarzellen aus amorphem und mikrokristallinem Silizium

—

Modellvalidierung und Einflüsse der Substrattopographie auf die
elektrischen Solarzelleneigenschaften



Von der Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften
der Carl von Ossietzky Universität Oldenburg
zur Erlangung des Grades und Titels eines
Doktors der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)
angenommene Dissertation

von Herrn Stefan Ewald Geißendörfer
geboren am 22. April 1978 in Ochsenfurt

Erstgutachter: Prof. Dr. Carsten Agert

Zweitgutachter: Prof. Dr. Jürgen Parisi

Tag der Disputation: 16.11.2012

Kurzfassung der Arbeit

Die vorliegende Arbeit präsentiert die Ergebnisse zur Modellentwicklung von optischen und elektrischen Simulationen amorpher und mikrokristalliner Silizium-Dünnschichtsolarzellen. Die hierfür als Eingangsparameter benötigten photoelektrischen Materialeigenschaften der einzelnen Schichten wurden zum einen aus Publikationen, zum anderen mittels experimenteller Charakterisierungsmethoden bestimmt. Wie der Vergleich mit experimentellen Messungen von Hell- und Dunkelkennlinien sowie EQE-Spektren bestätigt, kann mit diesen Parametersätzen erfolgreich die elektrische Modellierung von Dünnschichtsolarzellen aus amorphem Silizium (a-Si:H) mit variierenden Absorberschichtdicken durchgeführt werden. Dies ermöglicht die theoretische Beschreibung komplexer Schichtsysteme aus a-Si:H Materialien und somit eine sichere Prognose der elektrischen Solarzellencharakteristiken. Durch die Implementierung von Band-zu-Band-Tunnelprozessen in die Solarzellenmodellierung wird zudem gezeigt, dass einerseits die experimentell beobachteten Halbleitereigenschaften von transparenten leitfähigen Oxiden (TCO) und andererseits die monolithische Verschaltung mikromorpher Tandemstrukturen simulativ abgebildet werden können. Des Weiteren werden mehrdimensionale virtuelle Strukturen präsentiert, mit denen die Simulation von Lichtstreuungseffekten an internen Solarzellengrenzflächen ermöglicht wird. Dies wird durch das Übertragen experimenteller AFM-Messungen von rauen TCO-Oberflächen in die Software umgesetzt. Die aufgeführten elektrischen Simulationsergebnisse zeigen, dass bei der Verwendung von Asahi-U Substraten die lokalen Unterschiede des Generationsratenprofils keinen nennenswerten Einfluss auf die Leerlaufspannungen und Füllfaktoren der Hellkennlinien haben. Entscheidend ist die absolute Anzahl der photogenerierten Ladungsträger, die pro Zeiteinheit in der intrinsischen Absorberschicht erzeugt werden. Zudem wird eine neue Strategie zur dreidimensionalen (3D) elektrischen Modellierung präsentiert, in der nur Teile der optischen Simulationsdomäne für die anschließende elektrische Simulation berücksichtigt werden. Das Anwenden dieser Subdomänen-Strategie liefert eine gute Übereinstimmung von experimentellen und simulierten Hellkennlinien von a-Si:H-Solarzellen und reduziert die Simulationszeiten ohne Einbußen der Genauigkeit erheblich. Die 3D-Modellierung wird des Weiteren auf neuartige TCO-Nanosäulensubstrate übertragen, indem die durchschnittliche Säulengeometrie und isotrope Wachstumseigenschaften amorpher Siliziumschichten berücksichtigt werden. Es wird gezeigt, dass das Füllen von Zwischenräumen der TCO-Nanosäulenstruktur mit a-Si:H zu verminderten Leerlaufspannungen und Füllfaktoren führen kann. Durch mehrdimensionale Modellierungen kann der kritische Spannungsabfall des Zellsystems auf unterschiedlichen Nanosäulensubstraten visualisiert und die kritischen Bereiche detektiert werden.

Abstract

In this thesis, the development and the application of a numerical model for the simulation of the optical and electrical behaviour of amorphous and microcrystalline silicon thin film solar cells is described. The model has been developed using the commercial computational environment “Sentaurus TCAD”. For the simulation of the photoelectric material properties, the availability of input parameters for all individual layers is essential. Hence, parameters are taken from either the literature or are determined by applying experimental characterisation methods. With the parameter sets presented here, the electrical behaviour of thin film solar cells of amorphous silicon (a-Si:H) with varying absorber layer thicknesses can be modelled successfully. The results are validated by the comparison of simulated and experimental determined dark and bright current-voltage-characteristics (IV-curves) as well as external-quantum-spectra. The comparison between model results and measurements demonstrate that the theoretical description of complex layer systems of a-Si:H materials and, thus, a reliable forecast of the electrical characteristics of thin film solar cells is possible. Furthermore, the implementation of band-to-band tunnelling processes to the solar cell standard model is presented to consider experimentally observed semiconducting properties of transparent conducting oxides (TCO). In addition, the monolithic interconnection of micromorphous tandem solar cells can be simulated successfully by applying the band-to-band tunneling process. Furthermore, multi-dimensional virtual structures are presented in this thesis. These structures enable the simulation of light-scattering effects at the internal solar cell interfaces. The implementation of these effects is realized by the transfer of experimental atomic force measurements (AFM) of rough TCO surfaces to the model, which predefines the internal interface structure of the virtual device. The presented optical and electrical simulations of amorphous and microcrystalline silicon thin film solar cells on Asahi-U substrates show lateral differences of the optical generation rate profiles. It is shown that the influence of the lateral differences on the open circuit voltage and fill factor is negligible. The significant aspect is the total number of photogenerated charge carriers, which are generated per unit of time in the intrinsic absorber layer. In addition, a new strategy for three-dimensional (3D) electrical modeling is presented, which consider only part of the optical simulation domain for subsequent electrical simulations. Using this subdomain strategy, a good agreement between experimental and simulated IV-curves of a-Si:H solar cells can be achieved and the simulation time is reduced significantly without losses of the simulation accuracy. All these modelling results enable a reliable simulation of solar cells on new nanorod substrates, in which the average rod geometry and isotropic growth properties of amorphous silicon layers are

considered. It is shown that the filling of gaps of the TCO nanorod structures with a-Si:H can lead to reduced open circuit voltages and fill factors. By multi-dimensional modeling, critical drops of the open circuit voltage of the solar cell system can be visualized and the critical regions are detected.

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Einleitung | 1 |
| 2 | Theoretische Grundlagen | 7 |
| 2.1 | Eigenschaften von amorphem Silizium | 7 |
| 2.2 | Eigenschaften von mikrokristallinem Silizium..... | 10 |
| 2.3 | Untersuchte Solarzellenstrukturen..... | 11 |
| 3 | Numerische Simulationen mit Sentaurus TCAD | 19 |
| 3.1 | Aufbau von Simulationsdomänen..... | 19 |
| 3.2 | Optische Modelle und Materialparameter | 22 |
| 3.3 | Elektrische Materialparameter..... | 24 |
| 3.3.1 | Dotierkonzentration..... | 27 |
| 3.3.2 | Ladungsträgermobilität | 28 |
| 3.3.3 | Elektronenaffinität..... | 29 |
| 3.3.4 | Mobilitätsbandlücke | 29 |
| 3.3.5 | Effektive Zustandsdichte..... | 30 |
| 3.3.6 | Bandausläufer..... | 30 |
| 3.3.7 | Tiefe Störstellen | 32 |
| 3.3.8 | Serien- und Parallelwiderstand..... | 32 |
| 4 | Modell- und Parametervalidierung von a-Si:H p-i-n Solarzellen | 35 |
| 4.1 | Experiment..... | 35 |
| 4.2 | Simulationsdetails..... | 35 |
| 4.3 | Ergebnisse und Diskussion | 37 |
| 4.4 | Zusammenfassung | 41 |

| | | |
|----------|---|------------|
| 5 | Tunnelprozesse in Silizium-Dünnschichtsolarzellen..... | 43 |
| 5.1 | Simulationsdetails..... | 43 |
| 5.2 | Ergebnisse und Diskussion | 46 |
| 5.2.1 | Tunnelprozess am TCO/a-Si:H(p)-Übergang..... | 46 |
| 5.2.2 | Tunnelprozess am internen pn-Übergang mikromorpher Tandemstrukturen . | 49 |
| 5.3 | Zusammenfassung | 52 |
| 6 | Einfluss des Generationsratenprofils auf die Hellkennlinie..... | 55 |
| 6.1 | Experiment..... | 55 |
| 6.2 | Simulationsdetails..... | 57 |
| 6.3 | Ergebnisse und Diskussion | 61 |
| 6.4 | Zusammenfassung | 64 |
| 7 | Verwendung von Subdomänen zur elektrischen 3D-Modellierung | 67 |
| 7.1 | Simulationsdetails..... | 68 |
| 7.2 | Ergebnisse und Diskussion | 68 |
| 7.3 | Zusammenfassung | 74 |
| 8 | a-Si:H p-i-n Solarzellen auf TCO-Nanosäulenstrukturen | 75 |
| 8.1 | Experiment..... | 75 |
| 8.2 | Simulationsdetails..... | 78 |
| 8.3 | Ergebnisse und Diskussion | 81 |
| 8.4 | Zusammenfassung | 88 |
| 9 | Fazit und Ausblick | 91 |
| | Literaturverzeichnis..... | 95 |
| | Publikationsliste | 101 |
| | Lebenslauf | 103 |
| | Erklärung..... | 105 |

Abkürzungsverzeichnis

| | |
|-------------------------------|---|
| 1D | eindimensional |
| 2D | zweidimensional |
| 3D | dreidimensional |
| A | Grundfläche der Simulationsdomäne |
| α, α_λ | Absorptionskoeffizient |
| AFM | Rasterkraftmikroskopie (atomic force microscopy) |
| APCVD | atmospheric pressure chemical vapor deposition |
| a-Si | amorphes Silizium |
| a-Si:H | hydrogenisiertes amorphes Silizium |
| a-Si:H(i) | intrinsisches hydrogenisiertes amorphes Silizium |
| a-Si:H(n) | n-dotiertes hydrogenisiertes amorphes Silizium |
| a-Si:H(p) | p-dotiertes hydrogenisiertes amorphes Silizium |
| C_{dot} | Verdünnung des Dotiergases in Wasserstoff |
| C_{fest} | Festphasenkonzentration |
| C_{gas} | Gasphasenkonzentration |
| c-Si | kristallines Silizium |
| CPM | constant photocurrent measurement |
| c-Si | kristallines Silizium |
| Δd_{NR} | Nanosäulenabstand |
| D(E) | Zustandsdichteverteilung |
| DOS | Zustandsdichte (density of states) |
| $d_{\text{a-Si:H(i)}}$ | Dicke der intrinsischen amorphen Siliziumschicht |
| $d_{\text{µc-Si:H(i)}}$ | Dicke der intrinsischen mikrokristallinen Siliziumschicht |
| e | Elementarladung |
| $E_{\text{A,db}}$ | Energieniveau des Gaußmaximums der Akzeptor-Störstellenverteilung |
| $E_{\text{D,db}}$ | Energieniveau des Gaußmaximums der Donator-Störstellenverteilung |
| E_{F} | Fermi-Energie |
| E_{gap} | Bandlücke des Halbleiters |
| $E_{\text{L}}, E_{\text{LB}}$ | Energie an Leitungsbandkante |
| E_{μ} | Mobilitätsbandlücke des Halbleiters |

| | |
|-------------------------|--|
| E_{photon} | Photonenenergie |
| E_V, E_{VB} | Energie an Valenzbandkante |
| $E_{L,0}$ | Urbachenergie des Leitungsbandausläufers |
| $E_{V,0}$ | Urbachenergie des Valenzbandausläufers |
| EQE | externe Quanteneffizienz |
| $f(E, E_F, T)$ | Fermi-Dirac-Verteilung |
| FDTD | finite difference time-domain |
| FF | Füllfaktor |
| FIB | focused ion beam |
| $G, G(x, y, z)$ | optische Generationsrate |
| h_{NR} | Nanosäulenhöhe |
| HIT | Heterojunction with Intrinsic Thin layer |
| i | intrinsische Halbleiterschicht |
| j_{sc} | Kurzschlussstromdichte (short circuit current density) |
| j_{ph} | photogenerated Stromdichte |
| $j_{ph, a-Si:H(i)}$ | photogenerated Stromdichte der intrinsischen amorphen Siliziumschicht |
| $j_{ph, \mu c-Si:H(i)}$ | photogenerated Stromdichte der intrinsischen mikrokrist. Siliziumschicht |
| k | Extinktionskoeffizient |
| k | Boltzmann-Konstante |
| LB | Leitungsband |
| LPCVD | low pressure chemical vapor deposition |
| μ_e | Ladungsträgermobilität der Elektronen in ausgedehnten Zuständen |
| μ_h | Ladungsträgermobilität der Löcher in ausgedehnten Zuständen |
| $\mu c-Si$ | mikrokristallines Silizium |
| $\mu c-Si:H$ | hydrogenisiertes mikrokristallines Silizium |
| $\mu c-Si:H(i)$ | intrinsisches hydrogenisiertes mikrokristallines Silizium |
| $\mu c-Si:H(p)$ | p-dotiertes hydrogenisiertes mikrokristallines Silizium |
| $\mu c-Si:H(n)$ | n-dotiertes hydrogenisiertes mikrokristallines Silizium |
| M_{c-Si} | Molares Volumen von kristallinem Silizium |
| n | Elektronendichte |
| n | Brechungsindex |
| n | n-dotierte Halbleiterschicht |
| N_A | Avogadro-Konstante |
| N_{c-Si} | Anzahl von Siliziumatomen pro Volumen |
| n_{dot} | effektive Dotierkonzentration |
| N_{db} | Zustandsdichte am Gaußmaximum tiefer Störstellen (dangling bonds) |

| | |
|-------------------------|---|
| N_{eff} | effektive Zustandsdichte |
| n_{eff} | effektive Dotierkonzentration |
| n_{fest} | Dotieratomkonzentration in der Festphase |
| N_L | effektive Zustandsdichte des Leitungsbandes |
| N_{tail} | Zustandsdichte der Bandausläufer (band tails) an den Bandkanten |
| N_V | effektive Zustandsdichte des Valenzbandes |
| p | Löcherdichte |
| p | p-dotierte Halbleiterschicht |
| PECVD | plasma enhanced chemical vapor deposition |
| ϕ | Lichtintensität |
| QFL | Quasi-Fermi-Level |
| QFN | Quasi-Fermi-Niveau |
| R | Rekombinationsrate |
| R_{parallel} | Parallelwiderstand |
| R_{serie} | Serienwiderstand |
| REM | Rasterelektronenmikroskop |
| rms | root mean square |
| σ_{db} | Standardabweichung der gaußverteilten Zustandsdichte von tiefen Störstellen |
| $\sigma_{db}^{+/-}$ | Einfangquerschnitt von geladenen tiefen Störstellen (dangling bonds) |
| σ_{db}^0 | Einfangquerschnitt von ungeladenen tiefen Störstellen (dangling bonds) |
| $\sigma_{tail}^{+/-}$ | Einfangquerschnitt von geladenen Bandausläuferzuständen (band tails) |
| σ_{tail}^0 | Einfangquerschnitt von ungeladenen Bandausläuferzuständen (band tails) |
| $\text{SnO}_2\text{:F}$ | fluordotiertes Zinnoxid |
| SWE | Staebler-Wronski-Effekt |
| SZ | Solarzelle |
| T | Temperatur |
| τ | Lebensdauer der Ladungsträger |
| TCAD | technology computer aided design |
| TCO | Transparent leitfähiges Oxid (transparent conductive oxide) |
| TEM | Transmissionselektronenmikroskopie |
| TMM | Transfer-Matrix-Methode |
| U | Korrelationsenergie |
| U_{ext} | externe Spannung |
| V_{oc} | Leerlaufspannung (open circuit voltage) |
| VB | Valenzband |

| | |
|----------------------|-----------------------------|
| w | Breite der Subdomäne |
| ZnO ₂ :Al | aluminiumdotiertes Zinkoxid |
| Ø _{NR} | Nanosäulendurchmesser |

1 Einleitung

Diese Dissertation befasst sich mit TCAD-Simulationen von siliziumbasierten Dünnschicht-solarzellen, d.h. der Berechnung dieser Solarzellen unter Anwendung physikalischer Modelle anhand eines Computermodells. TCAD (Technology Computer Aided Design) ist eine Kategorie von Softwareprogrammen, mit denen elektronische Systeme wie integrierte Schaltungen nachgebildet und deren interne Stromflüsse berechnet werden können. Die Modellierung von integrierten Schaltungen wird häufig von Mikrochip-Herstellern verwendet, bei denen auf Halbleitersubstraten elektronische Stromkreise in Form von logischen Schaltungen aufgebracht werden. Für die simulative Umsetzung bedeutet dies, dass der gesamte dreidimensionale Aufbau eines logischen Schaltelements am Computer nachgebildet wird. Da Dünnschicht-solarzellen mit ihren typischen Schichtdicken und verwendeten Materialien, wie Halbleiter, Metalle und Isolatoren, mit denen der Mikrochip-Bauelemente vergleichbar sind, können TCAD-Simulationen ebenfalls auf die Photovoltaik-Technologie übertragen werden.

Ist ein erstelltes Computermodell validiert, so kann es experimentelle Messungen erklären und eine detaillierte Einsicht in die physikalischen Vorgänge innerhalb der Solarzellen geben. Dies ist mit experimentellen Methoden teilweise nur schwer bis überhaupt nicht möglich, da sich z.B. Bandstrukturen der gesamten Probe nicht direkt experimentell bestimmen lassen. Je mehr Messergebnisse mit dem erstellten Modell nachgebildet werden können, desto größer ist die Aussagekraft bezüglich physikalischer Abläufe. Es können somit aufgeworfene Fragen einer experimentellen Messung, die womöglich einen unerwarteten Verlauf aufzeigt, durch das Einbringen neuer theoretischer Modelle überprüft und geklärt werden. Neben der Möglichkeit experimentelle Messungen nachzubilden und physikalisch zu erklären kann die Simulation auch Voraussagen zu neuen Probenstrukturen machen, falls das erstellte Modell ausreichend kalibriert ist. Neue Strukturen sind z.B. eine bisher fremde Schichtstapelfolge, bei der neue Materialien Verwendung finden, oder die Optimierung der verschiedenen Schichtdicken eines bereits bekannten Probenstapels. Letztere lässt sich wesentlich ökonomischer mit Hilfe eines Computermodells und der damit möglichen Parametervariation durchführen, vergleicht man es mit der kosten- und zeitaufwendigeren experimentellen Parametervariation.

Stand der Wissenschaft

Die numerische Simulation von Solarzellen ist bereits seit Jahrzehnten ein bedeutendes Forschungsgebiet der Photovoltaik, deren Anforderungen und Anwendungen auf Silizium-Dünnschichtsolarzellen im Artikel von M. Zeman und J. Krc zusammengefasst sind [1]. Zudem sind in dieser Publikation die bekanntesten, von Forschungsgruppen selbst erstellten, Software-Pakete aufgeführt und deren Vor- und Nachteile gegenüber kommerziell erhältlicher Software werden ausführlich diskutiert. Diese nichtkommerziellen Software-Pakete sind: Das Programm ASA von der Universität Delft [2], AMPS von der Penn State Universität [3], ASPIN Technology [4], SCAPS von der Universität Ghent [5] und das AFORS Programm vom Hahn-Meitner-Institut in Berlin [6]. Einen detaillierten Überblick und Vergleich dieser Programme zeigt zudem der Artikel von Burgelman et al. [7]. All diese Programme sind jedoch auf die eindimensionale Modellierung beschränkt, die für die Beschreibung von Dünnschichtsolarzellen auf glatten Substraten zunächst ausreichend ist. Aktuelle Rekordzellen aus amorphem und mikrokristallinem Silizium [8, 9] werden jedoch auf rauen Substratoberflächen abgeschieden, so dass das einfallende Licht an den internen Grenzflächen teilweise diffus gestreut wird, was eine erhöhte Lichtabsorption in den Halbleiterschichten zur Folge hat. Der 1D-Halbleitersimulator ASA berücksichtigt diesen Effekt, indem eine winkelabhängige Streuverteilung (ADF: angular distribution function) an den Grenzflächen angenommen wird. Der diffuse Anteil führt aufgrund der Wegverlängerung und der verschwindenden räumlichen Kohärenz des Lichtes zu einer erhöhten Lichtabsorption. Das mit dieser Methode berechnete Generationsratenprofil wird für die elektrische Modellierung wieder auf das virtuelle 1D-Modell übertragen. Publierte Simulationsergebnisse mit dieser Art der 1D-Modellierung führen zu sehr guten Übereinstimmungen mit experimentellen Messungen [10-12]. Die eindimensionale Simulation ist jedoch eine Vereinfachung im Vergleich zu realen Solarzellen, da diese eine gewisse räumliche Ausdehnung besitzen. Erweitert man die virtuelle Probengeometrie um bis zu zwei weitere Raumrichtungen, so können weitere experimentelle Beobachtungen, wie z.B. AFM-Aufnahmen von Substratoberflächen, direkt berücksichtigt werden und die Simulation beinhaltet somit eine erweiterte Abbildung der Realität. Mehrdimensionale Simulationen sind allerdings wesentlich rechenintensiver als die 1D-Modellierung, was leistungsstarke Computer für die Durchführung voraussetzt. Erst ab dem Zeitpunkt von käuflich erschwinglichen Computern mit ausreichender Rechenleistung beschäftigen sich einige Forschungsgruppen mit der Modellierung in mehreren Dimensionen, allerdings größtenteils auf dem Gebiet der Optik. So wurde in den letzten Jahren bereits der geometrische Einfluss von periodischen 2D- und 3D-Substratstrukturen wie Pyramiden- [13-16] oder Gitterstrukturen [17-19] auf den Kurzschlussstrom von Silizium-Dünnschichtsolarzellen untersucht, deren Optik u.a. mit Hilfe der Simulationssoftware CST MICROWAVE STUDIO®

oder OptiFDTD[®] berechnet wurde. Diese optischen Lösungsmethoden basieren auf dem Lösen der Maxwell-Gleichungen innerhalb des Schichtstapels mit Hilfe der FDTD-Methode [20]. Dieser Ansatz kann ebenfalls auf nichtperiodische Grenzflächenstrukturen angewendet werden, indem AFM-Messungen von Substrattopographien in die Simulationssoftware importiert werden und als interne Grenzflächenstrukturen des virtuellen Solarzellenstapels Verwendung finden. Mit Hilfe dieser Methodik ist es möglich Generationsratenprofile in Abhängigkeit realer Substratstrukturen zu berechnen, ohne dabei den Umweg einer winkelabhängigen Streuverteilung zu verwenden [21, 22].

Die optische Simulation ist allerdings nur ein Teil der gesamten Simulation von Solarzellen, da für die tatsächliche Effizienzbestimmung der virtuellen Proben zudem der Ladungsträgertransport durch die einzelnen Schichten berechnet werden muss. Einige Forschungsgruppen erweiterten ihre 1D-Simulationsprogramme bereits in den 90er Jahren für 2D-Modellierungen und zeigten, dass gewisse Substratstrukturen oder eine partielle Beleuchtung der Solarzelle durch die mehrdimensionale Betrachtung Effekte wie Inhomogenitäten des internen elektrischen Feldes untersucht werden können [23, 24]. Aufgrund dessen wird der Stromtransport in den Halbleiterschichten wesentlich komplizierter zu berechnen, was allerdings mit numerischen Lösungsansätzen bewältigt werden kann. Mehrdimensionale elektrische TCAD-Simulationen von Silizium-Dünnschichtsolarzellen werden derzeit nur vereinzelt angewendet, da bisher von Forschungsgruppen meist die oben aufgeführten 1D-Softwarepakete verwendet werden. Es gibt jedoch Ansätze berechnete 3D-Generationsratenprofile von optischen FDTD-Simulationen auf 1D-Simulationsdomänen der Elektrik zu übertragen, wie ein Workshop-Beitrag von G. Letay zeigt [25]. Die vollständig gekoppelte mehrdimensionale Simulation für Silizium-Dünnschichtsolarzellen findet man in der Literatur kaum. Voigt et al. zeigt mit Hilfe von TCAD-Simulationen (Software: SILVACO) den Vergleich der lateralen und vertikalen elektrischen Transporteigenschaften von Silizium-Nanosäulensolarzellen [26]. Ähnliche Untersuchungen finden sich auch im Kapitel 8 dieser Dissertation, wobei die hier aufgeführten Strukturen sich in der Substratherstellung unterscheiden. Weitere aktuelle TCAD-Studien von Chang et al. befassen sich mit neuartigen Nanostreifen-Solarzellen aus amorphem Silizium [27, 28], sowie den Auswirkungen der kristallinen Korngrößen von mikrokristallinen Silizium-Dünnschichtsolarzellen auf die IV-Hellkennlinie [29]. Eine aktuelle Veröffentlichung von Deceglie et al. zeigt die vollständig gekoppelte optische und elektrische Simulation von nanostrukturierten a-Si:H Solarzellen, in der plasmonische Effekte von Silber-Nanopartikeln zur verbesserten Lichteinkopplung in Solarzellenstrukturen mit Hilfe von mehrdimensionalen Simulationsdomänen untersucht werden [30].

Zielsetzungen und Gliederung der Arbeit

Die vorliegende Arbeit baut auf bisherigen Publikationen zur eindimensionalen Modellierung auf, so dass bereits validierte elektrische Parametersätze und physikalische Stromtransportmodelle größtenteils als Grundlage verwendet werden. Basierend auf diesen Ergebnissen soll ein Standardmodell für amorphe und mikrokristalline Silizium-Dünnschichtsolarzellen sowie deren Tandemstruktur erstellt und die Simulationsergebnisse mit experimentellen Messergebnissen verglichen werden, deren Proben am EWE-Forschungszentrum für Energietechnologie e.V. hergestellt werden. Dies soll die Möglichkeit eröffnen, die Simulation auf die im Forschungsinstitut zur Verfügung stehende Schichtabscheidungstechnologie zu kalibrieren, so dass künftige wissenschaftliche Fragestellungen bezüglich der optischen und elektrischen Eigenschaften von experimentell abgeschiedenen Schichtstapeln theoretisch erklärt werden können. Desweiteren soll die eindimensionale Modellierung auf mehrere Dimensionen erweitert werden, so dass experimentell bestimmte Oberflächenstrukturen von TCO-Substraten und das reale PECVD-Schichtwachstum mit in der Simulation berücksichtigt werden können. Dies führt zu einer erweiterten Abbildung der Realität, allerdings ist die mehrdimensionale Modellierung wesentlich rechenintensiver als eindimensionale Simulationen. Es soll daher in dieser Arbeit zunächst die Durchführbarkeit von zwei- und dreidimensionalen Simulationen von Silizium-Dünnschichtsolarzellen demonstriert und mit experimentellen Messungen sowie der eindimensionalen Modellierung verglichen werden. Desweiteren sollen neue Strategien entwickelt werden, mit denen die rechenintensive Modellierung ohne Einschränkung der Genauigkeit der Simulationsergebnisse vereinfacht und beschleunigt wird. Die wissenschaftlichen Fragestellungen, die in dieser Arbeit mit Hilfe der optischen und elektrischen Simulation geklärt werden sollen, sind in den einzelnen Kapiteln wie folgt unterteilt:

Kapitel 4: Kann ein eindimensionales Standardmodell unter Verwendung eines einzigen optischen und elektrischen Parametersatzes amorphe Silizium-Dünnschichtsolarzellen mit variierenden Absorberschichtdicken simulativ beschreiben und wie lassen sich reale Schichtinhomogenitäten in der Modellierung interpretieren und abbilden?

Kapitel 5: Welche physikalischen Modelle müssen in der elektrischen Simulation berücksichtigt werden, um die Halbleitereigenschaften von hochdotierten TCO-Materialien im Dünnschichtsolarzellenstapel abbilden zu können und inwiefern kann der Tunnelprozess zweier Subzellen in einer Tandemsolarzellenstruktur beschrieben und evtl. vereinfacht werden?

Kapitel 6: Können mit Hilfe der mehrdimensionalen Simulation die Lichtstreuereffekte von rauen Grenzflächen im Solarzellenstapel ausreichend theoretisch beschrieben werden und welche Einflüsse haben die Rauigkeiten von kommerziell erhältlichen Asahi-U Substraten auf die elektrischen Solarzeleigenschaften?

Kapitel 7: Inwiefern ist in der simulativen Umsetzung eine Entkopplung von optischen und elektrischen Simulationsdomänen sinnvoll und wie lassen sich rechenintensive dreidimensionale elektrische Modellierungen vereinfachen, um mit ausreichend hoher Genauigkeit experimentell bestimmte Hellkennlinien amorpher Silizium-Dünnschichtsolarzellen abbilden zu können?

Kapitel 8: Welche Geometriestruktur von elektrochemisch abgeschiedenen TCO-Nanosäulen auf glatten Glas/TCO-Substraten führt zu einem maximalen Wirkungsgrad darauf abgeschiedener amorpher Silizium-Dünnschichtsolarzellen und welchen Einfluss können ausgeprägte 3D-Substratstrukturen auf die elektrischen Solarzeleigenschaften haben?

Abbildung 1 fasst den Aufbau der vorliegenden Arbeit nochmals schematisch zusammen. Die Kapitel 2 und 3 dienen mit der Darstellung der theoretischen Grundlagen von Silizium-Dünnschichtsolarzellen und der Einführung von numerischen Simulationen mit der verwendeten Software Sentaurus TCAD als Fundament der darauffolgenden Kapitel 4, 5, 6 und 7. Die in diesen Abschnitten behandelten wissenschaftlichen Fragestellungen und deren simulativen Umsetzungen resultieren in einem tieferen Verständnis zur vollständigen gekoppelten optischen und elektrischen 3D-Modellierung von Silizium-Dünnschichtsolarzellen, womit die Möglichkeit gegeben wird neuartige 3D-Strukturen verlässlich simulativ abzubilden. Dies wird im abschließenden Kapitel 8 - welches größtenteils auf den vorherigen Abschnitten aufbaut - anhand der Simulation von amorphen Silizium-Dünnschichtsolarzellen auf neuartigen TCO-Nanosäulenstrukturen gezeigt.

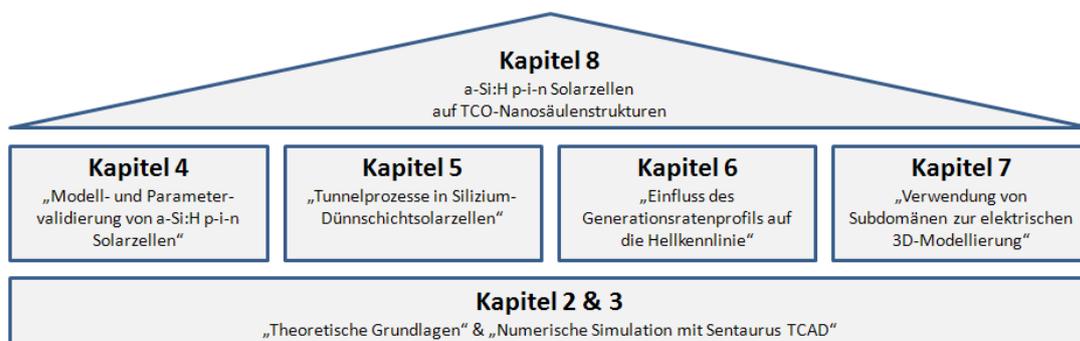


Abbildung 1: Schematischer Aufbau der vorliegenden Arbeit.

2 Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel werden die theoretischen Grundlagen dargestellt, die für das Verständnis der optischen und elektrischen Simulation von Silizium-Dünnschichtsolarzellen bedeutend sind. Zuerst wird auf die atomare Struktur von amorphem Silizium und die daraus resultierenden optischen und elektrischen Materialeigenschaften eingegangen. Desweiteren wird die Schichtmorphologie von mikrokristallinem Silizium behandelt und deren optisches Absorptionsverhalten mit denen von amorphem und kristallinem Silizium verglichen. Nach den materialspezifischen Eigenschaften werden die untersuchten Solarzellenstrukturen aufgezeigt und auf Schichtstapelfolgen, Grenzflächenrauigkeiten und mögliche Tandemstrukturen näher eingegangen.

2.1 Eigenschaften von amorphem Silizium

Amorphes Silizium (a-Si) kann mit Hilfe des PECVD-Prozesses (plasma enhanced chemical vapor deposition) auf verschiedene Substrate, wie z.B. Glas oder Edelstahl, abgeschieden werden [31, 32] und stellt eine nichtkristalline Struktur des Halbleitermaterials Silizium dar [33]. Die Bezeichnung amorph bezieht sich dabei auf die fehlende Fernordnung der Siliziumatome, deren Atomabstände und Bindungswinkel - wie in Abbildung 2 schematisch dargestellt - sich ständig ändern [34]. Dies hat Auswirkungen auf die Bandstruktur des Materials und führt zu so genannten Bandausläufern (band tails), d.h. es besteht keine scharfe Begrenzung der Leitungs- bzw. Valenzbandkante. Abbildung 3 verdeutlicht nochmals die Ursache der Bandausläufer im Energie-Ort-Diagramm. Durch die Bindungsunregelmäßigkeiten ändert sich lokal entsprechend die

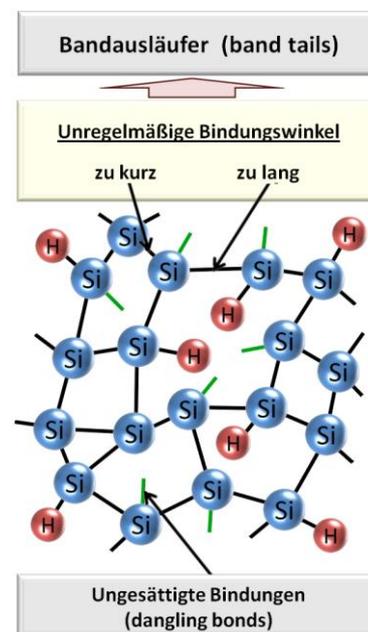


Abbildung 2: Schematische Darstellung der atomaren Struktur von amorphem Silizium mit „Si“ als Siliziumatome und „H“ als Wasserstoffatome.

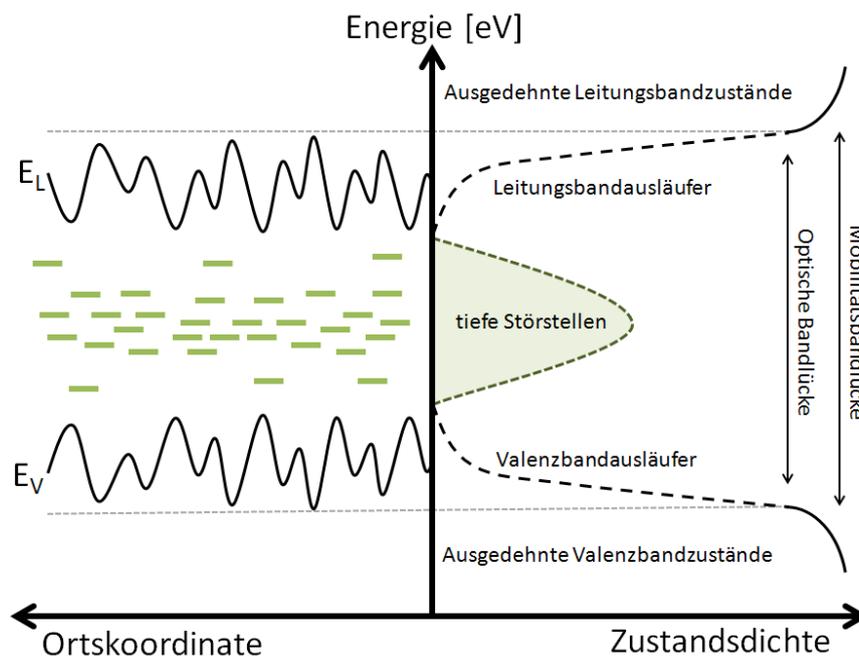


Abbildung 3: Die unterschiedlichen Bindungswinkel der Siliziumatome in amorphem Silizium führen zu einer Energiefluktuation im Ortsraum, was zu Bandausläufern im Energie-Zustandsdichte-Diagramm führt. Die Energieniveaus von ungesättigten Bindungen liegen mittig in der Bandlücke und führen dadurch zu tiefen Störstellen.

Bandlücke, und eine statistische Verteilung von Maxima und Minima der lokalen Energiebandkanten bildet sich aus. Freie Ladungsträger können somit durch Abgabe von Energie an das Gitter in diesen lokalen Energieextrema gefangen werden (Thermalisierung). Mit Hilfe thermischer Anregung ist es allerdings möglich, die Ladungsträger über die sogenannte Mobilitätsbandlücke energetisch anzuheben, welche die lokalisierten von den ausgedehnten Zuständen trennt.

Durch die Unregelmäßigkeit der Struktur und den daraus resultierenden inneren Verspannungen von a-Si können Siliziumatome mit ihren vier Valenzelektronen aufgrund fehlender Nachbaratome teilweise keine kovalenten Bindungen eingehen, und ungesättigte Bindungen (dangling bonds) entstehen. Dies führt zu elektronischen Zuständen in der Mitte der Bandlücke (siehe Abbildung 3), die mit keinem, einem oder zwei Elektronen bzw. Löchern besetzt sein können. Die Dichte der nicht abgesättigten Bindungen von reinem amorphem Silizium liegt bei 10^{19} bis 10^{20} cm^{-3} . Durch die Hydrogenisierung, d.h. durch die Zugabe von Wasserstoffgas während des Herstellungsprozesses, finden die offenen Siliziumbindungen ein Wasserstoffatom als Bindungspartner, so dass durch die Si-H-Bindungen die offenen Bindungen abgesättigt werden. Mit der Hydrogenisierung kann die Defektdichte auf ca. 10^{15} bis 10^{16} cm^{-3} gesenkt werden [34], und das Material ist für die Anwendung in elektronischen Bauelementen und Solarzellen geeig-

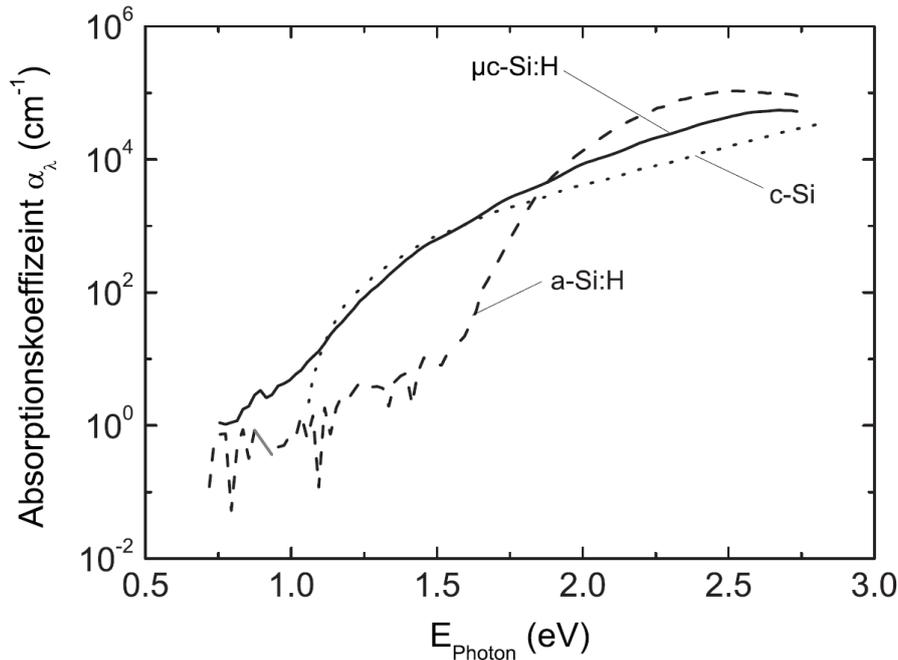


Abbildung 4: Experimentell bestimmte Absorptionskoeffizienten in Abhängigkeit der Photonenenergie für das Halbleitermaterial Silizium in den drei unterschiedlichen Phasen amorph (a-Si:H), mikrokrystallin ($\mu\text{-Si:H}$) und kristallin (c-Si). [38]

net. Hydrogenisiertes amorphes Silizium wird daher mit der Abkürzung a-Si:H gekennzeichnet. Staebler und Wronski entdeckten zudem, dass mit der Zeit eine lichtinduzierte Zunahme der Defektdichte von a-Si:H auftreten kann, weshalb dieses Materialverhalten auch als Staebler-Wronski-Effekt (SWE) bezeichnet wird [35]. Dieser wird häufig mit dem Aufbrechen der kovalenten Si-H-Bindungen erklärt [36] und hat entsprechend Konsequenzen auf die Transport- und Rekombinationseigenschaften des amorphen Materials [37].

Aufgrund der fehlenden atomaren Fernordnung der Siliziumatome ist der Impulsraum in amorphen Materialien nicht wie in einer Kristallstruktur definierbar und gegenüber kristallinem Silizium, welches einen indirekten Halbleitercharakter aufweist, besitzt a-Si:H einen direkten Halbleitercharakter. Dies spiegelt sich vor allem im erhöhten Absorptionskoeffizienten im sichtbaren Wellenlängenbereich des Lichts wider (Abbildung 4).

Da auch die Bandausläufer optische Übergänge erlauben, muss bei a-Si:H zwischen der optischen und elektrischen Bandlücke unterschieden werden, deren Unterschied im Bereich von 0.1 eV bis 0.2 eV liegt [39]. Die experimentelle Bestimmung der elektrischen Bandlücke - auch Mobilitätsbandlücke genannt - ist jedoch nicht trivial. Sie definiert den Abstand der ausgedehnten Zustände im Valenz- und Leitungsband, in denen sich die Löcher und Elektronen mit einer gewissen Mobilität frei im amorphen Material bewegen können. Ladungsträger, die Zustände

der Bandausläufer besetzen, sind aufgrund der lokalen Energiefluktuation des Bandschemas (Abbildung 3) lokal gebunden und können sich somit nicht frei im Materialsystem bewegen. Für die elektrische Simulation ist die Mobilitätsbandlücke entscheidend, da diese als direkter Eingangsparameter in die Simulation einfließt.

2.2 Eigenschaften von mikrokristallinem Silizium

Auch mikrokristallines Silizium ($\mu\text{c-Si}$) kann wie amorphes Silizium mit Hilfe der PECVD-Technik hergestellt werden und besteht aus einer Mischphase von amorphem und kristallinem Silizium [40-42]. Aus diesem Grund liegt der Absorptionskoeffizient für Photonenenergien größer 1.7 eV zwischen den beiden Materialien a-Si:H und c-Si (Abbildung 4). Für kleinere Photonenenergien hingegen sind die Absorptionseigenschaften von $\mu\text{c-Si}$ nahezu mit denen von kristallinem Silizium identisch, da für diesen Bereich hauptsächlich das in der Mischphase enthaltene kristalline Silizium mit einer Bandlücke von etwa 1.1 eV absorbiert. Durch eine Variation des Mischungsverhältnisses der Prozessgase Silan (SiH_4) und Wasserstoff (H_2) kann die Struktur der $\mu\text{c-Si}$ -Schichten zwischen rein amorph und nahezu vollständig kristallin verändert werden [40]. Allerdings ist dabei zu beachten, dass größere Kristallvolumen aus vielen kleineren Kristallen mit unterschiedlichen Gitterorientierungen bestehen und sich dementsprechend Korngrenzen innerhalb der größeren kristallinen Anteile ausbilden (Abbildung 5). Die kleineren Kristalle können dabei eine Ausdehnung von wenigen Nanometern bis mehreren hundert Nanometern besitzen [43].

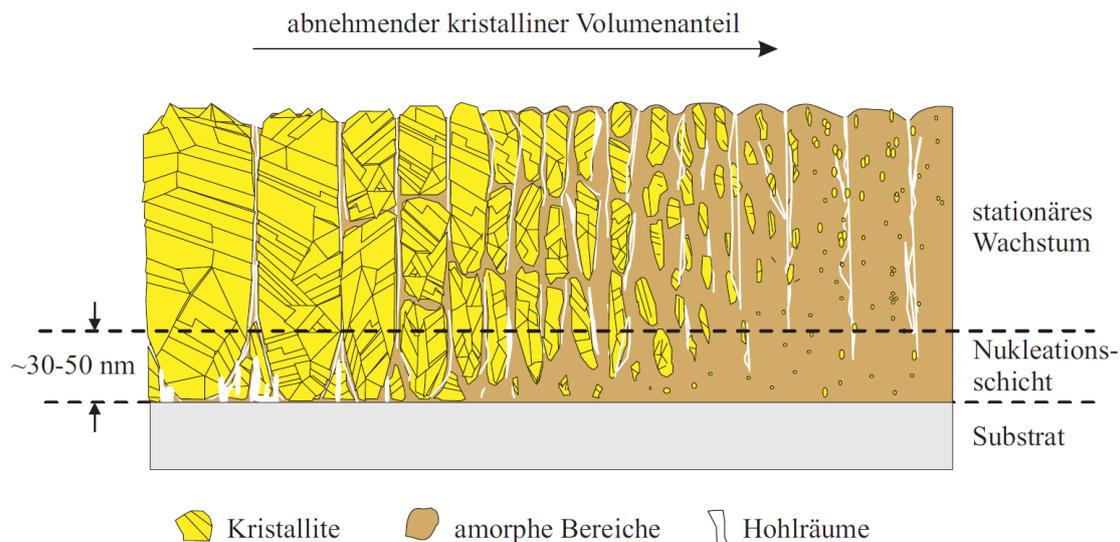


Abbildung 5: Schematische Darstellung der Schichtmorphologie von mikrokristallinem Silizium mit unterschiedlich kristallinen Volumenanteilen. [38]

Wie auch bei amorphem Silizium können in mikrokristallinen Schichten aufgrund der fehlenden Fernordnung der Siliziumatome offene Bindungen entstehen. Eine Absättigung mit Hilfe der Hydrogenisierung ist hier ebenfalls möglich, was mit der Schreibweise $\mu\text{c-Si:H}$ verdeutlicht wird. Wie aus der Publikation von Meier et al. [44] hervorgeht, tritt für $\mu\text{c-Si:H}$ Solarzellen keine nennenswerte lichtinduzierte Alterung auf. Somit bleiben die Wirkungsgrade der hergestellten Solarzellen über einen langen Zeitraum nahezu konstant.

Um mikrokristallines Silizium simulativ zu beschreiben, wird in dieser Arbeit allerdings die Morphologie, und die damit verbundenen Variationen der photoelektrischen Eigenschaften, nicht explizit in der Modellierung berücksichtigt. Die einzelnen $\mu\text{c-Si:H}$ Schichten werden als effektives Medium behandelt, so dass optischen und elektrischen Eingangsparameter für die Simulation innerhalb der Schichtregion als konstant angenommen werden.

2.3 Untersuchte Solarzellenstrukturen

Solarzellen aus amorphem Silizium können nicht wie kristalline Solarzellen mit Hilfe eines normalen pn-Übergangs hergestellt werden. Dies hat folgende Gründe [32]:

1. Dotierungen führen zu Störstellen im a-Si:H Material und zu verminderten Ladungsträgermobilitäten, was zu einer erhöhten Rekombinationsrate führt.
2. Die Dotiereffizienz von a-Si:H mit beispielsweise Bor- (p-Dotierung) oder Phosphoratomen (n-Dotierung) ist im Vergleich zu der von c-Si verhältnismäßig schlecht. Dadurch wird das Fermi-niveau bei hohen Dotierungen nicht bis an die Mobilitätsbandkanten verschoben und die interne Bandverbiegung, die zur Ladungsträgerdrift nötig ist, fällt geringer aus.
3. In einer kristallinen pn-Typ-Solarzelle erhält man die Ladungsträgeransammlung an den Kontakten durch Diffusion der Minoritätsladungsträger innerhalb der p- und n-Schichten zum pn-Übergang. Allerdings sind die Diffusionslängen der Minoritätsladungsträger in kristallinen Siliziumwafern mit über $200\ \mu\text{m}$ ausreichend groß gegenüber den kleinen Diffusionslängen von etwa $0.1\ \mu\text{m}$ in amorphem Silizium. Es ist daher sehr ineffektiv, photogenerierte Ladungsträgerpaare in einem einfachen pn-System aus amorphem Silizium zu trennen.

Aufgrund dieser drei Gesichtspunkte wird bei a-Si:H Solarzellen zwischen den p- und n-dotierten Bereichen eine intrinsische Schicht eingefügt, in welcher der Hauptanteil einfallender Photonen absorbiert wird. Die typischen schematischen Schichtstapel von a-Si:H Solarzellen in

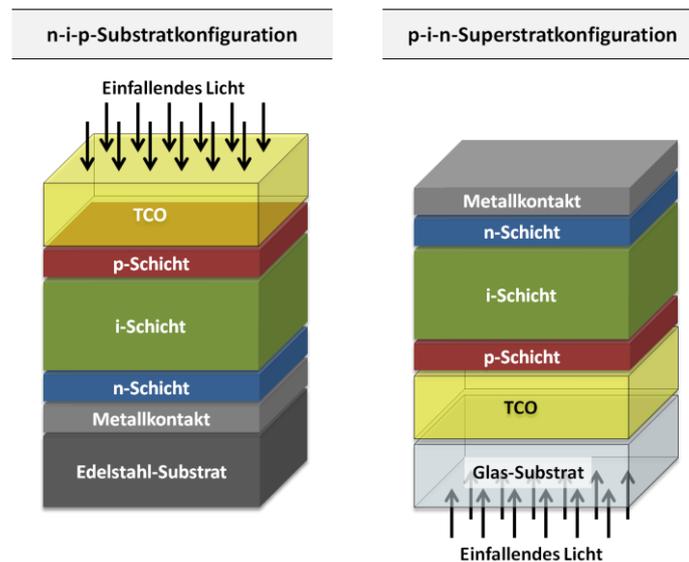


Abbildung 6: Schichtfolgen von a-Si:H Solarzellen in der n-i-p (links) und p-i-n Konfiguration (rechts).

der n-i-p oder p-i-n Konfiguration sind in Abbildung 6 zu sehen. Wird das Licht durch das lichtdurchlässige Glassubstrat in die Solarzelle eingekoppelt, so bezeichnet man dies auch als Superstratkonfiguration. Verwendet man hingegen lichtundurchlässige Substratmaterialien, durch die das Licht nicht in die Halbleitermaterialien eingekoppelt werden kann, so findet sich oft die Bezeichnung Substratkonfiguration in der Literatur wieder. Auf die beiden unterschiedlichen Konfigurationen wird im Folgenden noch näher eingegangen. Die Schichtdicken für dotierte Schichten liegen typischerweise im Bereich 5 - 30 nm, für die intrinsische a-Si:H Schicht bis zu ca. 400 nm. Auch für $\mu\text{c-Si:H}$ Solarzellen können diese Arten von Schichtabfolgen verwendet werden, allerdings werden für effiziente Solarzellen aufgrund des geringeren Absorptionskoeffizienten von $\mu\text{c-Si:H}$ Absorberschichtdicken im Bereich von 1 bis 3 μm benötigt.

Da die verwendeten Halbleiterschichten relativ dünn sind, müssen diese auf ein entsprechendes Trägermaterial aufgebracht werden. Der Vorteil der PECVD-Technik zur a-Si:H und $\mu\text{c-Si:H}$ Abscheidung ist die relativ geringe Prozessierungstemperatur von ca. 200 °C. Daher kann als Trägermaterial Glas verwendet werden, welches eine hohe Transparenz über einen weiten Spektralbereich aufweist. Jedoch ist Glas ein Isolator, besitzt somit eine niedrige elektrische Leitfähigkeit und kann die in den Halbleiterschichten erzeugten Ladungsträger nicht zu den äußeren elektrischen Kontakten abführen. Es muss demzufolge eine transparente, aber dennoch elektrisch leitfähige Schicht aufgebracht werden, welche die Vorderseitenkontaktierung der Solarzelle realisiert. Zu diesem Zweck können verschiedene transparente und elektrisch leitfähige Oxide (TCO) wie z.B. aluminiumdotiertes Zinkoxid ($\text{ZnO}_2:\text{Al}$) zum Einsatz kommen, die

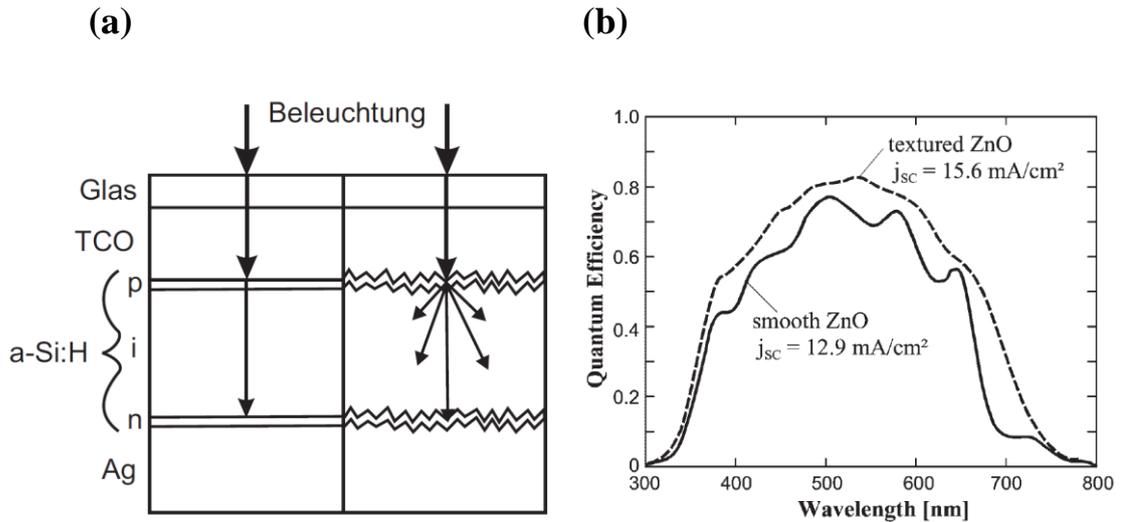


Abbildung 7: **(a)** Skizze zur Motivation der diffusen Streuung an rauen Grenzflächen. [45] **(b)** Externe Quanteneffizienz zweier p-i-n Solarzellen (a-Si:H) mit gleichen Abscheideparametern des PECVD-Prozesses auf glatter und texturierter ZnO-Oberfläche.[32]

u.a. durch Sputtern, LPCVD (low pressure chemical vapor deposition) oder APCVD (atmospheric pressure chemical vapor deposition) auf das Glassubstrat aufgebracht werden.

Da bei der Verwendung von Glas/TCO-Substraten meist mit der p-Schichtabscheidung begonnen wird, auf dieser die i-Schicht und zuletzt die n-Schicht abgeschieden wird, bezeichnet man diese Schichtsequenz üblicherweise als p-i-n Konfiguration. Um die Solarzelle an der Rückseite flächig zu kontaktieren, wird meist mit einem Verdampfungs- oder Sputterprozess eine mehrere 100 nm dicke Metallschicht aus z.B. Aluminium oder Silber aufgebracht.

Eine verbesserte Lichtabsorption in den Halbleiterschichten kann durch diffuse Lichtstreuung an internen Grenzflächen erreicht werden. Hierfür muss die TCO-Schicht eine gewisse Rauigkeit aufweisen (Abbildung 7a), deren Oberflächenprofil an die darauffolgenden abgeschiedenen Halbleiterschichten weitergegeben wird. Die Auswirkungen der Rauigkeit von ZnO-Schichten verdeutlichen die externen Quanteneffizienzen (EQE) zweier p-i-n Solarzellen aus amorphem Silizium in Abbildung 7b, deren Herstellungsparameter identisch sind [32]. Die EQE ist dabei das wellenlängenabhängige Verhältnis der Anzahl der extrahierten Ladungsträger zur Anzahl der einfallenden Photonen auf die Solarzelle. Bei Solarzellen mit glatten Grenzflächen sind die Interferenzeffekte durch den wellenförmigen Verlauf der EQE klar zu erkennen. Für Solarzellen mit rauen Grenzflächen lassen sich hingegen ein Ansteigen der EQE im gesamten Absorptionsbereich und ein Abklingen der destruktiven Interferenzen feststellen.

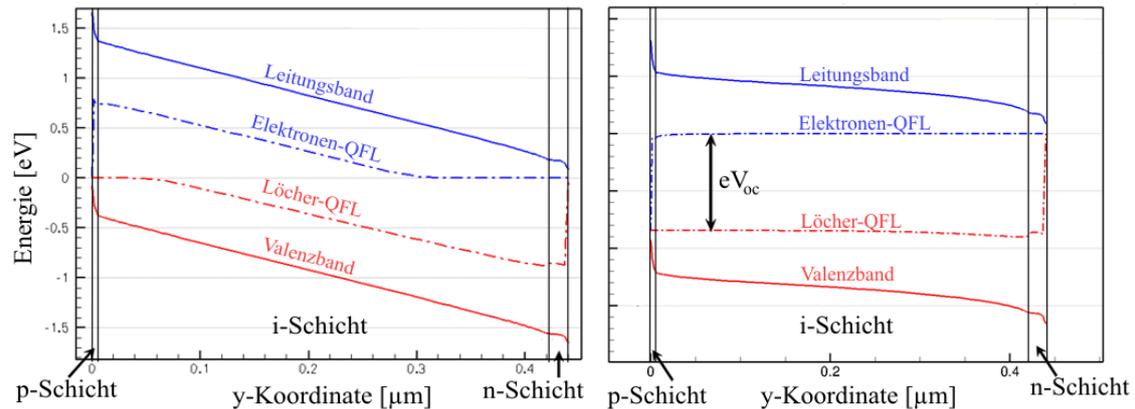


Abbildung 8: Simulierter Bandverlauf einer beleuchteten a-Si:H p-i-n Solarzelle im Kurzschlussfall (links) und mit offenen Kontakten (rechts).

In dem bisher vorgestellten Schichtstapel wird das Licht durch das Substrat in die Solarzelle eingekoppelt, was auch als Superstratkonfiguration bekannt ist. Aufgrund der relativ niedrigen Herstellungstemperaturen von ca. 200 °C ist es ebenfalls möglich die Halbleiterschichten auf Materialien wie rostfreiem Stahl oder hitzebeständigen Plastikfolien aufzubringen. Allerdings sind diese entweder lichtundurchlässig oder werden durch UV-Strahlung langfristig zerstört. Um diese Materialien dennoch als flexibles Trägermaterial nutzen zu können, wird oft die Reihenfolge des Schichtstapels umgekehrt, sodass die fertige Solarzelle nicht mehr durch das Substrat beleuchtet werden muss. Dementsprechend wird zunächst die dünne Metallschicht auf das Substrat aufgebracht, worauf die Abscheidung der n-, i- und p-Schicht mittels des PECVD-Prozesses folgt. Da nun zuerst mit der n-Schichtabscheidung begonnen wird, bezeichnet man dies auch als n-i-p Konfiguration. Zum Schluss wird auf die p-Schicht die transparente und elektrisch leitende Elektrodenschicht TCO aufgebracht, durch die das Licht in die Halbleiterschichten eindringen kann. Die sogenannte Substratkonfiguration unterscheidet sich von der Superstratkonfiguration also darin, ob das Licht durch das Substrat in die Solarzelle eingekoppelt wird oder nicht. In beiden Fällen ändert sich die eigentliche Stapelfolge der Solarzelle bezüglich der Lichteinstrahlung nicht, da stets die TCO/p-Schichten der Lichtquelle zugewandt sind. Dies ist beabsichtigt, da die Mobilität der Löcher etwas geringer ist als die Elektronenmobilität. Wird die Solarzelle mit Licht beleuchtet, so entsteht in der i-Schicht an der lichtzugewandten Seite eine etwas erhöhte Generationsrate als an der lichtabgewandten Seite. Der Großteil der Löcher, die im Vergleich zu den Elektronen eine niedrigere Mobilität aufweisen, muss somit nicht durch die gesamte i-Schicht zur p-Schicht wandern, wodurch deren Weg für mögliche Rekombinationsprozesse reduziert werden soll.

Abbildung 8 zeigt die Bandverläufe einer a-Si:H Solarzelle in der p-i-n Konfiguration für die Fälle von offenen und geschlossenen Kontakten. Durch die beiden dotierten Halbleiterschichten

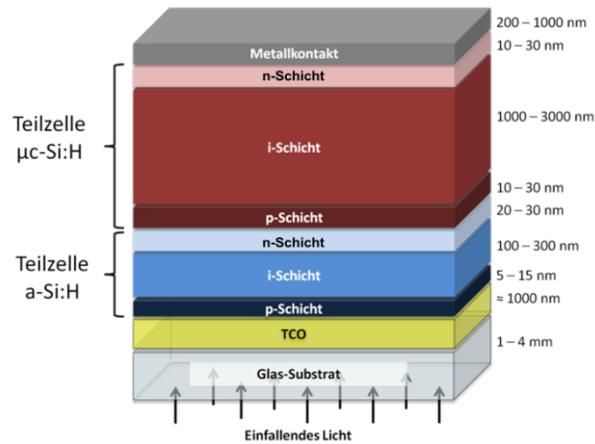


Abbildung 9: Schematischer Aufbau einer mikromorphen Tandemsolarzelle in Superstrat-Konfiguration mit den typischen Dicken der Einzelschichten.

p und n entsteht durch Drift- und Diffusionsströme innerhalb der intrinsischen Absorberschicht die typische Bandverbiegung im quasistationären Kurzschlussfall (geschlossene Kontakte) und somit ein Potentialgradient, durch den die photogenerierten Elektronen bzw. Löcher zu der n- bzw. p-Schicht driften. Es handelt sich daher um ein sogenanntes Driftdevice, bei dem man die relativ kleine Diffusionslänge von ~ 150 nm mit der relativ großen Driftlänge von ~ 1 μ m der Ladungsträger im Kurzschlussfall umgeht. Dadurch kann der Großteil der photogenerierten Ladungsträger in der Absorberschicht die entsprechenden Kontakte erreichen. Eine genauere theoretische Betrachtung bezüglich der physikalischen Hintergründe zu Bandverbiegungen in Halbleitermaterialien und Drift-/Diffusionsprozessen der Ladungsträger findet man in vielen Fachbüchern, auf die an dieser Stelle verwiesen wird (z.B. Ref. [46]).

Um den Spektralbereich von a-Si:H Solarzellen zu erweitern, der im Bereich von 350 nm bis 750 nm liegt (Abbildung 7), kann das Konzept einer Stapel- oder Tandemzelle verfolgt werden. Siliziumbasierte Stapelzellen bestehen aus zwei oder mehr übereinander abgeschiedenen Einzelzellen aus Halbleitern mit unterschiedlichen Absorptionsbereichen. Da μ c-Si:H gegenüber a-Si:H mit einer Bandlücke von etwa 1.8 eV eine niedrigere Bandlücke von etwa 1.1 eV besitzt, ergeben diese beiden Materialien zusammen eine optimale Bandlückenkombination für effiziente Tandemstrukturen [47]. Der schematische Aufbau dieser Stapelzelle ist in Abbildung 9 aufgeführt und wird häufig als mikromorphe Tandemsolarzelle bezeichnet. Die beiden Teil- oder Subzellen sind somit in Reihe geschaltet, und es müssen für eine gute Solarzelleneffizienz am inneren pn-Übergang die Löcher aus der μ c-Si:H(p)-Schicht mit den Elektronen der a-Si:H(n)-Schicht rekombinieren. Die Reihenschaltung der beiden p-i-n Strukturen erfordert zur Optimierung des Wirkungsgrades eine Stromanpassung, da der Gesamtstrom durch die Subzelle limitiert wird, welche weniger Strom liefert [48].

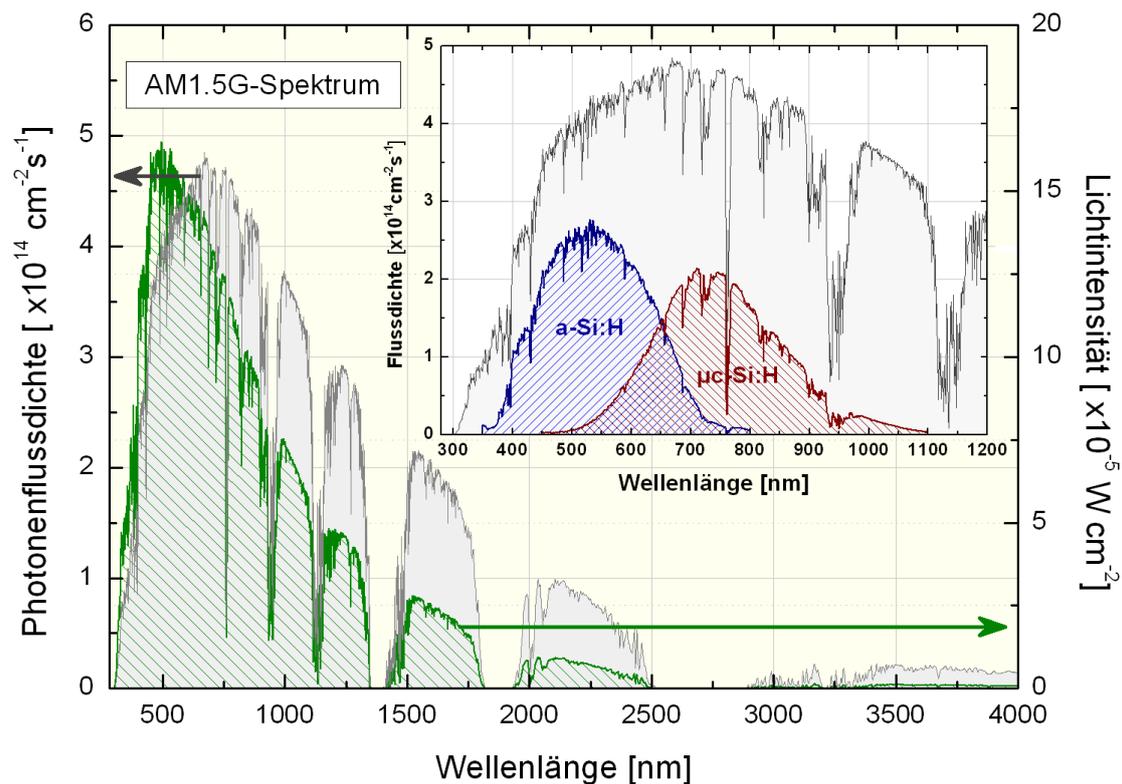


Abbildung 10: Wellenlängenabhängige Photonenflussdichte bzw. Lichtintensität des Standardpektrums AM1.5G. Die Graph-in-Graph-Darstellung zeigt die Flussdichte des AM1.5G-Spektrums (grau) und die Anteile der beiden Subzellen aus a-Si:H (blau) und $\mu\text{c-Si:H}$ (grün) einer mikromorphen Tandemsolarzelle, die in elektrischen Strom umgewandelt werden. Die Flussdichten der beiden Subzellen wurden mit Hilfe von experimentell bestimmten EQEs berechnet.

Besitzen beide Teilzellen dieselbe Bandlücke, ist bei einer optimalen Stromanpassung der Strom im Vergleich zu einer Einfachzelle in etwa halbiert und die Spannung in etwa verdoppelt. Dies ist nur eine grobe Abschätzung, da auch die Schichtdicke Einfluss auf V_{oc} hat und unterschiedliche Schichtdicken für die Stromanpassung nötig wären. Werden hingegen verschiedene Materialien, wie hier a-Si:H oder $\mu\text{c-Si:H}$, für die zwei Subzellen verwendet, kann dadurch der Absorptionsbereich der gesamten Solarzelle gegenüber amorphen Einzelzellen vergrößert werden. Dies veranschaulicht Abbildung 10, bei der zum einen die wellenlängenabhängige Photonenflussdichte des Standardspektrums AM1.5G [49], zum anderen die aus experimentell bestimmten Quantenausbeuten berechneten tatsächlich zum Strom beitragenden spektralen Anteile der beiden Teilzellen aufgezeigt sind. Die Teilzelle aus a-Si:H absorbiert somit vermehrt den blauen Anteil des Sonnenspektrums, die Teilzelle aus $\mu\text{c-Si:H}$ vermehrt den roten Anteil.

Abbildung 11 zeigt den inneren energetischen Bandverlauf einer Tandemstruktur und schematisch die Bewegungsrichtungen der photogenerierten Ladungsträger im Kurzschlussfall. Es wird deutlich, dass eine Ansammlung von Elektronen in der n-Schicht der a-Si:H Zelle sowie

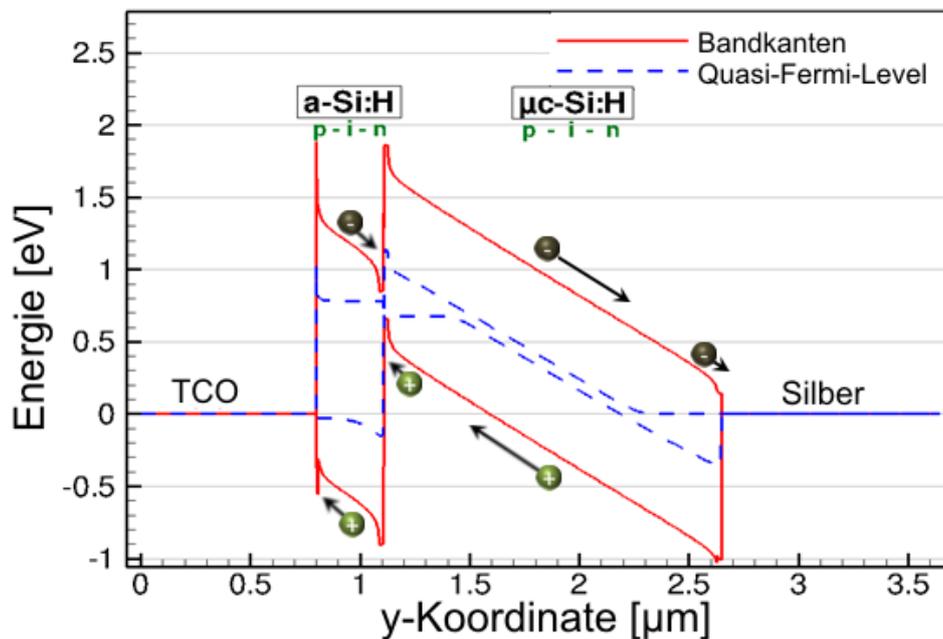


Abbildung 11: Simulierter Bandverlauf einer beleuchteten mikromorphen Tandemsolarzelle im Kurzschlussfall. Zudem sind schematisch die Bewegungsrichtungen der photogenerierten Ladungsträger in den ausgedehnten Zuständen von Leitungs- und Valenzband dargestellt.

von Löchern in der p-Schicht der $\mu\text{c-Si:H}$ Zelle stattfindet. Würden diese Ladungsträger an dieser Stelle eine hohe Lebensdauer besitzen, da sie keinen Rekombinationspartner finden, wäre ein Aufbau einer Raumladungszone die Folge. Hieraus ergäbe sich einerseits eine Beeinflussung des internen Bandverlaufs wie auch andererseits ein höherer Diffusionsstrom, der dem Driftstrom entgegenwirken würde. Für eine gut funktionierende Tandemsolarzelle müssen daher die Elektronen und Löcher am internen pn-Übergang miteinander rekombinieren. Dies kann in Silizium-Dünnschicht solarzellen mit einem ausreichend hohen Dotierungsgrad der dotierten Schichten am Übergang der beiden Teilzellen erreicht werden. Allerdings ist die physikalische Erklärung dazu nicht eindeutig. Häufig wird das Phänomen damit erklärt, dass die Ladungsträger in die angrenzende Schicht oder auf die Grenzfläche tunneln und Energieniveaus besetzen [50-52]. Dadurch ist eine gemeinsame räumliche Aufenthaltswahrscheinlichkeit von Elektronen und Löchern gegeben, wodurch sich eine Rekombination je nach Einfangquerschnitt und Störstellenkonzentration ergibt. Der Rekombinationsvorgang an der internen pn-Schicht kann auch durch das Einbringen einer zusätzlichen Leiterschicht erfolgen, die als eigentliche Rekombinationsschicht dient. Hierzu kann eine TCO- oder Edelmetall-Schicht von nur wenigen Nanometern verwendet werden, wodurch einfallende Photonen allerdings wieder teilweise reflektiert werden und nicht in die dahinterliegende Teilzelle gelangen können. Dies gilt es bei der Stromanpassung beider Subzellen zu berücksichtigen.

3 Numerische Simulationen mit Sentaurus TCAD

Die in dieser Dissertation behandelten numerischen Simulationen von Silizium-Dünnschichtsolarzellen wurden mit der Software Sentaurus TCAD von der Firma Synopsys[®] durchgeführt. Dieses modulare Softwarepaket wird bereits seit längerem in der Halbleiterindustrie genutzt, um Bauelemente wie z.B. CMOS-Bauteile zu simulieren. Allerdings basiert die Modellierung integrierter Schaltungen auf dem Drift-Diffusions-Modell (siehe Abschnitt 2.3) und kann somit auch auf die halbleiterbasierte Solarzellentechnologie angewendet werden. Dieses Kapitel soll dem Leser eine Übersicht zur optischen und elektrischen Modellierung von Silizium-Dünnschichtsolarzellen geben. Desweiteren werden im Abschnitt 3.3 die elektrischen a-Si:H Materialparameter und deren Wertebereiche ausgiebig diskutiert, die zum einem mit Hilfe von experimentellen Depositionsdaten und Charakterisierungsmethoden, und zum anderen aus Publikationen ermittelt wurden.

3.1 Aufbau von Simulationsdomänen

Für die Simulation einer Solarzelle wird zuerst eine virtuelle Struktur in der Software erstellt, die dem zu untersuchenden Bauelement entspricht. Die sogenannte Simulationsdomäne besteht wie experimentell hergestellte Solarzellen aus einer Schichtfolge unterschiedlicher Materialien, welche bestimmte physikalische Eigenschaften besitzen. Abbildung 12 zeigt das Beispiel einer einfachen Simulationsdomäne, die in diesem Fall eine a-Si:H p-i-n Solarzelle mit glatten Grenzflächen beschreibt. Zu beachten ist, dass aus Gründen der Übersichtlichkeit das bis zu mehrere Millimeter dicke Glas-Substrat nicht dargestellt ist. Wird im Falle der optischen Modellierung die veränderte Lichteinkopplung aufgrund der zusätzlichen Glasschicht durch eine verminderte Lichtintensität berücksichtigt, kann das Substrat für die weitere Simulation vernachlässigt werden. Für die elektrische Simulation kann meist vollständig darauf verzichtet werden, da bei einem Glassubstrat das Material elektrisch isolierend wirkt und für den Stromtransport keinen nennenswerten Beitrag liefert. Neben den Materialschichten mit ihren unter-

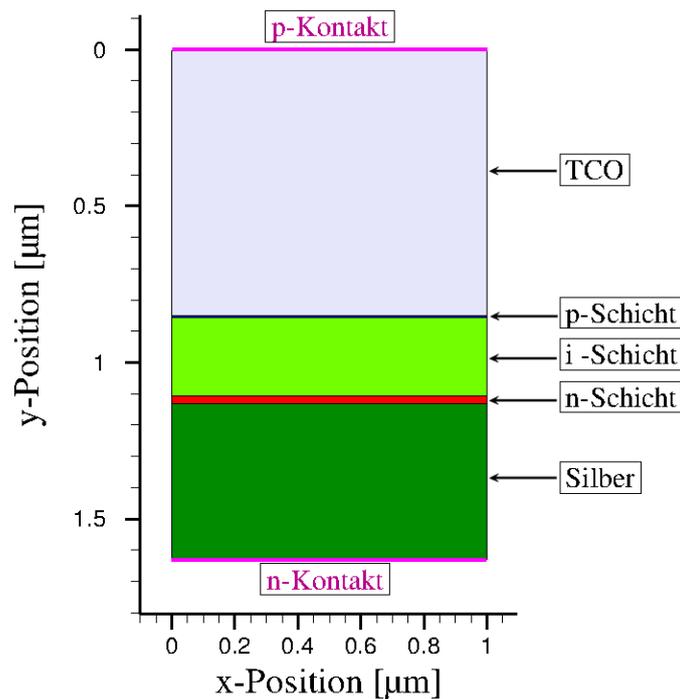


Abbildung 12: Eine im Simulationsprogramm Sentaurus TCAD generierte Schichtfolge einer a-Si:H p-i-n Solarzelle mit glatten Grenzflächen.

schiedlichen Dicken sind zudem die idealen elektrischen Kontakte (magenta Linien) an der Ober- und Unterseite des Schichtstapels in Abbildung 12 zu erkennen. Sie werden für die elektrische Simulation benötigt, da an diesen Kontakten eine externe Spannung angelegt werden kann und so der Stromfluss durch diese bestimmt wird.

Nach dem Erstellen der Simulationsdomäne wird das gesamte Schichtsystem in viele kleine Regionen unterteilt (Diskretisierung), indem ein Gitter (mesh) über das Bauelement gelegt wird. Somit können mit Hilfe eines numerischen Näherungsverfahrens alle physikalischen Gleichungen, die für bestimmte Regionen im virtuellen Bauelement durch das Anwenden physikalischer Modelle hinterlegt werden, für alle finiten Elemente in Abhängigkeit der angrenzenden Nachbarelemente einzeln gelöst werden. Bei der Erstellung des Gitternetzes muss insbesondere an den Grenzflächen zweier Schichten darauf geachtet werden, dass die Einteilung nicht zu grob gewählt wird, um die Konvergenz des numerischen Näherungsverfahrens zu gewährleisten. Desweiteren würde ein zu grobes Gitternetz in diesen Regionen zu einer ungenügenden Simulationsgenauigkeit führen, z.B. bei der Berechnung der Rekombinationsrate, was sich folglich in den Simulationsergebnissen widerspiegeln würde. Je feiner ein Gitternetz über die Probe gelegt wird, desto höher ist allerdings auch der Rechenaufwand. Es gilt daher einen sinnvollen Kompromiss zwischen Genauigkeit und Rechenzeit zu finden. Ein Beispiel für die hier gewählten

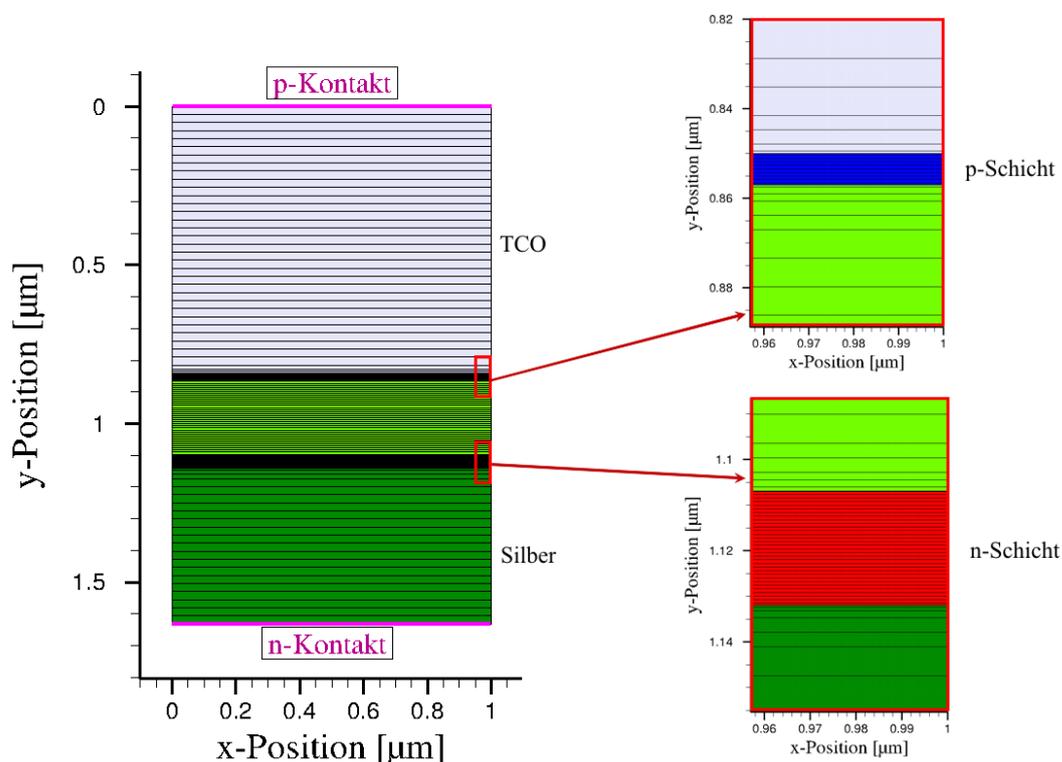


Abbildung 13: Solarzellenstruktur wie in Abbildung 12 nach der Diskretisierung. Insbesondere bei Schichtübergängen muss das Gitternetz entsprechend verfeinert werden (siehe Vergrößerungsausschnitte rechts), um die nötige Konvergenz und Genauigkeit der numerischen Berechnung zu gewährleisten.

Größen der Gitternetze ist in Abbildung 13 dargestellt. Sie liegen in den dotierten Schichten in der Größenordnung von einem bis mehreren Nanometern, in der i-Schicht wurden bis zu 30 nm als maximaler Gitterpunkt Abstand gewählt. Diese Werte wurden empirisch ermittelt, so dass bei einem noch feineren Gitter keine nennenswerte Veränderung des berechneten Stroms mehr zu erkennen war. Es sei an dieser Stelle angemerkt, dass insbesondere die p-Schicht sehr fein (≈ 1 nm) unterteilt werden sollte, da deren Gitterpunkt Abstand den größten Einfluss auf die berechnete IV-Kennlinie hat. Desweiteren hat sich herausgestellt, dass das Einfügen eines Gradienten bezüglich der Gitterpunkt Abstände an den p/i- und i/n-Grenzschichten zu guten Ergebnissen im Hinblick auf die Rechengenauigkeit führt. Weiterhin ist in Abbildung 13 erkennbar, dass eine laterale Unterteilung der virtuellen Probe hier nicht stattfindet. Da bei glatten Grenzflächen die Generationsrate und alle weiteren elektrischen Eigenschaften unabhängig von der x-Position sind, ist dieses Vorgehen auch gerechtfertigt. Eine weitere Unterteilung würde nicht zu veränderten vertikalen Stromflüssen führen. In dieser Dissertation wird daher diese Art von Simulationsdomäne als eindimensionaler Fall behandelt, auch wenn die Domäne streng genommen eine gewisse Ausdehnung in x-Richtung besitzt.

3.2 Optische Modelle und Materialparameter

Im nächsten Schritt wird die optische Generationsrate innerhalb der Solarzelle simuliert, d.h. die orts aufgelöste Anzahl der durch Photonenabsorption generierten Ladungsträger. Die Generationsrate ist ein wichtiger Übergabeparameter an die darauffolgende elektrische Simulation, die den Transport der Ladungsträger in der Solarzelle berechnet. Auf dieser elektrischen Modellierung liegt der Fokus dieser Arbeit, wobei auf die optische Modellierung nicht verzichtet werden kann, da insbesondere das elektrische Verhalten der Solarzelle unter Beleuchtung untersucht wird. Das Programm Sentauros TCAD stellt mehrere Lösungsmethoden zur Berechnung der Optik zur Auswahl, die im Folgenden kurz erläutert werden.

Für die Modellierung von glatten und planparallelen Schichten kann die Transfer-Matrix-Methode (TMM) verwendet werden, welche die Ausbreitung der elektrischen Feldkomponente des einfallenden Lichts im Schichtsystem mittels charakteristischer Schicht- und Grenzflächenmatrizen berechnet. Durch diese Modellierung können Interferenzeffekte berücksichtigt werden, da das Licht als elektromagnetische Welle beschrieben wird und so die Phaseninformation des Lichts in die Berechnung mit einfließt [45].

Schichtsysteme mit rauen TCO-Oberflächen entsprechen dem derzeitigen Standard von kommerziell erhältlichen Silizium-Dünnschicht-Solarzellen, benötigen aber eine komplexere simulative Beschreibung aufgrund der diffusen Lichtstreuung an Grenzflächen. In der Herstellung wird die auf das Glassubstrat gesputterten ZnO-Schicht durch Ätzprozesse mit Salzsäure (HCl) strukturiert, um das einfallende Licht zu streuen und somit den Lichtweg durch die Halbleiterschichten zu verlängern bzw. einzufangen (light trapping). Bei einigen TCO-Herstellungsprozessen (LPCVD, APCVD) kann auf diesen Ätzschritt allerdings auch verzichtet werden, da die TCO-Oberfläche bereits nach der Herstellung eine natürliche Rauigkeit aufweist. Um die Generationsraten in den Halbleiterschichten mit rauen Grenzflächen zu berechnen, kann die Methode des Raytracers herangezogen werden. Diese Methode basiert auf einem Strahlverfolgungsalgorithmus, bei dem der Weg eines virtuellen Lichtstrahls berechnet und dieser entsprechend der Absorptionskoeffizienten im durchlaufenen Material absorbiert wird. Trifft der Lichtstrahl mit einem gewissen Einfallswinkel auf eine Grenzfläche von zwei unterschiedlichen Materialien, wird der Ausfallswinkel gemäß der geometrischen Optik unter Einbeziehung der Brechungsindizes berechnet (Snelliussches Brechungsgesetz). Allerdings können mit der Raytracer-Methode keine Interferenzeffekte simuliert werden, da die Phaseninformation des einfallenden Lichts nicht berücksichtigt wird.

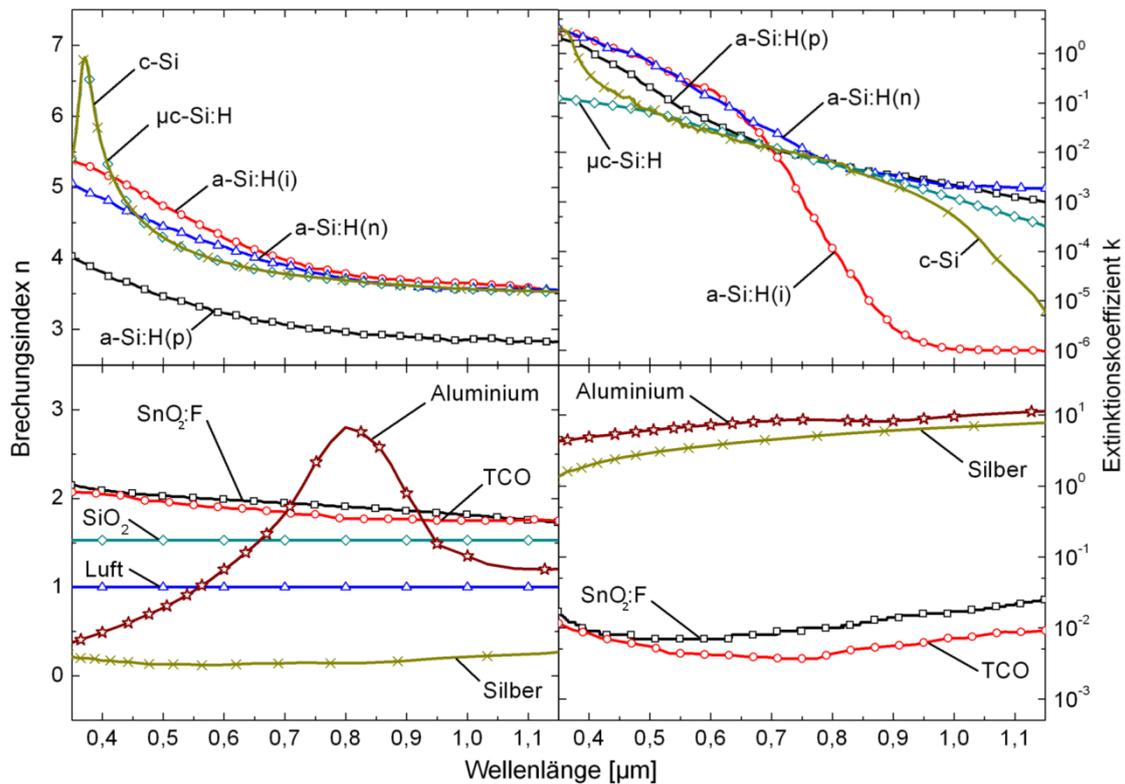


Abbildung 14: Für diese Dissertation verwendeten Brechungsindizes n und Extinktionskoeffizienten k der verschiedenen Materialien (aus Ref. [54, 55] und Materialdatenbank Sentaurus TCAD).

Sollen bei Simulationsdomänen mit rauen Grenzflächen Interferenzeffekte des einfallenden Lichts in den Halbleiterschichten berücksichtigt werden, so bietet sich die von der Software bereitgestellte FDTD-Methode an. Hierbei wird das einfallende Licht als elektromagnetische Welle behandelt und durch das Lösen der Maxwell-Gleichungen in der Zeitdomäne die ortsaufgelöste Lichtintensität in der Solarzelle für einzelne Wellenlängen berechnet. Durch die simulierte lokale Verteilung der Lichtintensität kann im darauffolgenden Schritt die Generationsrate anhand der Absorptionskoeffizienten berechnet werden [53]. Allerdings ist diese Methode rechenintensiv und daher sehr zeitaufwendig, weshalb in dieser Arbeit zumeist die wesentlich schnellere Raytracer-Methode verwendet wird. Ein Vergleich dieser zwei Methoden wird in Kapitel 7 aufgezeigt. Eine weitere Möglichkeit raue Grenzflächen und Interferenzeffekte an 1D-Simulationsdomänen zu berücksichtigen ist die Kombination der TMM- und Raytracer-Methoden, wie in der Masterarbeit von Cordula Walder ausführlich dargestellt [45].

Für alle optischen Simulationsverfahren werden Brechungsindizes n und Extinktionskoeffizienten k der verschiedenen Materialregionen als Eingangsparameter verwendet. Die für

diese Dissertation eingesetzten nk-Daten zeigt Abbildung 14. Silber, Aluminium und c-Si stammen aus der Datenbank von Sentaurus TCAD, für a-Si:H und TCO ($\text{SnO}_2\text{:F}$) aus Ref. [54]. Für SiO_2 und Luft wurden typische n-Daten angenommen und deren k-Daten für den gesamten Wellenlängenbereich gleich null gesetzt, so dass keine Photonenabsorption in diesen Materialien simuliert wird. Das in Abbildung 14 aufgeführte $\text{SnO}_2\text{:F}$ wurden mit Hilfe von Transmissions-/Reflexionsmessungen am Forschungsinstitut bestimmt und ist vergleichbar mit den Literaturwerten des bereits aufgeführten TCOs. Da im Ergebnissteil dieser Arbeit Simulationen mit den zwei unterschiedlichen nk-Daten des $\text{SnO}_2\text{:F}$ -Materials durchgeführt wurden, werden diese hier gesondert aufgeführt und entsprechend gekennzeichnet. Die n-Werte für $\mu\text{c-Si:H}$ als effektives Medium sind denen von c-Si gleichgesetzt und k-Werte aus dem in der Doktorarbeit von T. Repmann aufgeführten Absorptionskoeffizienten α umgerechnet (Abb. 2.3 in Ref. [55]).

3.3 Elektrische Materialparameter

Sind mit Hilfe der optischen Simulation die lokalen Generationsraten in der Simulationsdomäne berechnet worden, so werden die Ergebnisse für die finiten Raumvolumina in den jeweiligen Gitterpunkten abgespeichert. Die im Anschluss durchgeführte elektrische Simulation nutzt diese Ergebnisse als Eingangsparameter für die Simulation der Hellkennlinien in den entsprechenden Halbleitergleichungen. Auf diese wird im Folgenden nur kurz eingegangen, da sich ihre Herleitungen und physikalischen Interpretationen einschlägig in der Fachliteratur wiederfinden (z.B. Ref. [33, 56]). Eine sehr gute Übersicht zur Anwendung der Halbleitergleichungen in numerischen Simulationsprogrammen ist in den Dissertationen von J. Willemsen [57] und B. Pieters [58] zu finden, die sich mit der eindimensionalen photoelektrischen Modellierung von amorphen und mikrokristallinen Silizium-Dünnschichtsolarzellen befassen. Wie auch in der mehrdimensionalen Simulation mit Sentaurus TCAD wurden für die beiden Arbeiten die Poisson- und die Kontinuitätsgleichungen für Elektronen und Löcher in den Solarzellenstrukturen mittels der verwendeten Software numerisch gelöst. Die daraus berechneten Drift- und Diffusionsströme der Ladungsträger bei unterschiedlichen angelegten äußeren Spannungen ergeben somit spannungsabhängige Gesamtströme, die zur charakteristischen Strom-Spannung-Kennlinie (IV-Kennlinie) von Solarzellen führen. Dabei ist außerdem zu beachten, dass in die Kontinuitätsgleichungen neben der optischen Generationsrate auch die Rekombinationsraten der Ladungsträger mit eingehen. Letztere werden über die Shockley-Read-Hall-Rekombination [59] berechnet, die einen gewissen Einfangquerschnitt der Störstellen für die Ladungsträger als Eingangsparameter voraussetzt.

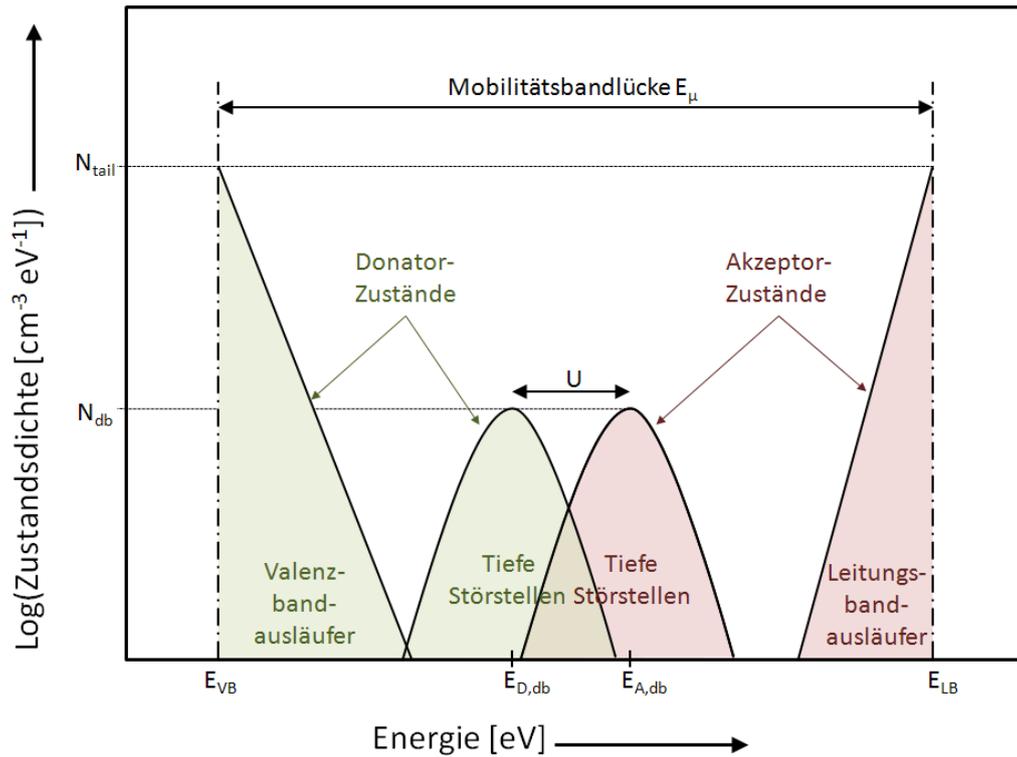


Abbildung 15: Schematische Defektdichteverteilung von amorphem Silizium.

Abbildung 15 zeigt die schematische Darstellung der Defektdichteverteilung von amorphem Silizium und Tabelle 1 die entsprechenden Wertebereiche der elektrischen Parameter für dotiertes und intrinsisches a-Si:H, wie sie in dieser Dissertation Verwendung finden. Diese lehnen sich u.a. an denen aus der Doktorarbeit von J. A. Willemen [57] an. Zusätzlich wurden weitere Publikationen [1, 11, 28, 50, 51, 58, 60-66] für die Erstellung der Parametersätze von a-Si:H herangezogen, deren Wertebereiche im Folgenden nochmals genauer diskutiert werden.

Tabelle 1: Für diese Dissertation verwendeten Wertebereiche elektrischer Eingangsparameter für dotiertes und intrinsisches a-Si:H.

| Parameter | Formelzeichen | Einheit | p-Schicht | i-Schicht | n-Schicht |
|---|------------------------------|---------------------------------|-----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|
| Dotierkonzentration | n_{dot} | cm^{-3} | $3 \cdot 10^{18}$ | 10^5 | $3.6 \cdot 10^{18}$ |
| | | | - | - | - |
| Elektronenmobilität | μ_n | cm^2/Vs | $1.5 \cdot 10^{20}$ | 10^{13} | 10^{19} |
| | | | 2 - 5 | 10 - 30 | 2 - 5 |
| Löchermobilität | μ_p | cm^2/Vs | 0.4 - 1 | 2 - 6 | 0.4 - 1 |
| Elektronenaffinität | χ_0 | eV | 3.9 | 3.9 | 3.9 |
| Mobilitätsbandlücke | E_{gap} | eV | 1.75 - 1.85 | 1.75 - 1.85 | 1.75 - 1.85 |
| effektive Zustandsdichte (Valenz- & Leitungsband) | N_V, N_L | cm^{-3} | $2.5 \cdot 10^{20}$ | $2.5 \cdot 10^{20}$ | $2.5 \cdot 10^{20}$ |
| | | | - | - | - |
| Tail-Zustandsdichte an Bandkante | N_{tail} | $\text{eV}^{-1} \text{cm}^{-3}$ | $3.2 \cdot 10^{20}$ | $3.2 \cdot 10^{20}$ | $3.2 \cdot 10^{20}$ |
| | | | $7 \cdot 10^{20} - 10^{22}$ | $7 \cdot 10^{20} - 10^{22}$ | $7 \cdot 10^{20} - 10^{22}$ |
| Urbachenergie Valenzband-Tail | $E_{V,0}$ | eV | 0.100 | 0.047 | 0.100 |
| | | | - | - | - |
| Urbachenergie Leitungsband-Tail | $E_{L,0}$ | eV | 0.167 | 0.050 | 0.167 |
| | | | - | - | - |
| Einfangquerschnitt von geladenen Tail-Zuständen | $\sigma_{\text{tail}}^{+/-}$ | cm^2 | 0.050 | 0.025 | 0.050 |
| | | | - | - | - |
| Einfangquerschnitt von ungeladenen Tail-Zuständen | σ_{tail}^0 | cm^2 | $10^{-14} - 10^{-16}$ | $10^{-14} - 10^{-16}$ | $10^{-14} - 10^{-16}$ |
| | | | $5 \cdot 10^{-15}$ | $5 \cdot 10^{-15}$ | $5 \cdot 10^{-15}$ |
| Dangling-bond-Zustandsdichte am Gaußmaximum | N_{db} | $\text{eV}^{-1} \text{cm}^{-3}$ | - | - | - |
| | | | 10^{18} | 10^{16} | 10^{18} |
| Standardabweichung des DB-Gaußprofils | σ_{db} | eV | $4 \cdot 10^{18}$ | 10^{17} | $4 \cdot 10^{18}$ |
| | | | 0.2 - 0.3 | 0.2 - 0.3 | 0.2 - 0.3 |
| Korrelationsenergie der beiden Gaußprofile | U | eV | 0.2 - 0.3 | 0.2 - 0.3 | 0.2 - 0.3 |
| Einfangquerschnitt von geladenen DB-Zuständen | $\sigma_{\text{db}}^{+/-}$ | cm^2 | 10^{-14} | 10^{-14} | 10^{-14} |
| Einfangquerschnitt von ungeladenen DB-Zuständen | σ_{db}^0 | cm^2 | $10^{-15} - 10^{-16}$ | $10^{-15} - 10^{-16}$ | $10^{-15} - 10^{-16}$ |

3.3.1 Dotierkonzentration

Um eine Dotierung der Halbleiterschichten zu erreichen, wird in das Prozessgas, bestehend aus Silan (SiH_4) und Wasserstoff (H_2), zusätzlich Phosphin (PH_3) oder Diboran (B_2H_6) einge-
leitet. Tabelle 2 zeigt typische Gasflusskonzentrationen eines Abscheideprozesses von a-Si:H
p-i-n Solarzellen, wie sie am Forschungsinstitut verwendet werden. Mit Hilfe dieser Werte kön-
nen die Dotierkonzentrationen für die elektrische Simulation abgeschätzt werden, die als ent-
scheidender Eingangsparameter für die elektrische Simulation verwendet werden.

Die Gasphasenkonzentration C_{gas} des Dotiergases PH_3 wird über die folgende Beziehung be-
stimmt:

$$C_{\text{gas}} = \frac{C_{\text{dot}} \cdot [\text{PH}_3]}{[\text{SiH}_4] + [\text{H}_2] + [\text{PH}_3]}$$

Dabei ist C_{dot} die dreiprozentige Verdünnung des Dotiergases in Wasserstoff, $[\text{SiH}_4]$ der
Silanfluss in sccm, H_2 der Wasserstofffluss in sccm und $[\text{PH}_3]$ der Phosphinfluss in sccm. Die
Umrechnung der Gasphasenkonzentration von B_2H_6 verläuft analog, deren Verdünnung C_{dot}
ebenfalls 3% für die in dieser Arbeit aufgeführten dotierten Schichten entspricht. Mit Hilfe der
detaillierten Untersuchung zur Dotierung von amorphem Silizium von Stutzmann et al. [67]
lässt sich die Gasphasenkonzentration durch die Beziehung

$$C_{\text{fest}} \propto C_{\text{gas}}^s$$

in die Festphasenkonzentration C_{fest} umrechnen, die den Anteil des Dotierstoffes in der abge-
schiedenen Siliziumschicht wiedergibt. Wie weiterhin in der Veröffentlichung gezeigt, kann für
den Exponenten s der Wert 0.8 eingesetzt werden, falls die Dotiergase Phosphin bzw. Diboran
zur Dotierung von a-Si:H verwendet werden. Da für die elektrische Simulation mit Sentaurus
TCAD die effektive Dotierkonzentration pro Volumen als Eingangsparameter verwendet wird,
muss C_{fest} noch in die Anzahl der Dotieratome pro Kubikzentimeter umgerechnet werden. Die
Anzahl der Siliziumatome pro Kubikzentimeter eines Silizium-Kristalls kann mit Hilfe der
Avogadro-Konstante $N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ und des molaren Volumens von kristallinem Silizi-
um ($M_{\text{c-Si}} = 12 \text{ cm}^3/\text{mol}$) auf etwa $N_{\text{c-Si}} = 5 \cdot 10^{22}/\text{cm}^3$ berechnet werden. Geht man davon aus,
dass in der amorphen Phase des Siliziums ähnlich viele Atome/ cm^3 enthalten sind, lässt sich die
absolute Festphasenkonzentration pro Volumen n_{fest} durch die Multiplikation von C_{fest} und $N_{\text{c-Si}}$
abschätzen. Weiterhin kann nach Stutzmann et al. bei den in Tabelle 2 errechneten Festphasen-
konzentrationen eine Dotiereffizienz von etwa 1% angenommen werden. Dies führt zu den auf-

gelisteten effektiven Dotierkonzentrationen n_{eff} , die als Anhaltspunkt für die elektrische Modellierung dienen.

Tabelle 2: Verwendete Gasflusskonzentrationen von Silan (SiH_4), Wasserstoff (H_2), Phosphin (PH_3) und Diboran (B_2H_6) und daraus errechnete Gasphasenkonzentrationen C_{gas} , Festphasenkonzentrationen C_{fest} und Dotieratomkonzentration in der Festphase n_{fest} für die abgeschiedenen p- und n-Schichten. Die effektive Dotierkonzentration n_{eff} kann als Eingangsparameter in die Simulationssoftware verwendet werden.

| | SiH_4 [sccm] | H_2 [sccm] | PH_3 [sccm] | B_2H_6 [sccm] | C_{gas} | C_{fest} | n_{fest} [cm^{-3}] | n_{eff} [cm^{-3}] |
|------------------|--------------------------|------------------------|-------------------------|----------------------------------|---------------------|---------------------|---|--|
| p-Schicht | 40 | 80 | -- | 32 | $6.3 \cdot 10^{-3}$ | $1.7 \cdot 10^{-2}$ | $8.5 \cdot 10^{20}$ | $8.5 \cdot 10^{18}$ |
| n-Schicht | 40 | 200 | 25 | -- | $2.8 \cdot 10^{-3}$ | $9.1 \cdot 10^{-3}$ | $4.6 \cdot 10^{20}$ | $4.6 \cdot 10^{18}$ |

3.3.2 Ladungsträgermobilität

Für intrinsisches a-Si:H wird in dieser Arbeit teilweise eine etwas höhere Ladungsträgermobilität von Elektronen μ_e bzw. Löcher μ_h angenommen als in den Publikationen [11, 57, 68] zur numerischen Dünnschichtsolarzellen-Modellierung ($2 \text{ cm}^2/\text{Vs} < \mu_e < 10 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ bzw. $0,27 \text{ cm}^2/\text{Vs} < \mu_h < 2 \text{ cm}^2/\text{Vs}$), da auf diese Weise die beste Übereinstimmung von Hell- und Dunkelkennlinien für eine Schichtdickenvariation von a-Si:H p-i-n Einzelzellen erhalten werden kann. Durch den Vergleich der oben aufgeführten Publikationen zur Simulation von amorphem Siliziumsolarzellen, wird ein Verhältnis von Elektronenmobilität zu Löchermobilität von 5 zu 1 stets beibehalten. Es ist schwierig den genauen Wert der freien Ladungsträger in den ausgedehnten Zuständen zu bestimmen, da meist eine Driftmobilität der freien Ladungsträger experimentell ermittelt wird. Die Driftmobilität ist jedoch nicht der Mobilität in den ausgedehnten Zuständen gleichzusetzen, da die Ladungsträger auf dem Weg durch die Halbleiterschicht in Störstellen gefangen werden können, in denen ihre Mobilität gleich null ist. Durch anschließende Emission aus den Störstellen beträgt ihre Mobilität wieder die der ausgedehnten Zustände. Da der Vorgang „Ladungsträgerdrift-Störstelleneinfang-Störstellenemission“ auf dem Weg durch die Halbleiterschicht mehrmals stattfinden kann, ist die tatsächliche Driftmobilität geringer als die Ladungsträgermobilität in den ausgedehnten Zuständen. Um die in der Simulation gewählte Ladungsträgermobilität in Verbindung mit den gewählten Störstellenparametern zu überprüfen, empfiehlt es sich daher experimentelle Hell- und Dunkel-Leitfähigkeitsmessungen an Einzelschichten zu simulieren, um das System zu kalibrieren. Allerdings ist diese Simulation auch abhängig von der Lage des Fermi-niveaus, das durch die Dotierkonzentration beeinflusst werden kann. Selbst im Falle von intrinsischem a-Si:H kann eine leichte n-Dotierung beobachtet

werden [32], die auf eine leichte Verunreinigung durch Sauerstoff zurückgeführt wird. Es ist deshalb nicht eindeutig, welchen genauen Wert für die Ladungsträgermobilität der ausgedehnten Zustände in die Simulation eingesetzt werden soll. Durch die experimentell gestützte Abschätzung nach R.A. Street [69] kann aber die Größenordnung von $10 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ als verlässlicher Eingangsparameter für die Simulation angenommen werden.

3.3.3 Elektronenaffinität

Die Elektronenaffinität wird für diese Dissertation als konstant 3.9 eV angenommen und ist vergleichbar mit den Werten von 3.95 bis 4.0 eV aus der Publikation von Ding et al. [11].

3.3.4 Mobilitätsbandlücke

Die Mobilitätsbandlücke kann nicht ohne weiteres experimentell bestimmt werden, da sie sich von der aus Transmissions- und Reflexionsmessungen bestimmten optischen Bandlücke unterscheidet. Letztere kann durch die Auswertung nach Tauc bestimmen werden [70-72], allerdings gehen bei der optischen Bandlücke auch elektronische Übergänge der Bandausläufer in die Messung mit ein. Der Energieunterschied von elektronischer zu optischer Bandlücke liegt für amorphes Silizium im Bereich von $0.05 - 0.2 \text{ eV}$. Allerdings ist dieser nicht eindeutig aus bisherigen Publikationen zu entnehmen. Eine Abschätzung dazu wurde von Jackson et al. [73] veröffentlicht. Um die Mobilitätsbandlücke für die elektrische Simulation abzuschätzen, wurde am Forschungsinstitut Einzelschichten von n-dotierten, p-dotierten und intrinsischen a-Si:H auf Glas abgeschieden und die Tauc-Bandlücke mit Hilfe von Transmissions- und Reflexionsmessungen bestimmt. Diese ergaben für n-dotiertes und intrinsisches a-Si:H eine Tauc-Lücke von 1.8 eV , für p-dotiertes a-Si:H eine niedrigere Tauc-Lücke von 1.7 eV . Der Grund für die Verkleinerung der optischen Bandlücke bei Bor-Dotierung konnte bis jetzt nicht eindeutig geklärt werden, allerdings fließt diese Beobachtung teilweise mit in die Simulationen ein. Daher wird in Kapitel 4 die Bandlücke von p-dotiertem a-Si:H 0.1 eV geringer gewählt, als von n-dotiertem und intrinsischem a-Si:H. Es sei angemerkt, dass in den meisten Publikationen (z.B. Ref. [11]) zur elektrischen Modellierung dieser Trend entgegengesetzt behandelt wird, da wahrscheinlich von einer Bandlückenaufweitung durch das Einbringen von Kohlenstoff in der p-Schicht ausgegangen wird. Da in dieser Dissertation die Simulationen mit Proben ohne Bandlückenaufweitung verglichen werden, wird dieser entgegengesetzte Trend allerdings nicht übernommen. Auf die experimentell bestimmten optischen Tauc-Bandlücken wird ein konstanter Wert von 0.05 eV addiert, um die Mobilitätsbandlücke zu erhalten. Dieser Wert ist vergleichbar mit weiteren Publikationen [60].

3.3.5 Effektive Zustandsdichte

Die effektive Zustandsdichte von amorphem Silizium ist ebenfalls nicht ohne weiteres und eindeutig experimentell zu bestimmen, da aufgrund der Bandausläufer (band tails) keine scharfen Bandkanten vorhanden sind. Da für das in der Simulationssoftware verwendete Drift-Diffusions-Modell eine scharfe Grenze zwischen ausgedehnten Zuständen und Tail-Zuständen gefordert wird, muss diese definiert werden. In der Modellvorstellung bedeutet dies, dass bei einer Zustandsdichte größer des Schwellenwertes alle Ladungsträger frei sind und unterhalb dieses Wertes in den Zuständen gefangen werden. Definiert man diesen Wert, so liegen die Energien der Leitungsbandkante E_L und der Valenzbandkante E_V fest und es kann die Näherung der effektiven Zustandsdichte durch die Boltzman-Näherung durchgeführt werden. Dies wird im Folgenden am Beispiel der Elektronen im Leitungsband gezeigt, die Berechnung der Löcher im Valenzband erfolgt analog. [56]

$$\text{Elektronendichte im Leitungsband:} \quad n = \int_{E_L}^{\infty} D(E) \cdot f(E, E_F, T) \cdot dE$$

$$\text{Boltzman-Näherung:} \quad f(E, E_F, T) = \exp\left(-\frac{E-E_F}{kT}\right)$$

$$\Rightarrow n = N_{eff} \cdot \exp\left(\frac{E_F - E_L}{kT}\right)$$

Dies vereinfacht die Berechnung der freien Elektronen im Leitungsband erheblich, da nicht mehr die gesamte Zustandsdichteverteilung $D(E)$ bekannt sein und über diese integriert werden muss. Die effektive Zustandsdichte N_{eff} kann somit als konstanter Materialparameter angesehen werden, falls sich $D(E)$ für unterschiedliche Abscheideparameter von a-Si:H nicht ändert. Im Rahmen dieser Dissertation werden allerdings die Einflüsse der Abscheidung von a-Si:H und der möglichen Veränderung von $D(E)$ nicht näher untersucht. Deshalb wird für den Wert der effektiven Zustandsdichte auf die Publikation [57] zurückgegriffen. Diese wird für dotiertes sowie undotiertes Silizium als konstant angenommen und nicht weiter verändert.

3.3.6 Bandausläufer

Wie bereits gezeigt, wurden durch die Einführung der effektiven Zustandsdichte scharfe Begrenzungen der Bandkanten gefordert. An diese knüpfen die Bandausläufer (band tails) an und reichen exponentiell abfallend in die Bandlücke hinein (Abbildung 15). Dieses Auslaufen wird durch die charakteristische Urbachenergie $E_{V,0}$ bzw. $E_{L,0}$ für den Valenz- bzw. Leitungsbandausläufer angegeben und kann experimentell mit Hilfe der CPM-Methode (constant photocurrent measurement) bestimmt werden. Dabei ist zu beachten, dass nur die mit Elektronen besetzten Zustände detektiert werden können, was dem Bandausläufer des Valenzbandes entspricht. Für

den Leitungsbandausläufer wird meist eine halb so große Urbachenergie angenommen [34, 53]. R.A. Street begründet diesen Unterschied mit den unterschiedlichen Bindungsarten der Valenz- und Leitungsbandzustände [34]. So setzen sich die Leitungsbandkanten aus s-ähnlichen Zuständen zusammen, deren kugelförmige Symmetrien keinen so starken Einfluss auf unregelmäßige Bindungswinkel haben. Die Valenzbandkanten setzen sich hingegen aus p-ähnlichen Bindungszuständen zusammen, weshalb Bindungswinkelunregelmäßigkeiten einen größeren Einfluss haben. Durch die geforderte scharfe Begrenzung von ausgedehnten Zuständen, die durch die effektive Zustandsdichte beschrieben werden, und den Zuständen der Bandausläufer, muss die Tail-Zustandsdichte an der Bandkante N_{tail} definiert werden. Diese Definition wird aus den vorher aufgeführten Publikationen zur 1D-Modellierung übernommen und auf den Bereich $7 \cdot 10^{20} - 10^{22} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$ festgesetzt. Allerdings ist dem Autor bewusst, dass auch noch bei niedrigeren Zustandsdichten ein elektrischer Transport stattfinden kann, der meist durch den Hopping-Transport beschrieben wird [34]. Diese Dissertation baut allerdings auf bisherigen Veröffentlichungen zur elektrischen Modellierung auf und hat ihren Fokus auf mehrdimensionalen Simulationsdomänen gerichtet. Daher wurde dieser elektrische Transport außer Acht gelassen und nicht näher untersucht. Die Rekombination über die Zustände der Bandausläufer wird mit Hilfe der Shockley-Read-Hall-Rekombination beschrieben (s.o.), allerdings können die Zustände nur einen geladenen und einen neutralen (ungeladenen) Zustand einnehmen. Im Falle des Valenzbandausläufers ist der geladene Zustand positiv, im Falle des Leitungsbandausläufers ist dieser hingegen negativ. Mit Hilfe der Einfangsquerschnitte als Eingangsparameter lassen sich die Besetzungs-/Emissions- und Rekombinationswahrscheinlichkeit berechnen. Die Einfangsquerschnitte $\sigma_{tail}^{+/-}$ und σ_{tail}^0 der geladenen und ungeladenen Bandausläuferzustände dienen in der simulativen Umsetzung als Fit-Parameter für Hell- und Dunkelkennlinien. Allerdings wird für deren Bestimmung darauf geachtet, dass die Hell- und Dunkelkennlinien von experimentellen a-Si:H p-i-n Solarzellen unterschiedlicher Schichtdicken mit konstant gehaltenen Einfangsquerschnitten simuliert werden können. Ergebnisse dazu findet man in Kapitel 4. Es wird aufgrund der Coulomb-Anziehung zwischen geladenem Zustand und freiem Ladungsträger mit entgegengesetzter Ladung angenommen, dass geladene Zustände einen größeren Einfangsquerschnitt besitzen als ungeladene Zustände [58, 74]. Desweiteren wurde, wie in der Dissertation von B. Pieters [58], ein festes Verhältnis von 10:1 für das Verhältnis von geladenen zu ungeladenen Einfangsquerschnitten gewählt. Dieser Faktor von 10 wird zudem in weiteren Publikation [57, 75, 76] für die Störstellen-Modellierung von a-Si:H und $\mu\text{-Si:H}$ Materialien verwendet.

3.3.7 Tiefe Störstellen

Tiefe Störstellen, hervorgerufen durch ungesättigte Siliziumbindungen, werden in dieser Dissertation mit Hilfe von zwei Gaußverteilungen symmetrisch zur Bandlücke beschrieben, deren Lage um die Korrelationsenergie U verschieden ist. K. Winer diskutiert in Ref. [77] ausführlich die Lage und Korrelation der Defektdichteverteilungen in dotiertem und intrinsischem a-Si:H. Dadurch haben diese ihren Ursprung in der Transformation von schwachen Bindungen (weak bonds) zu zwei ungesättigten Bindungen (dangling bonds) [78], bei der die Lage des Fermilevels eine entscheidende Rolle spielt. Allerdings weist das Fermilevel in der intrinsischen Schicht einer Silizium-Dünnschichtsolarzelle aufgrund der internen Bandverbiegung eine lokale Abhängigkeit auf (vgl. Abbildung 8). Dies wird im sogenannten defect-pool-model [64, 79] berücksichtigt, welches in Sentauros TCAD allerdings nicht ohne weiteres implementiert werden kann. Die Verteilungsfunktionen der Energieniveaus von tiefen Störstellen werden daher mit dem etwas vereinfachten, aber dennoch häufig angewandten Modell zweier Gaußverteilungen beschrieben [28, 80, 81], deren Lagen innerhalb der Bandlücke stets konstant bleiben. Dabei kann die eine Störstellenart entweder neutral oder positiv geladen (Donator), die andere Störstellenart neutral oder negativ geladen (Akzeptor) sein (Abbildung 15). Hier unterscheiden sich also die Verteilungsfunktionen der Störstellenniveaus von den oben genannten Veröffentlichungen, wobei der Berechnungsalgorithmus der Rekombinationsrate bestehen bleibt. Dieser ist z.B. in der Dissertation von J. Willemen ausführlich dargestellt [57].

Die absolute Störstellendichte kann mit Hilfe von CPM-Messungen bestimmt werden und entspricht den Flächen unter den beiden Gaußverteilungsfunktionen. Durch die verwendete Standardabweichung σ_{db} der Gaußverteilungen von 0.2 eV, welche an die Veröffentlichung [76] angelehnt ist, können somit die integralen Flächen bestimmt und mit experimentell bestimmten Störstellendichten (z.B. Ref. [34]) verglichen werden. Wie auch bei den Einfangquerschnitten der Bandausläufer dienen die geladenen und ungeladenen Einfangquerschnitte $\sigma_{db}^{+/-}$ und σ_{db}^0 der tiefen Störstellen als Fitparameter, wobei deren Verhältnis zueinander ebenfalls dem Wert 10 entspricht. Mit den empirisch ermittelten Werten in Tabelle 1 kann eine sehr gute Übereinstimmung von experimentellen und simulierten Hell- und Dunkelkennlinien erreicht werden, was im folgenden Kapitel 4 gezeigt wird.

3.3.8 Serien- und Parallelwiderstand

Um den charakteristischen Serienwiderstand in der Simulation abbilden zu können, dessen Ursprung weitestgehend im elektrischen Schichtwiderstand des TCOs liegt, kann in Sentauros TCAD der sogenannte „mixed-mode“ verwendet werden. Dieser basiert auf dem SPICE-Modell

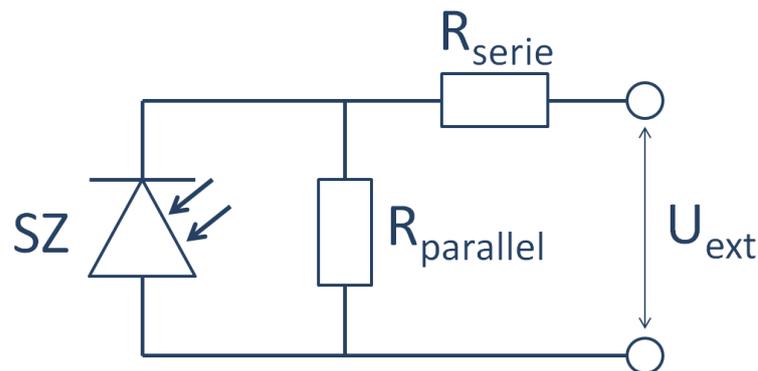


Abbildung 16: Ersatzschaltbild des simulierten Stromkreises. Die Simulationsdomäne der Solarzelle (SZ) ist mit ohmschen Serien- (R_{serie}) und Parallelwiderständen (R_{parallel}) virtuell verschaltet, um experimentelle IV-Messungen genauer abbilden zu können.

und erlaubt die Simulation eines Stromkreises, bei der neben der Solarzellenstruktur auch virtuelle Widerstände implementiert werden können [82]. Ein Ersatzschaltbild für den hier verwendeten virtuellen Stromkreis zeigt Abbildung 16.

Neben dem Serienwiderstand R_{serie} ist im Ersatzschaltbild weiterhin ein Parallelwiderstand R_{parallel} zu erkennen, dessen Ursprung sich mit dem Auftreten von Schichtinhomogenitäten und feinen Löchern in den abgeschiedenen Halbleiterschichten erklären lässt. Durch das Aufdampfen des Silber-Rückkontakts können diese Löcher mit Metall gefüllt werden, was eine direkte Kontaktierung von Vorder- und Rückelektrode zur Folge hat.

Aufgrund der Implementierung der virtuellen Widerstände können insbesondere IV-Dunkelkennlinien präziser abgebildet werden, da das 1D-Simulationsmodell der Solarzelle zum einen keine Inhomogenitäten bezüglich der Schichtdicke besitzt (Parallelwiderstand), und zum anderen der laterale Stromfluss in den Elektrodenschichten keinen Einfluss hat (Serienwiderstand). Allerdings können mit der TCAD-Software auch Simulationsdomänen von mehreren Millimetern Ausdehnung erstellt werden um z.B. monolithische Modulverschaltungen abzubilden. Da in diesem Fall der serielle Widerstand durch die tatsächliche Ausdehnung der Elektrodenschichten (TCO) wiedergegeben wird, muss dieser im Ersatzschaltbild bzw. im „mixed-mode“ nicht extra berücksichtigt werden.

4 Modell- und Parametervalidierung von a-Si:H p-i-n Solarzellen

Die elektrischen Parametersätze der verwendeten Materialien sind entscheidend für die Aussagekraft simulierter Strom-Spannungs-Kennlinien und EQE-Spektren von Silizium-Dünnschichtsolarzellen. In diesem Kapitel wird gezeigt, dass ein eindimensionales Standardmodell unter Verwendung eines einzigen optischen und elektrischen Parametersatzes amorphe Silizium-Dünnschichtsolarzellen mit variierenden Absorberschichtdicken simulativ beschreiben kann und wie sich reale Schichtinhomogenitäten in der Modellierung interpretieren und abbilden lassen.

4.1 Experiment

Um den in Tabelle 1 aufgeführten Parametersatz für a-Si:H Schichten in Dünnschichtsolarzellen zu verifizieren, werden Dunkel-, Hell- und EQE-Kennlinien von experimentell hergestellten p-i-n Solarzellen auf kommerziell erhältlichen Asahi-U Substraten mit 1D-Simulationsergebnissen verglichen, wobei ein Streualgorithmus des einfallenden Lichts aufgrund der rauen TCO-Oberfläche in der Simulation berücksichtigt wird [45]. Die abgedruckten Dünnschichtsolarzellen variieren in ihren intrinsischen Schichtdicken aufgrund unterschiedlicher Abscheidezeiten von 110 nm bis 420 nm. Damit kann gezeigt werden, dass die Verifizierung nicht nur für einen bestimmten Schichtstapel gültig ist. Die dotierten Schichtdicken hingegen sind konstant gehalten, so dass alle p-Schichten eine Dicke von ≈ 7 nm und alle n-Schichten eine Dicke von ≈ 25 nm besitzen.

4.2 Simulationsdetails

Für die elektrische Hellkennlinien-Simulation von Solarzellen ist die optische Modellierung der Generationsrate entscheidend, da diese als Eingangsparameter übergeben wird. Erst durch die möglichst exakte Berechnung der photogenerierten Ladungsträger innerhalb der Halbleiter-

schichten stimmt insbesondere die modellierte Kurzschlussstromdichte mit experimentell bestimmten Hellkennlinien überein. Doch auch die Leerlaufspannung und der Füllfaktor weisen Abhängigkeiten von der Generationsrate auf. Daher wird das in der Masterarbeit von Cordula Walder erstellte optische Modell, welches auf den Publikationen von Krc et al. [83] und somit auf einer Kombination von Transfer-Matrix- und Raytracer-Methode basiert, zur Überprüfung des verwendeten elektrischen Parametersatzes herangezogen. Die optischen Simulationsergebnisse und deren Berechnungen sind in der Masterarbeit [45] ausgiebig dargestellt und diskutiert, weshalb hier nicht näher darauf eingegangen wird. Lediglich die endgültigen Simulationsergebnisse der optischen EQE werden im Folgenden präsentiert und mit den elektrischen EQE-Kennlinien verglichen. Die optische EQE ist eine gängige Darstellung der optischen Simulationsergebnisse, bei der die berechneten photogenerierten Ladungsträger durch den Einfall von monochromatischem Licht über das Volumen der intrinsischen Schicht(en) summiert werden. Das Verhältnis der berechneten photogenerierten Ladungsträgeranzahl zur Zahl der einfallenden Photonen ist demnach die optische EQE. Allerdings werden Rekombinationseffekte in der intrinsischen Schicht nicht berücksichtigt, die nur durch eine elektrische Simulation bestimmt werden können und zur vergleichbaren experimentellen EQE führt.

Tabelle 3: Die für diesen Abschnitt 4 verwendeten elektrischen Parameter und Schichtdicken. Für Erklärung der Formelzeichen der einzelnen Parameter siehe Tabelle 1.

| Parameter | Einheit | a-Si:H(p) | a-Si:H(i) | a-Si:H(n) |
|------------------------------|---|---------------------|---------------------|---------------------|
| n_{dot} | $[\text{cm}^{-3}]$ | -variabel- | 10^{13} | $3.6 \cdot 10^{18}$ |
| χ_0 | [eV] | 3.9 | 3.9 | 3.9 |
| E_{gap} | [eV] | 1.75 | 1.85 | 1.85 |
| $N_{\text{V}}, N_{\text{L}}$ | $[\text{cm}^{-3}]$ | $3.2 \cdot 10^{20}$ | $3.2 \cdot 10^{20}$ | $3.2 \cdot 10^{20}$ |
| N_{db} | $[\text{eV}^{-1} \text{cm}^{-3}]$ | $4 \cdot 10^{18}$ | -variabel- | $4 \cdot 10^{18}$ |
| σ_{db} | [eV] | 0.2 | 0.2 | 0.2 |
| U | [eV] | 0.2 | 0.2 | 0.2 |
| $\sigma_{\text{db}}^{+/-}$ | $[\text{cm}^2]$ | 10^{-14} | 10^{-14} | 10^{-14} |
| σ_{db}^0 | $[\text{cm}^2]$ | 10^{-15} | 10^{-15} | 10^{-15} |
| N_{tail} | $[\text{eV}^{-1} \text{cm}^{-3}]$ | 10^{22} | 10^{22} | 10^{22} |
| $E_{\text{V},0}$ | [meV] | 100 | 47 | 100 |
| $E_{\text{L},0}$ | [meV] | 50 | 28 | 50 |
| $\sigma_{\text{tail}}^{+/-}$ | $[\text{cm}^2]$ | 10^{-15} | 10^{-15} | 10^{-15} |
| σ_{tail}^0 | $[\text{cm}^2]$ | 10^{-16} | 10^{-16} | 10^{-16} |
| μ_{e} | $[\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}]$ | 2 | -variabel- | 2 |
| μ_{h} | $[\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}]$ | 0.4 | -variabel- | 0.4 |
| Schichtdicke | [nm] | 7 | -variabel- | 25 |

Die verwendeten Simulationsdomänen stimmen mit der in Abbildung 12 gezeigten überein, wobei die intrinsische Schichtdicke entsprechend variiert. Die verwendeten Schichtdicken der dotierten Schichten sind in Tabelle 3 ersichtlich, in welcher zudem die für diesen Abschnitt verwendeten elektrischen Parameter aufgelistet sind. Variabel gehaltene Parameter, die zur Anpassung der Hell- und Dunkelkennlinien verändert werden, sind entsprechend gekennzeichnet.

4.3 Ergebnisse und Diskussion

Abbildung 17 zeigt die sehr gute Übereinstimmung der experimentellen und simulierten Dunkelkennlinien der Schichtdickenserie von a-Si:H Solarzellen, bei denen die intrinsische Schicht von 110 nm bis 420 nm variiert. Die virtuellen elektrischen Widerstände R_{serie} und R_{parallel} wurden soweit angepasst, bis eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Dunkelkennlinien erhalten werden konnte. Es ist festzuhalten, dass die weitreichenden Variationen der seriellen Widerstände von 1.7 bis 7.3 Ω und der parallelen Widerstände von 0.5 bis 21.9 M Ω keinem bestimmten Trend bezüglich der i-Schichtdicke folgen und können, wie in Kapitel 3.3.8 erwähnt, durch den Schichtwiderstand der TCOs (R_{serie}) bzw. feinen Löchern und Inhomogenitäten in der Halbleiterschicht (R_{parallel}) interpretiert werden. Diese Werte haben daher keinen Einfluss auf die verwendeten elektrischen Parametersätze. Allerdings ist der exponentielle Teil der Diodenkennlinie, der sich in der Lin-Log-Darstellung als Gerade darstellt, stark abhängig von den verwendeten Eingangsparametern. Wird eine Veränderung an diesen vorgenommen, so müssen auch die Auswirkungen auf die Hellkennlinie berücksichtigt werden. Um dies mit in die Kennlinienanpassung einzubeziehen, muss allerdings zunächst die berechnete optische Generationsrate validiert werden. Dies lässt sich am besten mit dem Vergleich der EQE-Spektren bewerkstelligen.

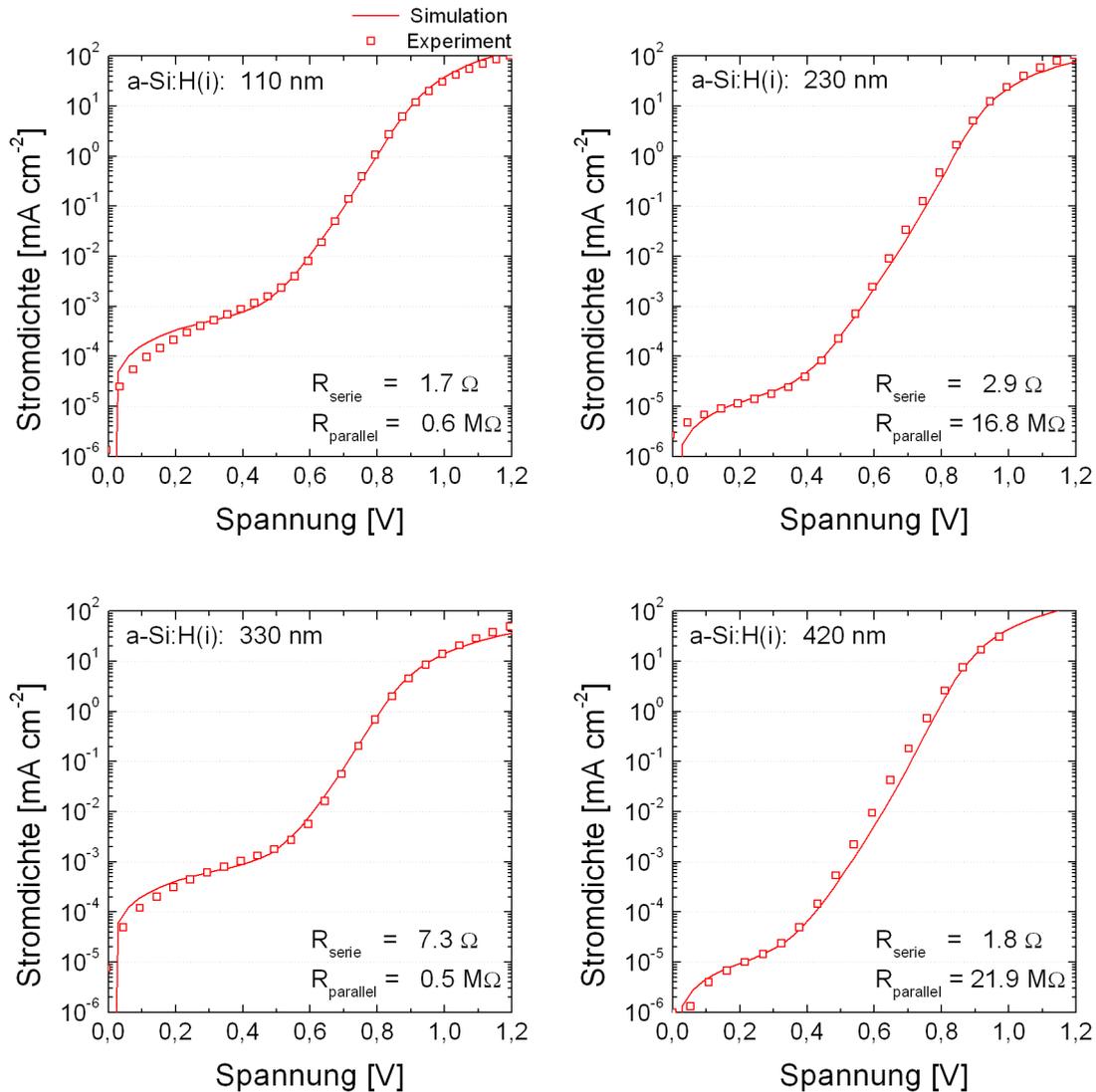


Abbildung 17: Simulierte (Linie) und experimentelle (Quadrate) Dunkelkennlinien von a-Si:H Solarzellen in der p-i-n Superstratkonfiguration mit unterschiedlichen intrinsischen Schichtdicken von 110 nm bis 420 nm und angepassten virtuellen Serien- und Parallelwiderständen (R_{serie} und R_{parallel}).

Abbildung 18 zeigt den Vergleich von experimentellen und simulierten EQE-Kennlinien. In der simulierten optischen EQE werden im Gegensatz zur simulierten elektrischen EQE die Rekombinationsverluste in der i-Schicht vernachlässigt und in den dotierten Schichten der Generationsrate gleichgesetzt. Dies bedeutet in der Kalkulation der optischen EQE, dass die Zahl der photogenerierten Ladungsträger lediglich im i-Schichtvolumen summiert werden und durch die Anzahl der eingestrahnten Photonen geteilt wird. Die photogenerierten Ladungsträger in den dotierten Schichten werden aufgrund der hohen Defektdichte vernachlässigt. Dass diese Vorgehensweise gerechtfertigt ist, zeigt der direkte Vergleich der elektrischen und optischen EQE-Kennlinien.

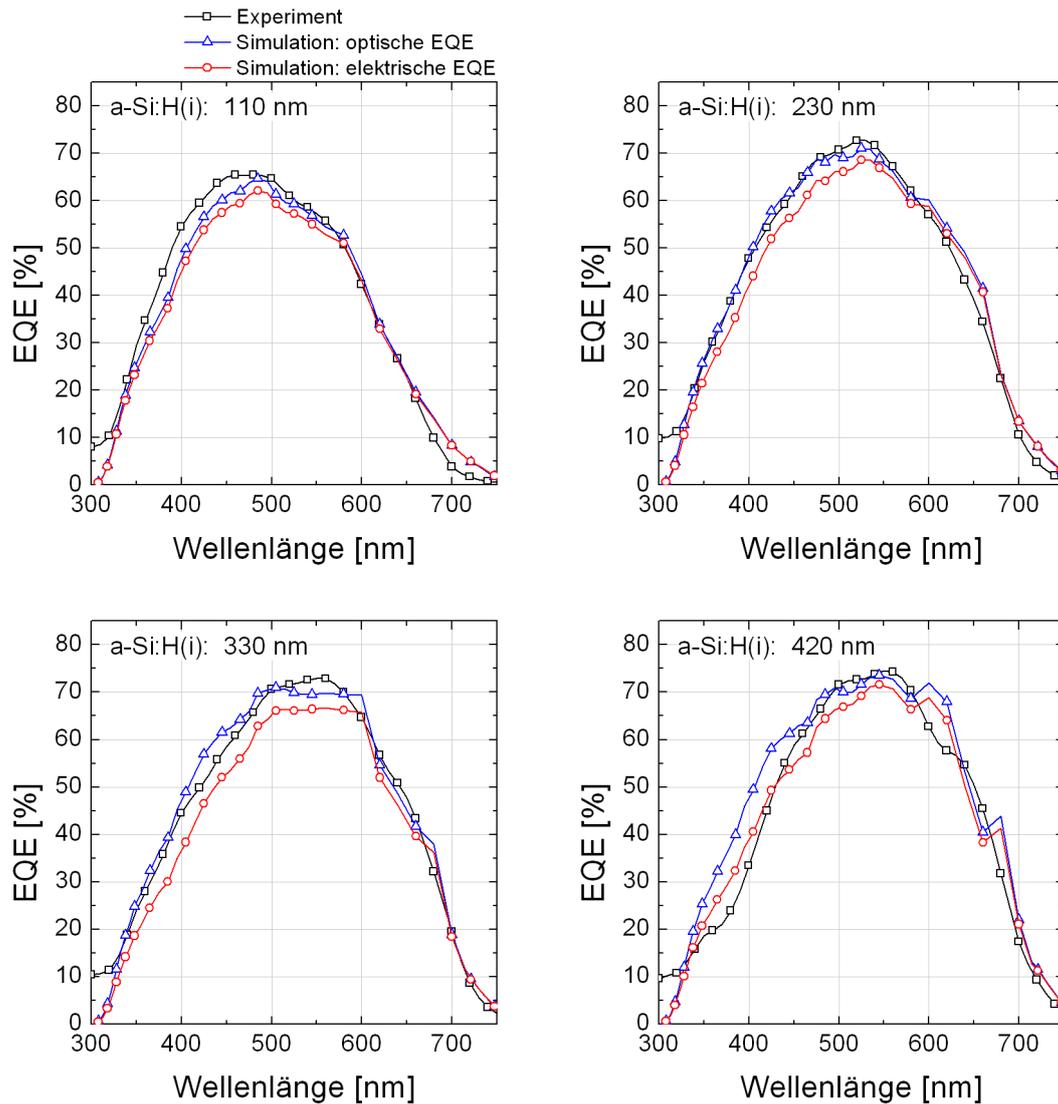


Abbildung 18: Experimentelle (schwarze Rechtecke), simulierte optische (blaue Dreiecke) und simulierte elektrische (rote Kreise) externe Quanteneffizienzen (EQE) von a-Si:H Solarzellen in der p-i-n Superstratkonfiguration mit intrinsischen Schichtdicken von 110 nm bis 420 nm.

Bei allen vier Solarzellen mit unterschiedlichen Schichtdicken sind nur leichte Unterschiede der beiden simulierten EQEs zu erkennen, deren Differenz mit der Schichtdicke jedoch zunimmt. Sowohl die optische als auch elektrische EQE-Simulationen stimmen sehr gut mit den experimentellen Messungen übereinstimmen. Daher kann von einer ausreichend genauen Modellierung der Generationsrate innerhalb der Halbleiterschichten ausgegangen werden, was für eine Modellierung der IV-Hellkennlinie zwingend notwendig ist.

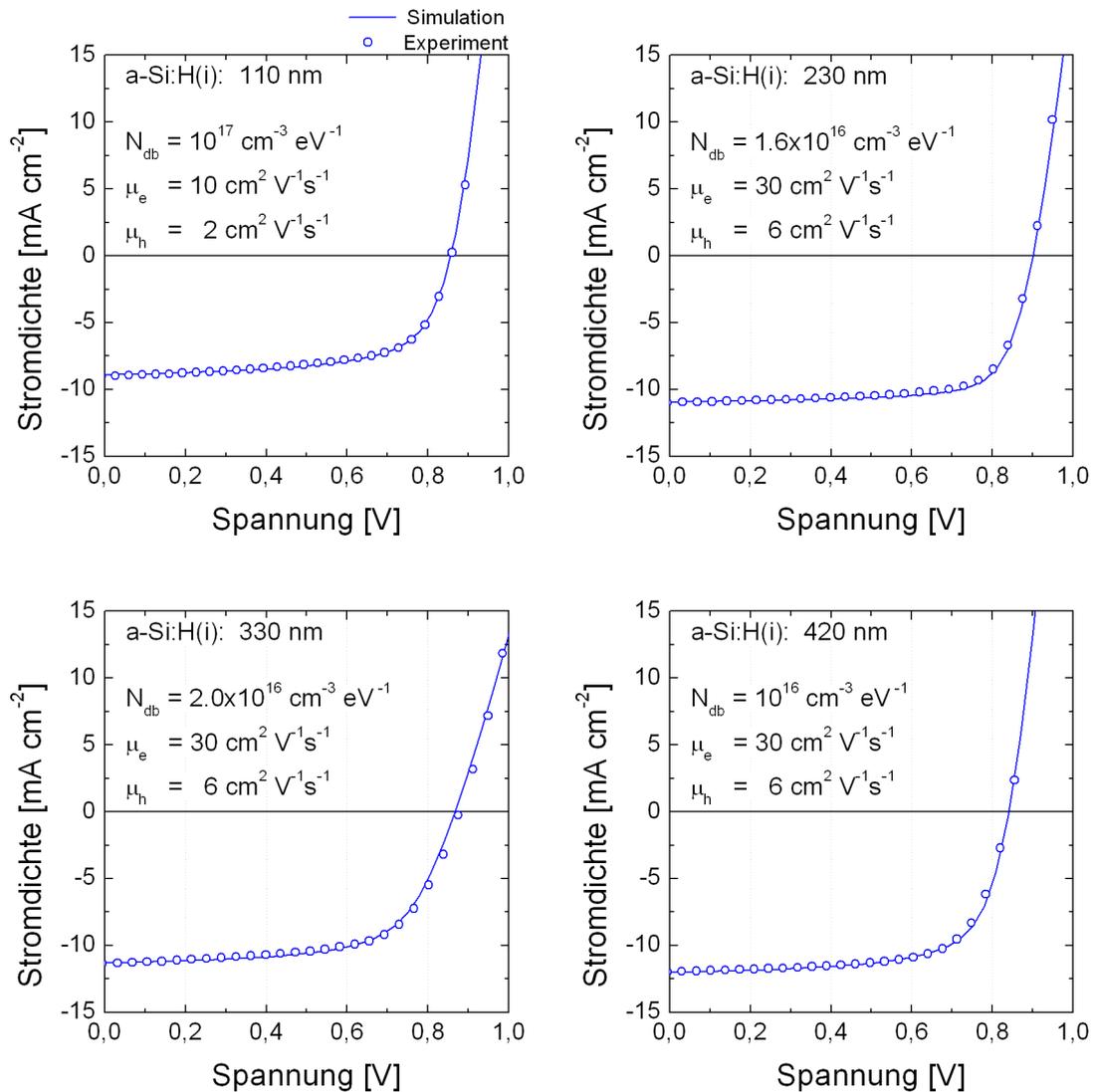


Abbildung 19: Simulierte (Linie) und experimentelle (Keise) Hellkennlinien von a-Si:H Solarzellen in der p-i-n Superstratkonfiguration mit unterschiedlichen intrinsischen Schichtdicken von 110 nm bis 420 nm. Als Fitparameter wurde die Dichte der tiefen Störstellen in der intrinsischen Schicht durch Variation der Dangling-Bond-Zustandsdichte der Gaußmaxima N_{db} verändert.

Die IV-Hellkennlinien der vier Solarzellen mit unterschiedlichen Schichtdicken sind in Abbildung 19 dargestellt. Da in der Herstellung der Solarzellen auch die Schichtqualität bezüglich der Defektdichte variieren kann, sind die Störstellendichten N_{db} der intrinsischen Schicht soweit angepasst worden, bis eine gute Übereinstimmung der entsprechenden Hell- und Dunkelkennlinien erreicht werden konnte. Im Fall der dünnsten Solarzelle mit einer i-Schichtdicke von 110 nm wurden die Ladungsträgermobilitäten μ_e und μ_h reduziert, was durch die erhöhte dangling-bond-Dichte begründet wird. Tabelle 4 fasst alle variierten Parameter nochmals zusammen.

Tabelle 4: Schichtdicken und ermittelte Werte der variabel gehaltenen elektrischen Parameter der a-Si:H p-i-n Solarzellen.

| Solarzellennr. | | #1 | #2 | #3 | #4 |
|-----------------------------|--|-------------------|---------------------|-------------------|-------------------|
| i-Schichtdicke | [nm] | 110 | 230 | 330 | 420 |
| $n_{\text{dot, a-Si:H(p)}}$ | [cm ⁻³] | $6 \cdot 10^{19}$ | $1.5 \cdot 10^{20}$ | $8 \cdot 10^{19}$ | $4 \cdot 10^{19}$ |
| N_{db} (i-Schicht) | [cm ⁻³ eV ⁻¹] | 10^{17} | $1.2 \cdot 10^{16}$ | $2 \cdot 10^{16}$ | 10^{16} |
| R_{serie} | [Ω] | 1.7 | 2.9 | 7.3 | 1.8 |
| R_{parallel} | [MΩ] | 0.6 | 16.8 | 0.5 | 21.9 |
| $\mu_{\text{e, a-Si:H(i)}}$ | [cm ² V ⁻¹ s ⁻¹] | 10 | 30 | 30 | 30 |
| $\mu_{\text{h, a-Si:H(i)}}$ | [cm ² V ⁻¹ s ⁻¹] | 2 | 6 | 6 | 6 |

4.4 Zusammenfassung

In diesem Teilabschnitt konnte das erstellte Standardmodell von a-Si:H Solarzellen mit einer weitreichenden Dickenvariation der intrinsischen Absorberschicht und der Übereinstimmung von experimentell ermittelten EQE-Spektren, Dunkel- sowie Hellkennlinien validiert werden. Schwankungen der Homogenität bzw. Qualität der experimentell abgeschiedenen Schichten wurden in der Simulation mit Hilfe von virtuellen Serien- und Parallelwiderstände bzw. einer Variation der Störstellendichte und der verminderten Ladungsträgermobilitäten erfolgreich interpretiert und umgesetzt. Die Ursache dieser Schwankungen liegt in der verwendeten PECVD-Technologie, bei der kleine Schwankungen in der Herstellungsprozedur erhebliche Einflüsse auf die Solarzellenperformance haben können. Der validierte elektrische Parametersatz für a-Si:H Schichten gibt somit die Möglichkeit, eine sichere Prognose für Solarzellenstrukturen, wie sie am EWE-Forschungszentrum für Energietechnologie e.V. mit Hilfe der PECVD-Technologie hergestellt werden, zu erstellen. Die Modellierung der Schichtdickenserie zeigt allerdings auch, dass ein eindeutiger elektrischer Parametersatz nur schwer zu ermitteln ist, da die prozessbedingten Schichtinhomogenitäten in der Simulation entsprechend berücksichtigt werden müssen. Entscheidend für eine sichere simulative Prognose ist daher ein experimentell gestützter Wertebereich der elektrischen Eingangsparameter, der u.a. von der Stabilität des verwendeten Anlagenprozesses abhängt.

5 Tunnelprozesse in Silizium-Dünnschichtsolarzellen

In diesem Kapitel werden Tunnelprozesse von Elektronen und Löchern an internen Grenzflächen in der elektrische Modellierung berücksichtigt, so dass Ladungsträger aus Potentialtöpfen von Valenz- und Leitungsbändern in angrenzende Schichten gelangen können. Diese Tunnelprozesse sind nötig um einerseits die experimentell bestimmte Halbleitercharakteristik von TCO-Materialien und andererseits die serielle Verschaltung von zwei Subzellen in einer Tandemstruktur simulativ abbilden zu können.

5.1 Simulationsdetails

Für die experimentelle Herstellung von amorphen Silizium-Dünnschichtsolarzellen in der p-i-n Superstratkonfiguration (vgl. Abschnitt 2.3) wird auf einem Glas/TCO-Substrat mit der p-Schichtabscheidung begonnen, worauf die i- und n-Schicht folgt. Die zuletzt abgeschiedene Silberelektrode dient als Rückreflektor und elektrische Kontaktierung der n-Schicht, so dass die photogenerateden Elektronen in einen äußeren Stromkreis abfließen können. Abbildung 20a veranschaulicht diese Schichtsequenz und deren Wachstumsrichtung, welche auf die optische und elektrische Simulationsdomäne übertragen wird (Abbildung 20b). Für die optische Simulation müssen die optischen Eigenschaften aller Schichten übernommen werden, um das Generationsratenprofil der photogenerateden Ladungsträger korrekt nachzubilden. Für die elektrische Simulation kann allerdings auf das Glassubstrat verzichtet werden, da dessen elektrische Leitfähigkeit vernachlässigbar ist und somit keinen Einfluss auf die elektrischen Eigenschaften der Solarzelle hat. Die elektrischen Kontakte können daher in der Simulationsdomäne direkt an die Silber- und TCO-Schicht gesetzt werden, wie in Abbildung 20b zu erkennen.

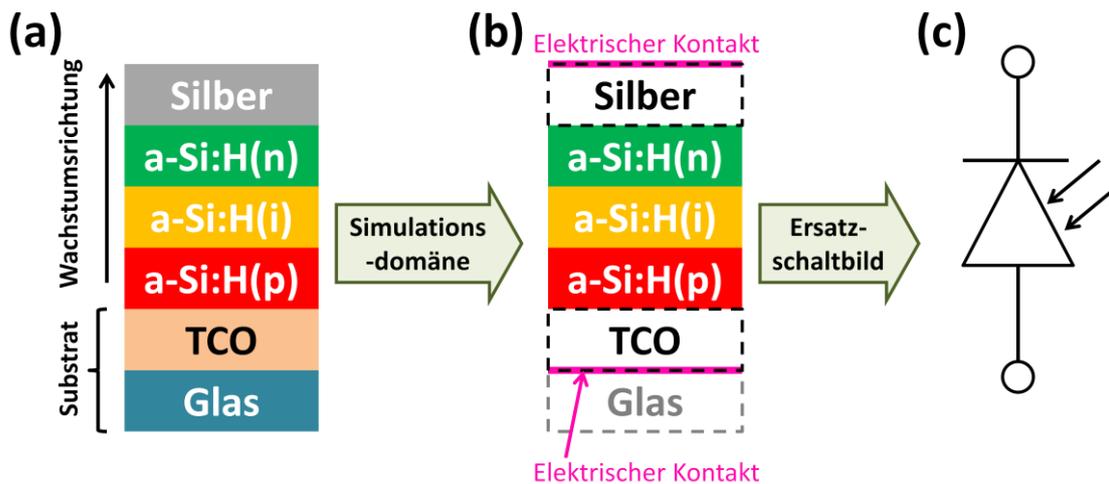


Abbildung 20: Experimentelle Schichtstapelfolge (a), Simulationsdomäne mit den elektrischen Kontakten (b) und entsprechendes Ersatzschaltbild (c) einer p-i-n Solarzelle aus amorphem Silizium.

Der p-i-n Übergang ist die eigentliche Solarzellenstruktur, deren Ersatzschaltbild als photoelektrisches Diodenelement in Abbildung 20c dargestellt ist. Die Silber- und TCO-Schichten dienen als elektrische Leiter, so dass die photogenerierten Elektronen aus der n-Schicht und die photogenerierten Löcher aus der p-Schicht in einen äußeren Stromkreis fließen können. Entscheidend für den elektrischen Transport sind die Schichtwiderstände der Elektrodenschichten, die in experimentell ermittelten Hell- und Dunkelkennlinien als Serienwiderstand registriert werden können. Da die hier vorgestellten Simulationsdomänen meist eine laterale Ausdehnung im Mikrometerbereich besitzen, wird der laterale Schichtwiderstand der Silber- und TCO-Schichten nicht berücksichtigt und der virtuelle elektrische Kontakt kann wie in Abbildung 20b dargestellt an der gesamten Grenzschicht gesetzt werden. Um dennoch die elektrischen Leitfähigkeiten der Elektrodenschichten in der Simulation zu berücksichtigen, können virtuelle ohmsche Widerstände in der Modellierung verwendet werden, wie bereits in Kapitel 4 gezeigt.

Silber gehört zu der Gruppe der Metalle, so dass dessen charakteristische Austrittsarbeit als Materialparameter in die elektrische Simulation einfließen kann. Allerdings wird in bisherigen Publikationen zur elektrischen Modellierung auf die Eigenschaften des Metall-Halbleiter-Übergangs verzichtet, so dass die Austrittsarbeit des Metalls keinen Einfluss auf die Solarzellencharakteristik hat. Dieser Einfluss wurde auch im Rahmen der Promotion nicht weiter untersucht, so dass Metalle als ideale Kontaktelektroden angenommen werden. Auch TCO-Materialien werden in bisherigen Publikationen zur elektrischen Modellierung meist als Metall angenommen, so dass diese sich lediglich in den optischen Eigenschaften von Silber unterscheiden. Da in beiden Fällen die Silber- und TCO-Schicht keinen weiteren Einfluss auf die Band-

struktur der p-i-n Struktur haben, könnten die elektrischen Kontakte im Falle der Simulationsdomäne direkt an die p-Schicht bzw. n-Schicht gesetzt werden.

Tabelle 5 zeigt die für diesen Abschnitt 5 verwendeten elektrische Parameter für a-Si:H und $\mu\text{c-Si:H}$ Schichten und die einzelnen Schichtdicken von amorphen und mikrokristallinen Einzelzellen bzw. mikromorphen Tandemzellen. Neben den Siliziumschichten wird für die Simulationsdomäne für Glas und Silber eine Schichtdicke von 1 μm und für die TCO-Schicht eine Dicke von 800 nm angenommen. Die elektrischen Kontakte wurden wie in Abbildung 20b dargestellt gesetzt und die Silber- und TCO-Schichten als Metalle definiert, deren Austrittsarbeiten keinen Einfluss auf die p-i-n Bandstruktur haben.

Zur Berechnung der Generationsrate innerhalb der Halbleiterschichten wurde die Transfer-Matrix-Methode verwendet, so dass eine Lichtstreuung an rauen Grenzflächen nicht berücksichtigt wird. Allerdings liegt der Fokus dieses Abschnitts auf elektrischen Transporteigenschaften von Materialgrenzflächen, weshalb auf eine exakte optische Modellierung verzichtet wurde. Die verwendeten komplexen Brechungsindizes der Materialien sind in Abbildung 14 auf Seite 23 dargestellt.

Tabelle 5: Die für diesen Abschnitt 5 verwendeten elektrischen Parameter und Schichtdicken.

| Parameter | | a-Si:H(p) | a-Si:H(i) | a-Si:H(n) | $\mu\text{c-Si:H(p)}$ | $\mu\text{c-Si:H(i)}$ | $\mu\text{c-Si:H(n)}$ |
|------------------------------|---|---------------------|---------------------|---------------------|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| n_{dot} | $[\text{cm}^{-3}]$ | $3 \cdot 10^{18}$ | 10^5 | $5 \cdot 10^{18}$ | 10^{18} | 10^{10} | 10^{18} |
| χ_0 | [eV] | 3.9 | 3.9 | 3.9 | 3.9 | 3.9 | 3.9 |
| E_{gap} | [eV] | 1.75 | 1.75 | 1.75 | 1.2 | 1.2 | 1.2 |
| $N_{\text{V}}, N_{\text{L}}$ | $[\text{cm}^{-3}]$ | $2.5 \cdot 10^{20}$ | $2.5 \cdot 10^{20}$ | $2.5 \cdot 10^{20}$ | $2.5 \cdot 10^{20}$ | $2.5 \cdot 10^{20}$ | $2.5 \cdot 10^{20}$ |
| N_{db} | $[\text{eV}^{-1} \text{cm}^{-3}]$ | $2.6 \cdot 10^{18}$ | $5 \cdot 10^{15}$ | $2.6 \cdot 10^{18}$ | 10^{17} | 10^{15} | 10^{17} |
| σ_{db} | [eV] | 0.2 | 0.2 | 0.2 | 0.2 | 0.2 | 0.2 |
| U | [eV] | 0.3 | 0.3 | 0.3 | 0.3 | 0.3 | 0.3 |
| $\sigma_{\text{db}}^{+/-}$ | $[\text{cm}^2]$ | 10^{-14} | 10^{-14} | 10^{-14} | 10^{-14} | 10^{-14} | 10^{-14} |
| σ_{db}^0 | $[\text{cm}^2]$ | 10^{-16} | 10^{-16} | 10^{-16} | 10^{-16} | 10^{-16} | 10^{-16} |
| N_{tail} | $[\text{eV}^{-1} \text{cm}^{-3}]$ | $7 \cdot 10^{20}$ | $7 \cdot 10^{20}$ | $7 \cdot 10^{20}$ | - | - | - |
| $E_{\text{V},0}$ | [meV] | 167 | 50 | 167 | - | - | - |
| $E_{\text{L},0}$ | [meV] | 83.5 | 25 | 83.5 | - | - | - |
| $\sigma_{\text{tail}}^{+/-}$ | $[\text{cm}^2]$ | 10^{-14} | 10^{-14} | 10^{-14} | - | - | - |
| σ_{tail}^0 | $[\text{cm}^2]$ | 10^{-16} | 10^{-16} | 10^{-16} | - | - | - |
| μ_{e} | $[\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}]$ | 5 | 20 | 5 | 20 | 50 | 20 |
| μ_{h} | $[\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}]$ | 1 | 5 | 1 | 5 | 10 | 5 |
| Schichtdicke [nm]: | | | | | | | |
| - Einzelzelle | | 7 | 360 | 25 | 20 | 1000 | 30 |
| - Tandemzelle | | 7 | 280 | 20 | 20 | 1500 | 30 |

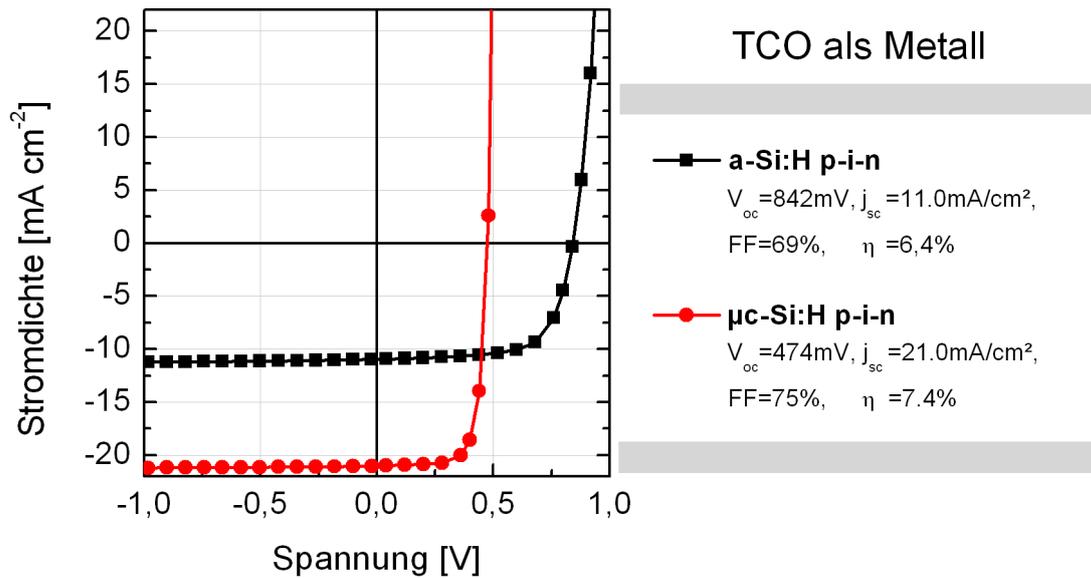


Abbildung 21: Simulierte Hellkennlinien von a-Si:H und μ c-Si:H Einzelsolarzellen mit als Metall definiertes TCO.

Für die Verifizierung der elektrischen Parametersätze zeigt Abbildung 21 die simulierten Hellkennlinien und deren charakteristischen Kenngrößen von a-Si:H und μ c-Si:H Einzelsolarzellen. Kurzschlussstromdichten j_{sc} , Leerlaufspannungen V_{oc} , sowie Füllfaktoren FF liegen für beide Zelltypen in experimentell beobachtbaren Bereichen. Allerdings wurde im Falle der mikrokristallinen Einzelzelle eine konstante optische Generationsrate von $1.3 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ angenommen, so dass eine Kurzschlussstromdichte von 21 mA/cm^2 beobachtet werden kann und mit experimentellen Messungen übereinstimmt.

5.2 Ergebnisse und Diskussion

5.2.1 Tunnelprozess am TCO/a-Si:H(p)-Übergang

Die in der Simulation übliche Definition des TCO-Materials als Metall ist eine Vereinfachung der tatsächlichen Materialeigenschaften. TCOs, wie z.B. $\text{SnO}_2\text{:F}$ oder $\text{ZnO}_2\text{:Al}$, sind hochdotierte n^+ -Halbleitermaterialien mit einer experimentell gemessenen Bandlücke von 3 - 4 eV [84]. Werden in Solarzellenstrukturen die TCO(n^+)-Schichten als Löcherelektrode eingesetzt, so entsteht ein zusätzlicher pn-Heteroübergang, der dem unbeleuchteten p-i-n Übergang der eigentlichen Solarzellenstruktur entgegenwirkt. Abbildung 22 zeigt den schematischen Aufbau dieser Zellstruktur sowie das entsprechende Ersatzschaltbild, welches die entgegengesetzten Polaritäten der beiden pn-Strukturen nochmals verdeutlicht.

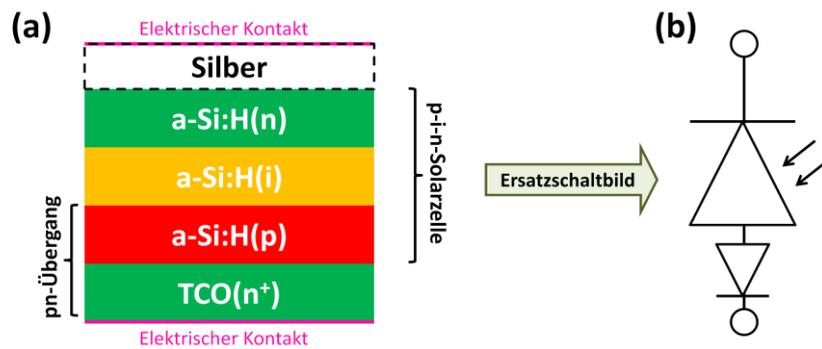


Abbildung 22: Schematische Schichtstapelfolge und elektrische Kontakte der verwendeten Simulationsdomäne (a) und entsprechendes Ersatzschaltbild (b) einer a-Si:H p-i-n Solarzelle mit TCO als hochdotiertes n-Halbleitermaterial TCO(n⁺).

Die Auswirkungen der Halbleiterdefinition des TCO-Materials bezüglich der elektrischen Modellierung wird, wie in Abbildung 23 dargestellt, in der Bandstruktur deutlich. Es entsteht somit ein Potentialtopf für photogeneratede Löcher in der p-Schicht, aus welchem die Ladungsträger durch thermische Anregung die Zustände des TCO-Valenzbandes nur schwer besetzen können. Abbildung 24 zeigt das Simulationsergebnis der Hellkennlinie des Schichtstapels (schwarze Rechtecke), falls die elektrische Simulation durch das alleinige Lösen der Poisson- und Kontinuitätsgleichungen des Schichtstapels aus Abbildung 22a durchgeführt wird. Das Abfallen der Stromdichte im Bereich von -0.5 V zeigt deutlich den Einfluss des ausgeprägten Potentialtopfes an der TCO(n⁺)/a-Si:H(p)-Grenzschicht, so dass photogeneratede Löcher nicht ohne weitere auf die TCO-Schicht gelangen können

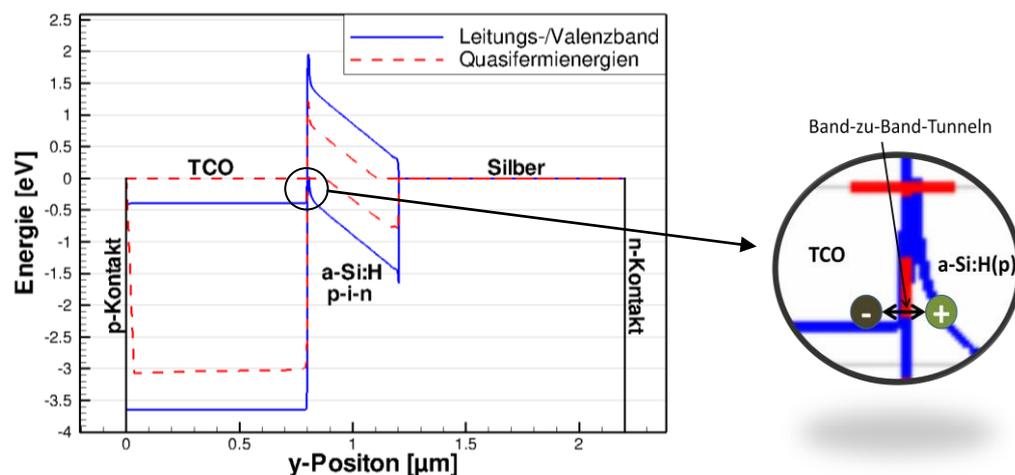


Abbildung 23: Simulierte Bandstruktur im beleuchteten Kurzschlussfall der a-Si:H p-i-n Solarzelle aus Abbildung 22 mit TCO als hochdotiertes n-Halbleitermaterial (links) und Visualisierung des Band-zu-Band-Tunneleffekts an der TCO/a-Si:H(p)-Grenzfläche (rechts).

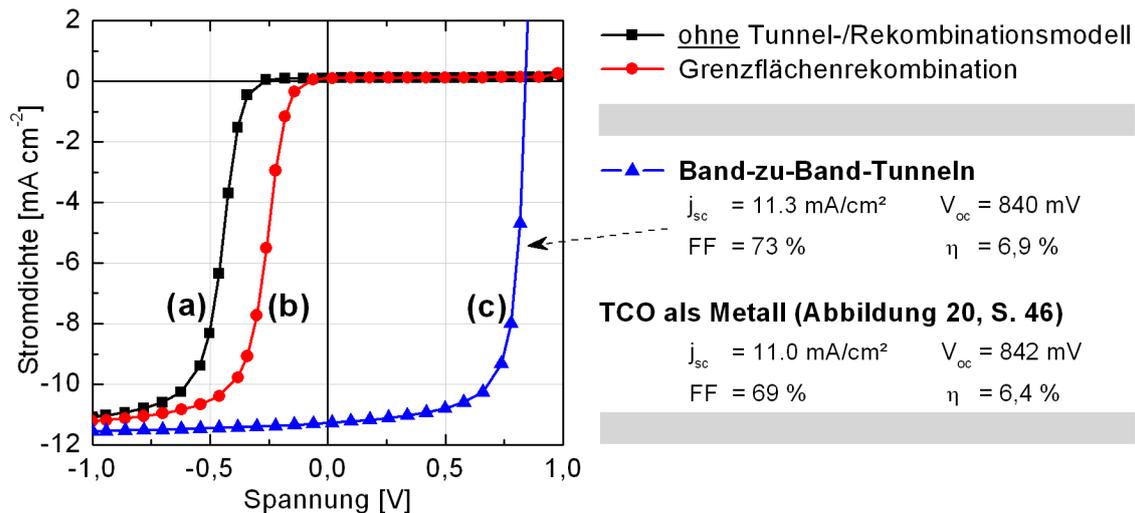


Abbildung 24: Simulierte Hellkennlinien von a-Si:H p-i-n Solarzellen mit TCO als Halbleitermaterial: (a) ohne Tunnel- oder Grenzflächenrekombinationsmodell; (b) Grenzflächenrekombinationsmodell mit einer Rekombinationsgeschwindigkeit $S = 10^8$ cm/s; (c) Band-zu-Band-Tunnelmodell am TCO/a-Si:H(p)-Übergang.

Der charakteristische s-förmige Verlauf kann allerdings in experimentell bestimmten IV-Hellkennlinien nicht bzw. nicht in diesem Ausmaß beobachtet werden. Es muss daher neben dem Lösen der Poisson- und Kontinuitätsgleichungen für den Schichtstapel aus Abbildung 22a ein weiteres Transportmodell in die elektrische Modellierung eingefügt werden, um experimentelle IV-Hellkennlinien, wie z.B. in Abbildung 19 dargestellt, korrekt abbilden zu können. Kanevce et al. diskutierten die Auswirkungen der elektrischen Modellierung unter Verwendung des TCO-Materials mit Halbleitercharakteristik und den damit verbundenen pn-Übergängen entgegengesetzter Polarität von HIT-Solarzellen auf deren Hellkennlinien, in welchen es ebenfalls zu einem s-förmigen Verlauf der IV-Charakteristik kommt [80]. Durch das Einfügen eines geeigneten Band-zu-Band-Tunnelmodells konnten Kanevce et al. den experimentell bestimmten Diodenverlauf wieder simulativ abbilden und so das zusätzliche Transportmodell am TCO/a-Si:H(p)-Übergang verifizieren.

Das von Kanevce et al. bestätigte Band-zu-Band-Tunnelmodell am TCO/a-Si:H(p)-Übergang wurde daher auf die Modellierung von Silizium-Dünnschichtsolarzellen übertragen, was in der IV-Hellkennlinie in Abbildung 24 (blaue Dreiecke) resultiert. Die Diodenstruktur und charakteristischen Kenngrößen j_{sc} , V_{oc} und FF sind mit denen von Abbildung 21 nahezu identisch, die mit der Annahme eines TCO-Metallcharakters durchgeführt wurde. Der zusätzliche Tunnelprozess führt zur Rekombination von Elektronen aus dem TCO-Leitungsband und Löchern aus dem a-Si:H(p)-Valenzband, was einem effektiven Ladungstransfer der Löcher auf die TCO-Schicht entspricht. Der Band-zu-Band-Tunneleffekt ist in Abbildung 23 (rechts)

nochmals schematisch dargestellt. Für eine genauere theoretische Betrachtung des Band-zu-Band-Tunnelprozesses wird hier auf Ref. [82] verwiesen.

Erst die implementierten Band-zu-Band-Tunnelprozesse lassen einen ausreichenden Rekombinationsstrom an der TCO(n^+)/a-Si:H(p)-Grenzfläche zu und führen somit zu einem effektiven Ladungstransfer der Löcher auf die TCO-Schicht. Das alleinige Einfügen einer Shockley-Read-Hall-Rekombination an der TCO(n^+)/a-Si:H(p)-Grenzfläche mit einer frei gewählten Rekombinationsgeschwindigkeit $S = 10^8$ cm/s in das elektrische Modell führt hingegen nicht zum Verschwinden des s-förmigen Verhaltens, wie in Abbildung 24 (rote Kreise) dargestellt. Die Gründe liegen zum einen darin, dass die Ladungsträger aufgrund der Bandverbiegung die Grenzfläche nicht erreichen können und dazu ein Tunnelprozess nötig wäre. Zum Anderen kann aus programmiertechnischen Gründen nur für eine Seite der Grenzfläche eine Störstellenverteilung angegeben werden, so dass die Ladungsträger von der anderen Seite die Störstellen nicht ohne weiteres besetzen können.

Mit dem neu implementierten Band-zu-Band-Tunnelprozess an der TCO(n^+)/a-Si:H(p)-Grenzfläche und der qualitativen Erklärung des Rekombinationsprozesses ist es somit möglich die elektrischen Halbleitereigenschaften von TCO-Materialien in der Simulation von IV-Kennlinien künftig zu berücksichtigen. Diese simulative Umsetzung führt zum besseren Verständnis realer physikalischer Vorgänge an TCO/Silizium-Grenzflächen und der möglichen elektrischen Optimierung der Solarzelleneffizienz bezüglich verwendeter TCO-Substrate. Die gewonnen Erkenntnisse über interne pn-Übergänge, durch die ausgeprägte Potentialtöpfe in der Bandstruktur entstehen können, lassen sich auch auf die Verschaltung zweier Subzellen in mikromorphen Tandemsolarzellen übertragen, wie im folgenden Abschnitt 5.2.2 zu sehen.

5.2.2 Tunnelprozess am internen pn-Übergang mikromorpher Tandemstrukturen

Mikromorphe Tandemsolarzellen aus amorphem und mikrokristallinem Silizium können wie in Abbildung 25a schematisch dargestellt auf ein Glas/TCO-Substrat abgeschieden werden. Der dadurch entstehende interne pn-Übergang bildet wie im vorherigen Abschnitt 5.2.1 eine Diodenstruktur, deren Polarität im Dunkelfall den beiden p-i-n Subzellen entgegengesetzt ist. Das entsprechende Ersatzschaltbild ist in Abbildung 25b dargestellt und ist vergleichbar mit der Problematik des s-förmigen Verlaufs in Abbildung 22b. Auch in mikromorphen Tandemstrukturen entstehen somit am internen pn-Übergang Potentialtöpfe für die Ladungsträger in Valenzband und Leitungsband, was eine serielle Verschaltung der beiden Subzellen simulativ zunächst größtenteils verhindert.

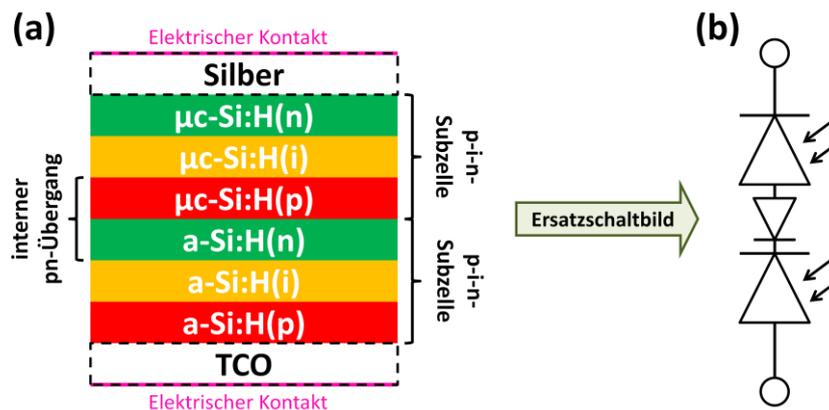


Abbildung 25: Schematische Schichtstapelfolge und elektrische Kontakte der verwendeten Simulationsdomäne (a) und entsprechendes Ersatzschaltbild (b) einer mikromorphen Tandemsolarzelle.

Um Subzellen von Tandemsolarzellen erfolgreich seriell zu verschalten, muss am internen pn-Übergang die Rekombinationsstromdichte den photogenerierten Stromdichten in den beiden Subzellen entsprechen. Da es sich allerdings an der a-Si:H(n)/ μ c-Si:H(p)-Grenzschicht um einen Heteroübergang handelt, sind gemäß dem Banddiagramm (Abbildung 26) die Elektronen in der n-Schicht und die Löcher in der p-Schicht in einem Potentialtopf größtenteils gefangen und können nicht miteinander rekombinieren. Dies entspricht einer nicht vorhandenen seriellen Verschaltung. Die Auswirkungen auf die Hellkennlinie sind in Abbildung 27 (blaue Dreiecke) zu erkennen, bei der die simulierte IV-Charakteristik allein durch das Lösen der Poisson- und Kontinuitätsgleichungen der Solarzellenstruktur berechnet wurde.

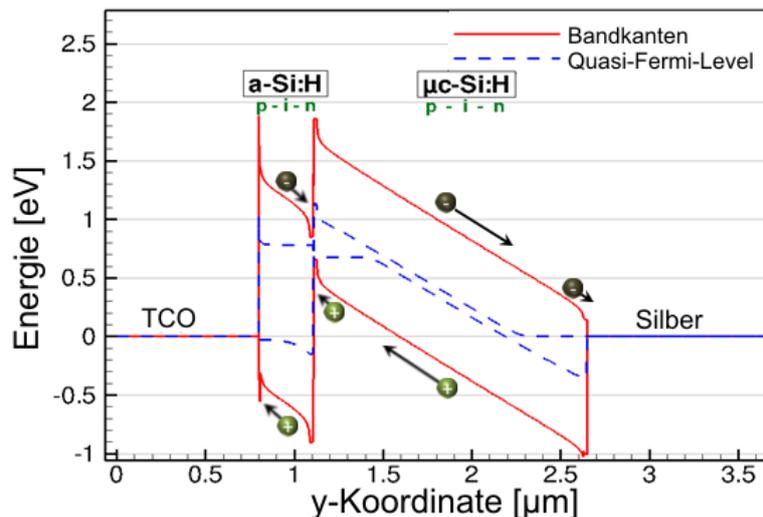


Abbildung 26: Simulierte Bandstruktur einer mit dem AM1.5G-Spektrum beleuchteten a-Si:H/ μ c-Si:H Tandemsolarzelle mit TCO als Metall. Die Schichtstapelsequenz entspricht der in Abbildung 25a gezeigten.

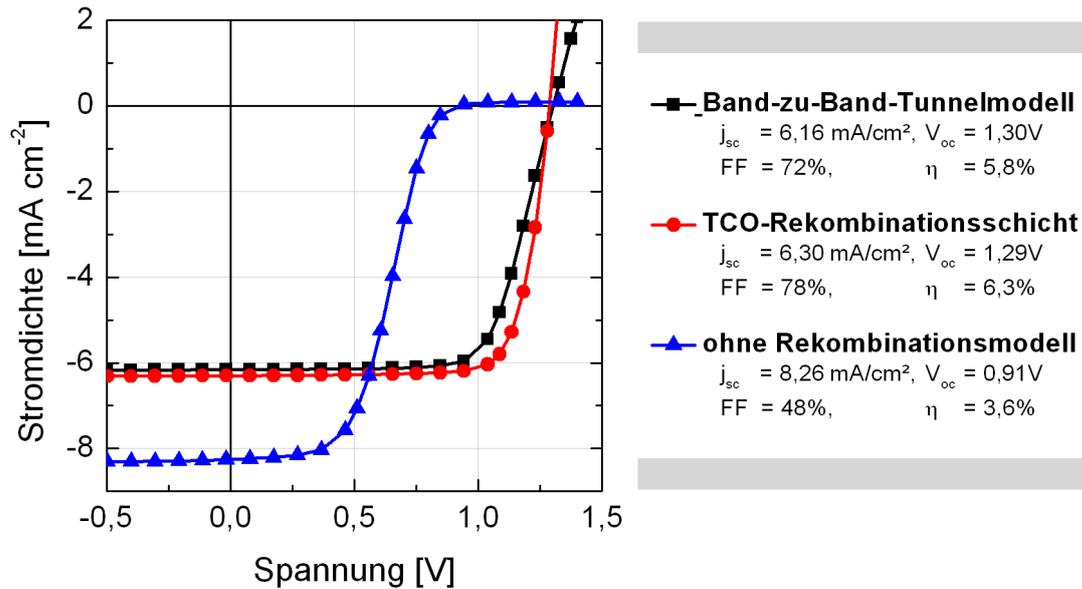


Abbildung 27: Gegenüberstellung simulierter Hellkennlinien von a-Si:H/ μ c-Si:H Tandemsolarzellen mit Band-zu-Band-Tunnelmodell (schwarze Rechtecke), ohne Band-zu-Band-Tunnelmodell (blaue Dreiecke) und mit TCO-Zwischenschicht am a-Si:H(n)/ μ c-Si:H(p)-Übergang.

In der Simulation wurde somit kein zusätzliches Rekombinationsmodell am internen pn-Übergang angenommen und ein entsprechender s-förmiger Verlauf bildet sich aus. Der erhöhte Kurzschlussstrom dieser Kennlinie resultiert aus der Annahme, dass die beiden Subzellen nicht der gewohnten Tandemstruktur entsprechen, sondern zusammen als eine Einzelzelle behandelt werden. Bei ausreichend hohen Dotierungen der internen pn-Schichten ist bei experimentell hergestellten Proben allerdings kein s-förmiger Verlauf zu beobachten. Grund ist die hohe Rekombinationsrate am internen pn-Übergang, welche in der Literatur mit einem Tunnelprozess erklärt und oftmals auch als „Tunneldiode“ bezeichnet wird [50]. Dabei tunneln Elektronen aus der n-Schicht in die p-Schicht (Band-zu-Band-Tunneln) und rekombinieren dort mit den Löchern (analog Löcher aus der p-Schicht). Der im vorherigen Abschnitt 5.2.1 diskutierte Band-zu-Band-Tunneleffekt führt auch am internen pn-Übergang der Tandemstruktur zu einem Verschwinden des s-förmigen Verlaufs, wie die Simulationsergebnisse in Abbildung 27 (schwarze Rechtecke) zeigen.

Eine perfekte serielle Verschaltung der beiden Subzellen kann allerdings wesentlich einfacher mit dem Einbringen einer dünnen TCO-Schicht (ca. 1 nm) simulativ umgesetzt werden, wie in Abbildung 28 schematisch dargestellt. Hierfür muss das TCO-Material als Metall definiert werden, so dass keine zusätzlichen Heteroübergänge im Modell erzeugt werden. Die Auswirkungen dieser neu entwickelten Strategie verdeutlicht die simulierte Hellkennlinie in Abbildung 27 (rote Kreise) mit einem geringeren Serienwiderstand bzw. der größeren Steigung in der Diodenkennlinie in Durchlassrichtung im Vergleich zur Hellkennlinie mit Band-zu-Band-

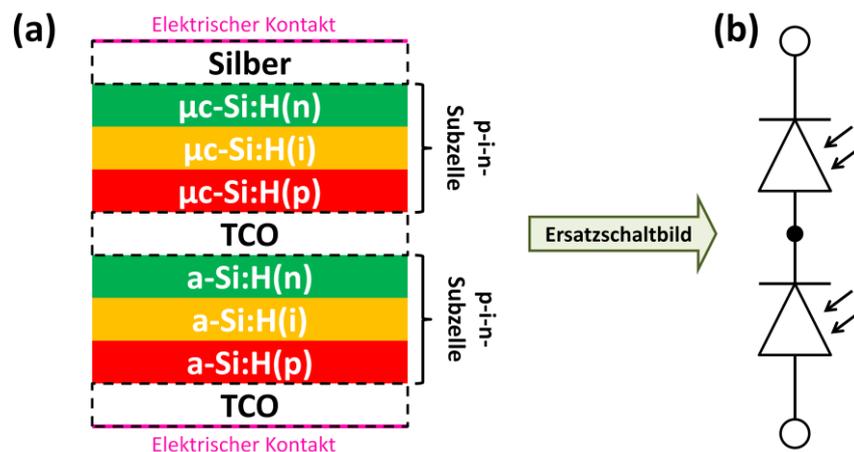


Abbildung 28: Schematische Schichtstapelfolge und elektrische Kontakte der verwendeten Simulationsdomäne mit TCO-Zwischenschicht (a) und entsprechendes Ersatzschaltbild (b) einer mikromorphen Tandemsolarzelle.

Tunnelmodell. Durch den Metallcharakter des eingefügten TCOs können die photogenerierten Löcher aus der p-Schicht und die photogenerierten Elektronen aus der n-Schicht ohne das Überwinden einer Potentialbarriere die gleichen Zustände besetzen und miteinander rekombinieren.

Um zu gewährleisten, dass durch die zusätzliche TCO-Schicht nur die serielle Verschaltung der Subzellen modelliert wird, muss der wellenlängenabhängige Brechungsindex einer der angrenzenden Siliziumschichten entsprechen. Änderungen der Brechungsindizes führen zu unterschiedlichem Transmissions- und Reflexionsverhalten des internen pn-Übergangs, was dem Prinzip eines Zwischenreflektors entspricht. Der Absorptionskoeffizient muss zudem für alle Wellenlängen auf null gesetzt werden, so dass zusätzliche parasitäre Absorptionen ausgeschlossen werden. Durch diese neue Strategie der seriellen Verschaltung mit Hilfe einer modifizierten TCO-Schicht können insbesondere bisher unbekannte Absorbermaterialien in einer Tandemstruktur simulativ behandelt werden, auch wenn noch keine Kalibrierung des Band-zu-Band-Tunnels vorgenommen werden konnte. Somit kann eine Potentialabschätzung neuartiger Solarzellenstrukturen durchgeführt werden, ohne alle elektrischen Parameter zu kennen.

5.3 Zusammenfassung

Durch die simulative Beschreibung der TCO-Elektroden als hochdotierter Halbleiter konnte gezeigt werden, dass zusätzliche Band-zu-Band-Tunnelprozesse für die Modellierung nötig sind um den qualitativen Verlauf von experimentellen IV-Hellkennlinien abzubilden. Der Grund liegt im internen pn-Übergang der $\text{TCO}(n^+)$ - und $\text{a-Si:H}(p)$ -Schichten und den damit verbunde-

nen Ausbilden von Potentialtöpfen für die photogenerateden Ladungsträger. Es ergibt sich durch das zusätzlich eingefügte Tunneltransportmodell und die erfolgreiche Modellierung der Hellkennlinie ohne s-förmigen Verlauf somit die Möglichkeit, experimentell ermittelte Bandlücken und Dotierkonzentrationen der TCO-Schichten mit in die Simulation von Silizium-Dünnschichtsolarzellen einfließen zu lassen. Somit können die elektrischen Eigenschaften der TCO-Elektroden künftig in der Modellierung berücksichtigt werden, was neue Optimierungspotentiale eröffnet.

Die gewonnenen Erkenntnisse zur Simulation des Band-zu-Band-Tunnelprozesses an internen pn-Übergängen konnten zudem erfolgreich auf die Modellierung mikromorpher Tandemsolarzellen übertragen werden. Dadurch kann die serielle Verschaltung der beiden Subzellen am internen pn-Übergang simulativ erfasst und die Ergebnisse mit experimentellen IV-Hellkennlinien qualitativ belegt werden. Neben dem erläuterten Tunnelmodell wurde zudem eine neue Methodik für TCAD-Simulationen aufgezeigt, die ebenfalls den Rekombinationsstrom am internen pn-Übergang simulativ abbildet. Hierfür wurde zwischen der a-Si:H(n)- und $\mu\text{c-Si:H(p)}$ -Schicht eine zusätzliche virtuelle Rekombinationsschicht eingefügt, deren optischen Parameter an die angrenzenden Halbleiterschichten angepasst wurden und die elektrischen Materialeigenschaften als Metall definiert wurde. Aus dieser Strategie resultiert eine perfekte serielle Verschaltung der beiden Subzellen, ohne den Anspruch der Kalibrierung des Tunnelprozesses. Dies vereinfacht künftige Potentialabschätzungen neuartiger Schicht- und Materialsysteme erheblich.

6 Einfluss des Generationsratenprofils auf die Hellkennlinie

In diesem Kapitel werden photoelektrische 1D-, 2D- und 3D-Simulationen von amorphen, mikrokristallinen und mikromorphen Silizium-Dünnschichtsolarzellen präsentiert und miteinander verglichen. Um die Lichtstreuung von realen Proben aufgrund von rauen Grenzflächen nachzubilden, wird eine AFM-Messung eines rauen TCO-Substrats als Grenzflächenstruktur für die in Sentaurus TCAD erstellten Simulationsdomänen verwendet. Es wird gezeigt, dass die modellierten optischen Generationsratenprofile mittels der Raytracer-Methode aufgrund der Oberflächenrauigkeit laterale Unterschiede in den Halbleiterschichten der Solarzelle aufzeigen. Es erfolgt außerdem eine Diskussion ihrer Auswirkungen auf die IV-Hellkennlinie.

6.1 Experiment

Die Ausbreitung des auf die Solarzelle einfallenden Lichts hängt stark von der Oberflächenrauigkeit und Struktur des TCOs ab, welche folglich die Anzahl der photogenerierten Ladungsträger innerhalb der Halbleiterschichten bestimmt. Raue Oberflächenstrukturen des TCOs lassen sich durch verschiedene Abscheidungsverfahren wie LPCVD oder APCVD erhalten. Doch auch ursprünglich glatte TCO-Oberflächen, welche mit einem Sputterprozess hergestellt werden, lassen sich durch nachträgliche nasschemische Ätzprozesse mit verdünnter Salzsäure aufräumen [85]. Die derzeitigen Ergebnisse theoretischer und experimenteller Untersuchungen zur Oberflächenrauigkeit bezüglich einer verbesserten Lichteinkopplung und der damit verbundenen erhöhten Kurzschlussstromdichte lassen eine hohe Aktualität dieser wissenschaftlichen Fragestellung in den Arbeiten zahlreicher Forschungsgruppen erkennen [86-90].

Abbildung 29 zeigt die typische raue Oberflächenstruktur eines kommerziell erhältlichen Asahi-U Substrats, welches aus einer ca. 2 mm dicken Glasscheibe besteht, auf die eine ca. 900 nm dicke TCO-Schicht aus fluordotiertem Zinnoxid ($\text{SnO}_2:\text{F}$) mittels der APCVD-Technik aufgebracht wird. Aufgrund des verwendeten Abscheideprozesses lässt sich eine natürliche TCO-

Oberflächenrauigkeit (rms: root mean square) von etwa 50 nm erreichen. In der REM-Aufnahme ist zudem noch eine auf dem Asahi-U Substrat abgeschiedene p-i-n Solarzellschicht aus amorphem Silizium zu erkennen, deren Oberflächenstruktur aufgrund des Wachstums etwas geglättet ausfällt. Die relativ scharfkantigen Strukturen des Asahi-U TCOs werden aufgrund des Wachstums nicht vollständig an die darüber abgeschiedenen Halbleiterschichten weitergegeben. Die REM-Aufnahme eignet sich jedoch nicht als direkter Eingangsparameter der Grenzflächenstrukturen für virtuelle Simulationsdomänen. Hierfür müssen die dreidimensionalen Ortskoordinaten der TCO-Oberfläche mit Hilfe der Rasterkraftmikroskopie (AFM) (Abbildung 29 rechts) gemessen werden, deren xyz-Matrix in das Simulationsprogramm eingelesen werden kann. Allerdings ist auch der leichte Unterschied der REM- und AFM-Aufnahmen bezüglich der scharfkantigen Strukturen zu erkennen. Durch die räumliche Ausdehnung der Messspitze, die im Falle der Rasterkraftmikroskopie die Oberfläche abtastet, ist eine gewisse Glättung der gemessenen Struktur unumgänglich. Es besteht die Möglichkeit diesen Messfehler zu berücksichtigen und die Oberflächendaten bei bekannter Spitzenausdehnung neu zu berechnen, so dass dieser Effekt reduziert und die scharfkantigen TCO-Strukturen auch in der AFM-Darstellung deutlicher werden. Auf diese Berücksichtigung der Spitzenausdehnung wurde hier allerdings verzichtet, da für die dreidimensionale Umsetzung die laterale Auflösung der AFM-Messung ohnehin meist reduziert wird. Dieser Punkt wird im folgenden Abschnitt 6.2 nochmals genauer diskutiert.

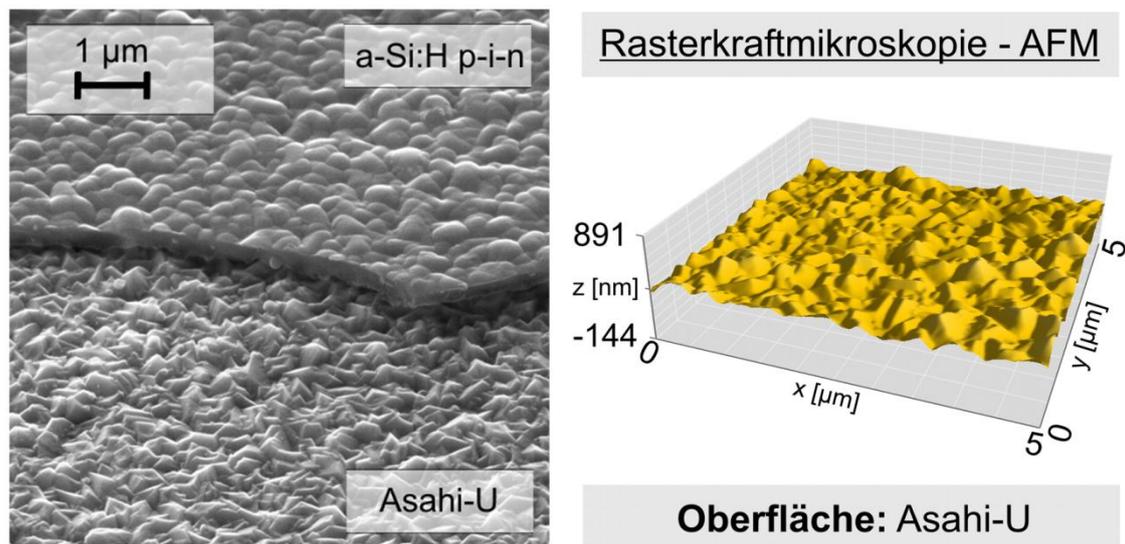


Abbildung 29: **Links:** REM-Aufnahme einer a-Si:H p-i-n Struktur auf Asahi-U unter 45° Neigungswinkel zur Probenoberfläche. Die Halbleiterschichten wurden mit Hilfe eines gepulsten Lasers abgetragen, so dass die natürliche Rauigkeit des Asahi-U TCOs am unteren Bildrand erkennbar ist. **Rechts:** AFM-Messung der TCO-Oberfläche eines Asahi-U Substrats.

6.2 Simulationsdetails

Eine Strategie zur Berechnung der Rate von photogenerierten Ladungsträgern unter Berücksichtigung von rauen Grenzflächen ist die Erstellung mehrdimensionaler Simulationsdomänen. Die in Abbildung 29 gezeigte AFM-Topografiemessung der TCO-Oberfläche - mit einer Auflösung von 256×256 Punkten auf einer Fläche von $5 \mu\text{m} \times 5 \mu\text{m}$ - kann dazu verwendet werden, das Strukturprofil der internen Grenzflächen auf die Simulationsdomäne zu übertragen. Für eine zweidimensionale Simulationsdomäne wird ein für die Oberflächenrauigkeit typisches Linienprofil der erhaltenen xyz-Daten exportiert (Abbildung 30b).

Das gemessene Profil kann noch durch die ausschließliche Berücksichtigung von lokalen Maxima und Minima vereinfacht werden, so dass nicht alle Messpunkte auf einem geraden Teilstück in die Simulation eingehen. Dadurch reduziert sich die Anzahl der Gitterpunkte in der Simulationsdomäne und somit die Simulationszeit. Zum anderen zeigen die AFM-Aufnahmen aufgrund der messtechnischen Gegebenheit (räumliche Ausdehnung der Messspitze) im Vergleich zu REM-Aufnahmen eine geglättete Oberflächentopografie (vgl. Abbildung 29). Für

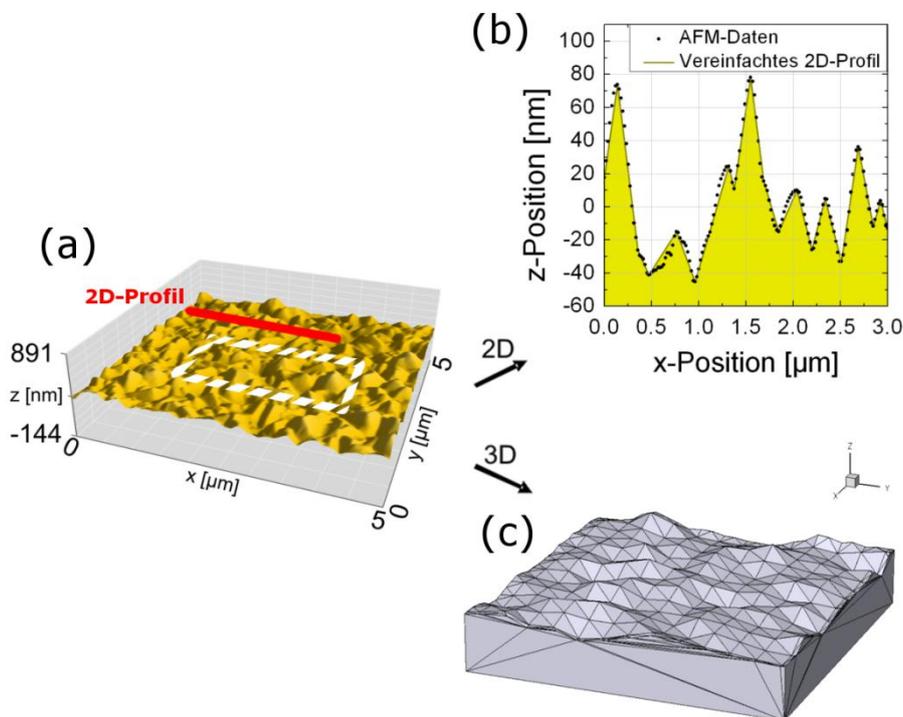


Abbildung 30: (a) AFM-Topografiemessung eines kommerziell erhältlichen Asahi-U ($\text{SnO}_2\text{:F}$) TCOs auf einem Glassubstrat. Das für die Modellierung exportierte zweidimensionale Linienprofil (rote Linie) und der dreidimensionale Profilbereich (gestricheltes Rechteck) sind hervorgehoben. (b) Gemessenes und vereinfachtes 2D-Linienprofil. (c) Virtuelles 3D-Profil der TCO-Schicht mit den Kantenlängen in x- und y-Richtung von je $2 \mu\text{m}$.

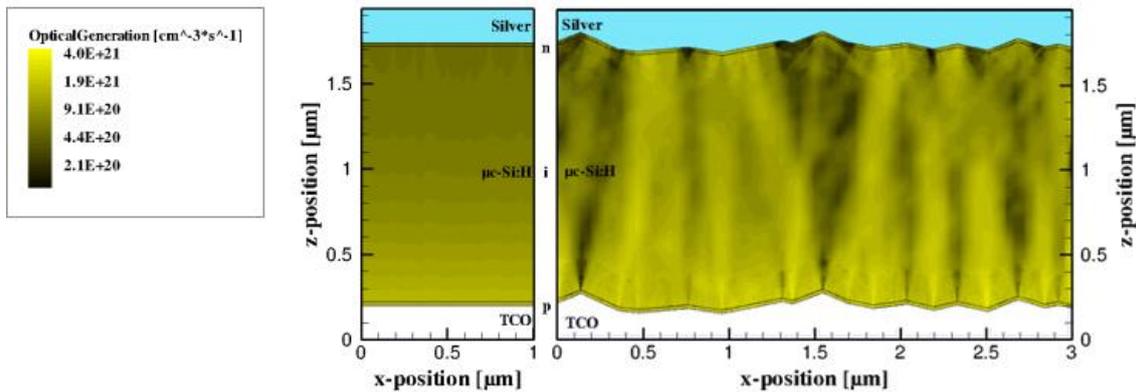


Abbildung 31: Modellierte Generationsratenprofile innerhalb der Halbleiterschichten von mikrokristallinen Einzelsolarzellen für den 1D-Fall (links) und 2D-Fall (rechts).

dreidimensionale Simulationsdomänen werden die Datenpunkte in der Mitte der gemessenen Topografie verwendet, so dass die daraus folgende Struktur der TCO-Schicht mit einer Kantenlänge von $2\ \mu\text{m} \times 2\ \mu\text{m}$ in x- und y-Richtung und einer reduzierten Auflösung von 13×13 Punkten als virtuelles Substrat zur Verfügung steht (Abbildung 30c). Vergleicht man die vereinfachte virtuelle 3D-Struktur mit der ursprünglichen AFM-Oberfläche, so wird ersichtlich, dass durch die Reduzierung der Auflösung die Pyramidenstruktur verändert wird. Allerdings bedeutet eine höhere Auflösung auch ein Ansteigen der Simulationszeit. Da ein großer Anstieg der Anzahl der photogenerierten Ladungsträger bei einer Oberflächenauflösung von 40×40 Punkten nicht beobachtet werden konnte (hier nicht explizit aufgeführt), werden nur die Ergebnisse mit niedriger Auflösung präsentiert.

Um die Auswirkungen der Asahi-U Oberfläche auf die IV-Hellkennlinie zu untersuchen, werden folgende verschiedene Modelle zur Generationsratenberechnung verwendet.

1. Raytracer-Methode mit variabler Lichtintensität des AM1.5G-Spektrums an 1D-Domänen
2. Konstante optische Generationsrate an 1D-Domänen
3. Raytracer-Methode mit einer Lichtintensität von $100\ \text{mW}/\text{cm}^2$ des AM1.5G-Spektrums an 2D-Domänen
4. Raytracer-Methode mit einer Lichtintensität von $100\ \text{mW}/\text{cm}^2$ des AM1.5G-Spektrums an 3D-Domänen

Abbildung 31 links zeigt eine Simulationsdomäne mit glatten Grenzflächen, die aufgrund ihrer konstanten physikalischen Modelle und Eigenschaften in lateraler Richtung im Folgenden als eindimensionale Domäne bezeichnet wird. Deren Grenzflächenrauigkeit ist null im Gegensatz zu den in Abbildung 31 rechts dargestellten 2D-Simulationsdomänen, deren Grenzflächen-

strukturen dem vereinfachten AFM-Profil aus Abbildung 30b entspricht. In beiden Fällen sind die Dicken der einzelnen Schichten in z-Richtung gleich (p: 20 nm / i: 1500 nm / n: 20 nm), da die jeweilige Grenzflächenstruktur um die entsprechende Schichtdicke verschoben wird. Experimentelle REM-Aufnahmen zeigen jedoch eine Verringerung der Rauigkeit mit zunehmender a-Si:H oder $\mu\text{c-Si:H}$ Abscheidung mittels der PEVCD-Technik. Auf diesen Punkt wird im Kapitel 8 näher eingegangen. Der Lichteinfall ist in beiden Fällen das Standardspektrum AM1.5G mit einer Lichtintensität von 100 mW/cm^2 . Der Ursprung der Lichtquelle ist die x-y-Ebene bei $z=0$, wobei die Ausbreitung in positiver z-Richtung erfolgt. Die optischen Randbedingungen für Kanten und Flächen, die senkrecht zur x-y-Ebene stehen, sind auf 100% Reflexion gesetzt.

Abbildung 31 zeigt neben der Struktur auch die Ergebnisse der optischen Generationsratenberechnung mit der Raytracer-Methode für zwei unterschiedlich dimensionierte Simulationsdomänen. Für den eindimensionalen Fall (links) ist aufgrund der Lambert-Beer-Absorption der Generationsratenverlauf exponentiell abfallend, was der Querschnitt in Abbildung 32 auch nochmals verdeutlicht. Desweiteren sind bei 2D-Simulationsdomänen (Abbildung 31) erhöhte Generationsraten zu verzeichnen, die insbesondere bei $\mu\text{c-Si:H}$ Solarzellen säulenartig in der gesamte i-Schicht auftreten. Daraus könnte sich folgern lassen, dass sich durch die erhöhte Ladungsträgerkonzentration zu einem Bereiche erhöhter Rekombination und zum anderen bevorzugte Stromtransportpfade in der i-Schicht ausbilden. Dies könnte Einfluss auf die charakteristi-

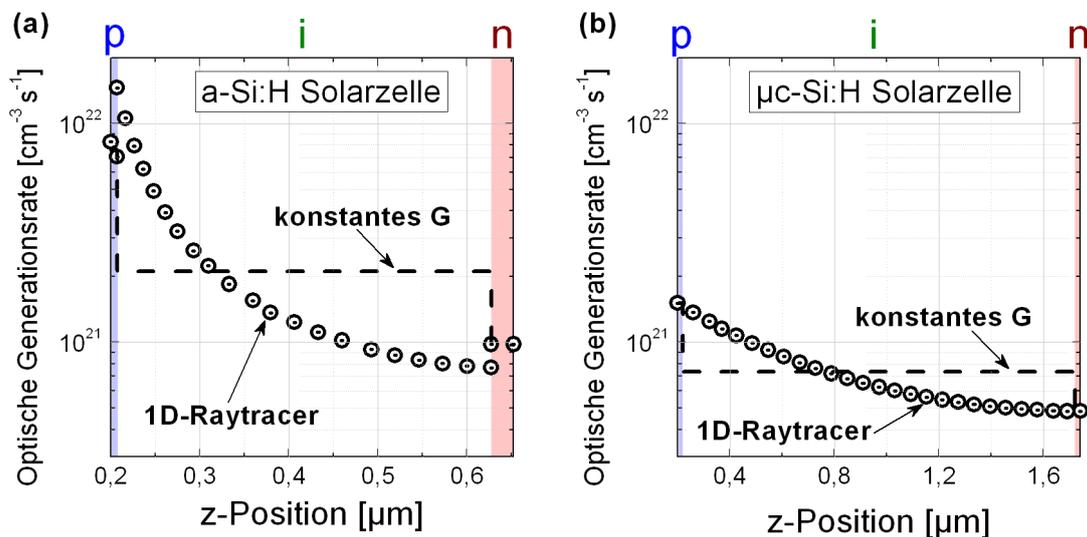


Abbildung 32: Mit der Raytracer-Methode simulierte (Kreissymbole) und als konstant gesetzte (Linie) vertikale Profile der optischen Generationsraten $G(z)$ der 1D-Simulationsdomänen für a-Si:H (a) und $\mu\text{c-Si:H}$ (b) p-i-n Solarzellen. Die konstanten Generationsratenprofile liefern dieselbe Anzahl an photogenerierten Ladungsträgern in den entsprechenden Halbleiterschichten p, i, n wie durch die Raytracer-Methode berechnet.

schen Kenngrößen j_{sc} , V_{oc} und FF der Solarzelle haben.

Um den Einfluss der lateralen Unregelmäßigkeiten des Generationsratenprofils zu untersuchen wird die Raytracer-Methode mit einer variablen Lichtintensität eingesetzt. Somit kann die absolute Anzahl der photogenerierten Ladungsträger verändert werden, das Profil der Generationsrate in Abhängigkeit der TCO-Struktur bleibt jedoch gleich.

Um die gesamte Anzahl der optisch generierten Ladungsträger in einem bestimmten Volumen V , wie beispielsweise das Volumen der i -Schicht, zu vergleichen, kann die photogenerierte Stromdichte j_{ph} wie folgt berechnet werden:

$$j_{ph} = \frac{e}{A} \int_V G(x, y, z) \cdot dV$$

Es ist somit das Volumenintegral der optischen Generationsrate $G(x, y, z)$ einer oder mehrerer Halbleiterschichten. Dabei entspricht e der Elementarladung und A die Grundfläche der Simulationsdomäne in der x - y -Ebene.

Neben der variablen Lichtintensität der Raytracer-Methode wird im Folgenden ebenso der Tabelle 6: Die für diesen Abschnitt 6 verwendeten elektrischen Parameter und Schichtdicken.

| Parameter | | a-Si:H(p) | a-Si:H(i) | a-Si:H(n) | μ c-Si:H(p) | μ c-Si:H(i) | μ c-Si:H(n) |
|-----------------------|--|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|
| n_{dot} | [cm ⁻³] | $3 \cdot 10^{18}$ | 10^5 | $5 \cdot 10^{18}$ | 10^{18} | 10^{10} | 10^{18} |
| χ_0 | [eV] | 3.9 | 3.9 | 3.9 | 3.9 | 3.9 | 3.9 |
| E_{gap} | [eV] | 1.75 | 1.75 | 1.75 | 1.2 | 1.2 | 1.2 |
| N_V, N_L | [cm ⁻³] | $2.5 \cdot 10^{20}$ |
| N_{db} | [eV ⁻¹ cm ⁻³] | $2.6 \cdot 10^{18}$ | $5 \cdot 10^{15}$ | $2.6 \cdot 10^{18}$ | 10^{17} | 10^{15} | 10^{17} |
| σ_{db} | [eV] | 0.2 | 0.2 | 0.2 | 0.2 | 0.2 | 0.2 |
| U | [eV] | 0.3 | 0.3 | 0.3 | 0.3 | 0.3 | 0.3 |
| $\sigma_{db}^{+/-}$ | [cm ²] | 10^{-14} | 10^{-14} | 10^{-14} | 10^{-14} | 10^{-14} | 10^{-14} |
| σ_{db}^0 | [cm ²] | 10^{-16} | 10^{-16} | 10^{-16} | 10^{-16} | 10^{-16} | 10^{-16} |
| N_{tail} | [eV ⁻¹ cm ⁻³] | $7 \cdot 10^{20}$ | $7 \cdot 10^{20}$ | $7 \cdot 10^{20}$ | - | - | - |
| $E_{V,0}$ | [meV] | 167 | 50 | 167 | - | - | - |
| $E_{L,0}$ | [meV] | 83.5 | 25 | 83.5 | - | - | - |
| $\sigma_{tail}^{+/-}$ | [cm ²] | 10^{-14} | 10^{-14} | 10^{-14} | - | - | - |
| σ_{tail}^0 | [cm ²] | 10^{-16} | 10^{-16} | 10^{-16} | - | - | - |
| μ_e | [cm ² V ⁻¹ s ⁻¹] | 5 | 20 | 5 | 20 | 50 | 20 |
| μ_h | [cm ² V ⁻¹ s ⁻¹] | 1 | 5 | 1 | 5 | 10 | 5 |
| Schichtdicke [nm]: | | | | | | | |
| - Einzelzelle | | 7 | 360 | 25 | 20 | 1000 | 30 |
| - Tandemzelle | | 7 | 280 | 20 | 20 | 1500 | 30 |

Fall einer konstanten optischen Generationsrate untersucht, die für die einzelnen Schichtregionen p, i, n vorgegeben werden kann. Abbildung 32 zeigt zwei Beispiele einer konstant gesetzten Generationsrate für a-Si:H (a) und $\mu\text{c-Si:H}$ Solarzellen (b). Die konstanten Raten wurden in beiden Fällen soweit angepasst, dass sie die gleiche Anzahl an photogenerierten Ladungsträgern innerhalb der jeweiligen Halbleiterschicht erzeugen wie mit der Raytracer-Methode (Kreissymbole). j_{ph} stimmt daher in allen Halbleiterregionen mit der Raytracer-Methode überein.

Die für diesen Abschnitt verwendeten elektrischen Materialparameter und Schichtdicken sind in Tabelle 6 aufgeführt.

6.3 Ergebnisse und Diskussion

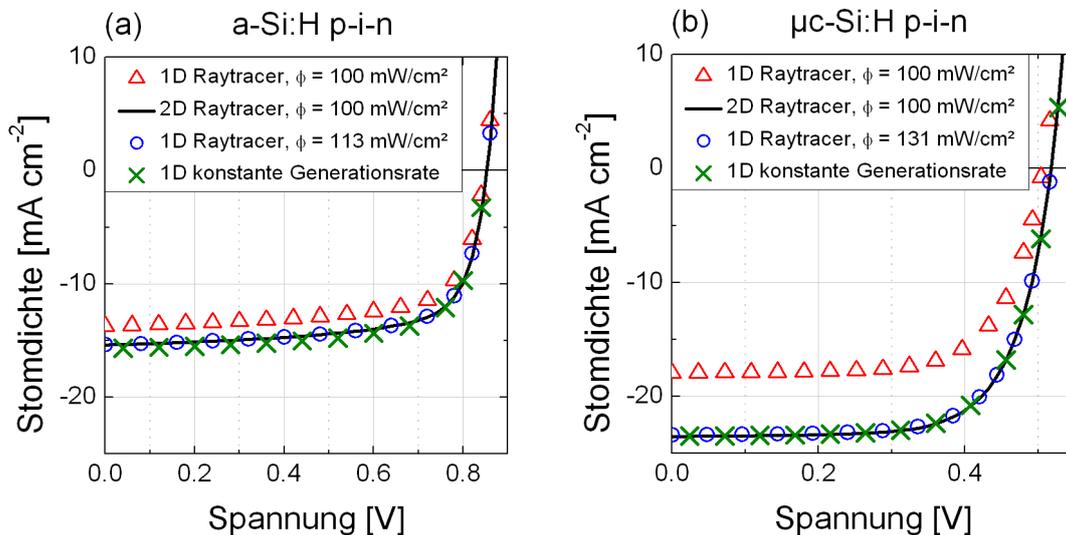


Abbildung 33: IV-Hellkennlinien von a-Si:H (a) und $\mu\text{c-Si:H}$ (b) p-i-n Solarzellen mit unterschiedlichen optischen Generationsratenmodellen. Die Dimension der Simulationsdomäne, das optische Modell und die einfallende Lichtintensität Φ sind in den Legenden aufgeführt

Abbildung 33 stellt die simulierten IV-Hellkennlinien der 1D- und 2D-Simulationsdomänen von a-Si:H (a) und $\mu\text{c-Si:H}$ (b) p-i-n Solarzellen dar, die einerseits mit der Raytracer-Methode und variabler Lichtintensität Φ und andererseits mit einer konstanten optischen Generationsrate berechnet wurden. Vergleicht man Domänen mit glatten (1D) und rauen (2D) Grenzflächen bei gleicher Lichtintensität $\Phi = 100 \text{ mW/cm}^2$, so ist für amorphe sowie mikrokristalline Solarzellen ein deutlicher Anstieg der Kurzschlussstromdichte j_{sc} für den 2D-Fall zu beobachten. Dieses Phänomen kann eindeutig durch die Streueigenschaften und die damit verbundene Wegverlängerung des Lichtstrahls durch die Absorberschicht erklärt werden. Allerdings ist ein Vergleich der Füllfaktoren und Leerlaufspannungen sehr schwierig, da beide ebenfalls von der Anzahl der

photogenerierten Ladungsträger innerhalb der Halbleiterschichten abhängen. Erhöht man im 1D-Fall die Lichtintensität der Raytracer-Methode, so dass die Anzahl der photogenerierten Ladungsträger in den Halbleiterschichten denen des 2D-Modells mit aufgerauten Grenzschichtprofilen gleicht, erhält man eine nahezu perfekte Übereinstimmung der IV-Hellkennlinien (Kreissymbole und schwarze Linie in Abbildung 33). Im Falle der a-Si:H p-i-n Solarzelle beträgt die angepasste Lichtintensität 113 mW/cm^2 , im Falle der $\mu\text{c-Si:H}$ p-i-n Solarzelle 131 mW/cm^2 . Die charakteristischen Kenngrößen j_{sc} , V_{oc} und FF sind nahezu identisch und somit weitestgehend unabhängig vom lateralen Generationsratenprofil.

Ob der Verlauf des vertikalen Generationsratenprofils ebenfalls geringe Auswirkungen auf die IV-Hellkennlinie hat, ist mit den konstant gesetzten optischen Generationsraten (vgl. Abbildung 32) überprüfbar. Auch hier wurde darauf geachtet, dass die Anzahl der photogenerierten Ladungsträger innerhalb den dotierten und intrinsischen Schichten dem 2D-Modell entspricht. Die berechneten IV-Hellkennlinien sind ebenfalls in Abbildung 33 (Kreuzsymbole) dargestellt. Wie schon bei der angepassten Lichtintensität sind die berechneten Hellkennlinien mit konstanten optischen Generationsraten mit denen der 2D-Modelle für a-Si:H und $\mu\text{c-Si:H}$ p-i-n Solarzellen nahezu deckungsgleich. Tabelle 7 und Tabelle 8 stellen die charakteristischen Kenngrößen der modellierten IV-Hellkennlinien aus Abbildung 33 nochmals gegenüber. Es kann festgehalten werden, dass die Anzahl der absorbierten Photonen und damit die Anzahl der photogenerierten Ladungsträger für die elektrische Simulation von entscheidender Bedeutung ist. Die erhöhten Generationsraten in TCO-Senken haben bei homogenen Schichteigenschaften keinen nennenswerten Einfluss auf die IV-Hellkennlinie sowie folglich auf die Effizienz der Solarzellen.

In Tabelle 7 und Tabelle 8 sind ebenfalls die photogenerierten Stromdichten j_{ph} von 3D-Simulationsdomänen aufgelistet, die mit Hilfe der Raytracer-Methode berechnet wurden. Die verwendeten Domänen sind hier nicht weiter abgebildet, allerdings entsprechen die internen Grenzflächen der Struktur aus Abbildung 30c. Durch die Verwendung von 3D-Domänen kann ein weiterer Anstieg von j_{ph} gegenüber den Werten von 2D-Domänen verzeichnet werden. Bei der Raytracer-Methode liegt die Begründung hierfür in der zusätzlichen Raumrichtung, da dadurch der maximale Strahlenweg von zwei gegenüberliegenden Eckpunkten größer ist als im zweidimensionalen Fall. Daher ist es ratsam, die optische Simulation bei dieser Art von Simulationsdomänen mit importierten AFM-Topografien in drei Dimensionen durchzuführen. Andererseits steht der Anstieg von V_{oc} und FF konträr zum vorherigen Vergleich von 1D- und 2D-Simulationsdomänen, bei der nur die photogenerierte Stromdichte j_{ph} , jedoch nicht die Dimensionierung der Simulationsdomänen, Einfluss auf die Hellkennlinienparameter hat. Der große

Tabelle 7: Charakteristische Kenngrößen der IV-Hellkennlinien von a-Si:H p-i-n Solarzellen aus Abbildung 33a mit unterschiedlichen optischen Modellen (Raytracer, konstantes $G(x,y,z)$) und unterschiedlich dimensionierten Subdomänen (1D, 2D, 3D). ϕ entspricht der verwendeten Lichtintensität des AM1.5G-Spektrums.

| Optical model (a-Si:H PIN) | ϕ [mW/cm ²] | j_{ph} [mA/cm ²] | j_{sc} [mA/cm ²] | V_{oc} [V] | FF [%] | η [%] |
|-------------------------------|---------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|-----------------|-----------|---------------|
| 1D Raytracer | 100 | 15.6 | 13.7 | 0.847 | 71 | 8.2 |
| 1D Raytracer | 113 | 17.7 | 15.6 | 0.851 | 71 | 9.4 |
| 1D konstantes $G(x,y,z)$ | --- | 17.6 | 15.7 | 0.850 | 71 | 9.5 |
| 2D Raytracer | 100 | 17.7 | 15.4 | 0.852 | 71 | 9.3 |
| 3D Raytracer | 100 | 18.8 | 16.5 | 0.888 | 74 | 10.9 |
| 1D konstantes $G(x,y,z)$ | --- | 18.8 | 16.6 | 0.851 | 71 | 10.0 |

Tabelle 8: Charakteristische Kenngrößen der IV-Hellkennlinien von μ c-Si:H p-i-n Solarzellen aus Abbildung 33b mit unterschiedlichen optischen Modellen (Raytracer, konstantes $G(x,y,z)$) und unterschiedlich dimensionierten Subdomänen (1D, 2D, 3D). ϕ entspricht der verwendeten Lichtintensität des AM1.5G-Spektrums.

| Optical model (μ c-Si:H PIN) | ϕ [mW/cm ²] | j_{ph} [mA/cm ²] | j_{sc} [mA/cm ²] | V_{oc} [V] | FF [%] | η [%] |
|--------------------------------------|---------------------------------|-----------------------------------|-----------------------------------|-----------------|-----------|---------------|
| 1D Raytracer | 100 | 18.4 | 17.9 | 0.506 | 69 | 6.3 |
| 1D Raytracer | 131 | 24.1 | 23.5 | 0.518 | 70 | 8.5 |
| 1D konstantes $G(x,y,z)$ | --- | 24.1 | 23.5 | 0.518 | 70 | 8.5 |
| 2D Raytracer | 100 | 24.1 | 23.5 | 0.518 | 70 | 8.5 |
| 3D Raytracer | 100 | 25.7 | 25.2 | 0.545 | 81 | 11.1 |
| 1D konstantes $G(x,y,z)$ | --- | 25.7 | 25.1 | 0.521 | 70 | 9.1 |

V_{oc} -Anstieg von mehr als 30 mV ist daher nicht sofort nachvollziehbar. Der Unterschied zur vergleichbaren 1D-Modellierung mit entsprechender konstanter optischer Generationsrate kann durch die nicht sehr fein gewählte Gitterstruktur (mesh) des 3D-Modells erklärt werden. Sehr viel feinere Gitterstrukturen konnten für diese Arbeit jedoch nicht realisiert werden, da entweder die Simulationszeit zu große Dimensionen annimmt oder der verwendete RAM-Speicher (64 GB) der Simulationsrechner nicht ausreichend ist. Es kann daher festgehalten werden, dass die Genauigkeit, aber auch die Rechenzeit von 3D-Domänen sehr stark vom der Gitterausdehnung abhängt, was ein Nachteil gegenüber der 2D-Modellierung ist.

Tabelle 9 zeigt die Simulationsergebnisse von unterschiedlich dimensionierten mikromorphen Tandemsolarzellen und die verwendeten intrinsischen Schichtdicken $d_{a-Si:H(i)}$ bzw. $d_{\mu c-Si:H(i)}$. Die Werte in Klammern wurden mit Hilfe eines 1D-Modells und konstanter optischer Generationsrate berechnet, um charakteristische Kenngrößen j_{sc} , V_{oc} und FF ohne die oben gezeigte Abweichung von 3D-Gitterstrukturen zu erhalten. Aufgrund des Lichtstreuereffekts an den rauen Grenzflächen (light trapping) der 2D- und 3D-Modelle werden mehr photogenerierte Ladungsträger innerhalb der μ c-Si:H(i)-Schicht erzeugt. Daher ist in diesen beiden Fällen eine deutlich

Tabelle 9: Übersicht zur Simulation von mikromorphen Tandemsolarzellen für unterschiedlich dimensionierte Simulationsdomänen mit den intrinsische Schichtdicken $d_{a\text{-Si:H}(i)}$ bzw. $d_{\mu\text{-Si:H}(i)}$ und den photogenerierten Stromdichten in den i-Schichten $j_{\text{ph}, a\text{-Si:H}(i)}$ bzw. $j_{\text{ph}, \mu\text{-Si:H}(i)}$.

| Parameter | Einheit | 1D-Simulation | 2D-Simulation | 3D-Simulation |
|-------------------------------------|--------------------|---------------|---------------|---------------|
| $d_{a\text{-Si:H}(i)}$ | nm | 120 | 210 | 250 |
| $d_{\mu\text{-Si:H}(i)}$ | nm | 1500 | 1500 | 1500 |
| $j_{\text{ph}, a\text{-Si:H}(i)}$ | mA/cm ² | 9.1 | 11.4 | 12.2 |
| $j_{\text{ph}, \mu\text{-Si:H}(i)}$ | mA/cm ² | 9.1 | 11.4 | 12.1 |
| j_{sc} | mA/cm ² | 9.1 | 11.4 | (12.2) |
| V_{oc} | V | 1.296 | 1.327 | (1.333) |
| FF | % | 76 | 73 | (73) |
| η | % | 9.0 | 11.1 | (11.9) |

dickere a-Si:H(i)-Schicht als im 1D-Modell nötig, um eine Stromanpassung der beiden Subzellen zu erhalten. Die Stromanpassung wird deutlich durch die gleichen Werte der photogenerierten Stromdichte innerhalb der i-Schichten $j_{\text{ph}, a\text{-Si:H}(i)}$ und $j_{\text{ph}, \mu\text{-Si:H}(i)}$. Bei der Betrachtung der charakteristischen Kenngrößen j_{sc} , V_{oc} und FF wird offensichtlich, dass sich diese aufgrund der unterschiedlichen a-Si:H(i)-Schichtdicke in 1D, 2D oder 3D deutlich unterscheiden. Hier ist die Schichtdicke von 250 nm des 3D-Modells deutlich realistischer im Vergleich zu experimentellen Tandemsolarzellen, wie sie auch im Forschungsinstitut hergestellt werden [91].

6.4 Zusammenfassung

Die Ergebnisse dieses Abschnitts haben die Einflüsse der Lichtstreuung von Asahi-U Substraten auf simulierte IV-Hellkennlinien von amorphen und mikrokristallinen Siliziumsolarzellen sowie der entsprechenden Tandemstruktur gezeigt. Die Untersuchungen ergaben, dass die Kenngrößen j_{sc} , V_{oc} und FF bei gleicher Gesamtabsorption sowohl vertikal als auch lateral nahezu unabhängig vom konkreten Generationsratenprofil sind. Der Grund dieses Verhaltens liegt in der ausreichend großen Ladungsträgermobilität und den relativ geringen Schichtdicken. Dadurch erreichen nahezu alle photogenerierten Ladungsträger innerhalb der intrinsischen Schicht die entsprechenden dotierten Schichten und können aus der Solarzellenstruktur extrahiert werden. Eine weitaus höhere Relevanz als die lateralen Unterschiede des Generationsratenprofils kann hingegen der absoluten Anzahl der photogenerierten Ladungsträger, die pro Zeiteinheit innerhalb der Halbleiterschichten erzeugt werden, zugeschrieben werden. Es wurde gezeigt, dass aufgrund des Lichtstreuereffekts an den rauen Grenzflächen die Kurzschlussstromdichte deutlich erhöht wird. Im Speziellen muss für die Modellierung von Tandemstrukturen dieser Effekt möglichst präzise simuliert werden, da erst dadurch eine Voraussage der optimalen Schichtdickenanpassung mit Hilfe der Simulation erfolgen kann. Wie gezeigt, ist

bei der Verwendung von 3D-Simulationsdomänen und importierten AFM-Oberflächentopographien der berechnete Photostrom am größten, was seinen Ursprung in der zusätzlichen Raumrichtung gegenüber 2D-Simulationsdomänen hat. Daher sollte für die optische Modellierung und Verwendung der Raytracer-Methode auf 3D-Simulationen zurückgegriffen werden, da diese die reale Solarzellenstruktur genauer abbilden können. Für die elektrische Modellierung ist es allerdings ausreichend die berechneten Generationsraten auf 1D-Domänen zu reduzieren, um verlässliche IV-Hellkenlinien zu erhalten und somit nicht an die Grenzen der zur Verfügung stehenden Rechenleistung der verwendeten Computer zu stoßen. Um dennoch vollständig gekoppelte photoelektrische Simulation mit dreidimensionalen Simulationsdomänen durchführen zu können, wird in Kapitel 7 die Verwendung von elektrischen Subdomänen vorgestellt.

7 Verwendung von Subdomänen zur elektrischen 3D-Modellierung

Die Anzahl der Gitterpunkte für die im vorherigen Abschnitt 6 gezeigten 1D- und 2D-Simulationsdomänen liegt im Bereich von 1.000 bis 20.000, was eine Rechenzeit von wenigen Sekunden bis mehreren 10 Minuten zur Folge hat. Für 3D-Simulationsdomänen hingegen wächst die Anzahl der virtuellen Gitterpunkte umso rascher an, je feiner die Auflösung der Grenzflächenstrukturen aus den AFM-Aufnahmen und je größer die Volumenausdehnung in x- und y-Richtung sind. Für die optische Simulation muss die Auflösung so klein wie möglich und die Volumenausdehnung der virtuellen Probe so groß wie möglich sein, um sowohl die Lichtstreuung an den rauen Grenzflächen korrekt berechnen zu können als auch die Berechnungsfehler aufgrund der Randeffekte zu minimieren. Es hat sich allerdings herausgestellt, dass die elektrische Modellierung mit den relativ großen und gitterpunktreichen Simulationsdomänen der Optik nur extrem zeitaufwendig bis überhaupt nicht durchgeführt werden kann. Der Grund hierfür liegt in der begrenzten Speicherkapazität der Simulationsrechner und der maximalen Gitterpunktanzahl von 200.000 seitens der Simulationssoftware Sentaurus TCAD.

In diesem Abschnitt wird eine neue Strategie bezüglich der Kopplung von optischer und elektrischer Modellierung vorgestellt, mit der sich die Simulationszeiten durch die Verwendung von Subdomänen erheblich verringern lassen und die eine exaktere Berechnung von Solarzellen mit aufgerauten TCO-Oberflächen zulässt. Mit dieser Strategie der Modellierung von Dünnschichtsolarzellen auf rauen Substraten kann die AFM-Auflösung der TCO-Oberfläche wesentlich höher gewählt werden als im vorherigen Abschnitt 6 gezeigt. Ein Vergleich von simulierten und experimentell gemessenen Hellkennlinien von a-Si:H p-i-n Solarzellen wird aufgezeigt und die Streubreite der experimentellen Kennlinien wird diskutiert.

7.1 Simulationsdetails

Für die optische Modellierung wurde die FDTD-Methode verwendet, deren Ergebnisse mit der Raytracer-Methode im Folgenden verglichen werden, um die Resultate der berechneten Generationsrate aus Kapitel 6 einordnen zu können. An den Seitenflächen der 3D-Simulationsdomäne gelten periodische Randbedingungen bezüglich der Optik. Die Validierung und weitere Details zur optische Modellierung wurden von Lacombe et al. [21] veröffentlicht. Die in diesem Abschnitt verwendeten elektrischen Materialparameter und Schichtdicken sind in Tabelle 10 aufgeführt.

Tabelle 10: Die für diesen Abschnitt 7 verwendeten elektrischen Parameter und Schichtdicken.

| Parameter | | a-Si:H(p) | a-Si:H(i) | a-Si:H(n) |
|------------------------------|--|----------------------|----------------------|----------------------|
| n_{dot} | [cm ⁻³] | 10 ¹⁹ | 10 ¹⁰ | 10 ¹⁹ |
| χ_0 | [eV] | 3.9 | 3.9 | 3.9 |
| E_{gap} | [eV] | 1.75 | 1.75 | 1.75 |
| N_V, N_L | [cm ⁻³] | 2.5·10 ²⁰ | 2.5·10 ²⁰ | 2.5·10 ²⁰ |
| N_{db} | [eV ⁻¹ cm ⁻³] | 10 ¹⁸ | 10 ¹⁵ | 10 ¹⁸ |
| σ_{db} | [eV] | 0.2 | 0.2 | 0.2 |
| U | [eV] | 0.3 | 0.3 | 0.3 |
| $\sigma_{\text{db}}^{+/-}$ | [cm ²] | 10 ⁻¹⁴ | 10 ⁻¹⁴ | 10 ⁻¹⁴ |
| σ_{db}^0 | [cm ²] | 10 ⁻¹⁵ | 10 ⁻¹⁵ | 10 ⁻¹⁵ |
| N_{tail} | [eV ⁻¹ cm ⁻³] | 10 ²¹ | 10 ²¹ | 10 ²¹ |
| $E_{V,0}$ | [meV] | 167 | 50 | 167 |
| $E_{L,0}$ | [meV] | 83.5 | 25 | 83.5 |
| $\sigma_{\text{tail}}^{+/-}$ | [cm ²] | 10 ⁻¹⁴ | 10 ⁻¹⁴ | 10 ⁻¹⁴ |
| σ_{tail}^0 | [cm ²] | 5·10 ⁻¹⁵ | 5·10 ⁻¹⁵ | 5·10 ⁻¹⁵ |
| μ_e | [cm ² V ⁻¹ s ⁻¹] | 5 | 20 | 5 |
| μ_h | [cm ² V ⁻¹ s ⁻¹] | 1 | 5 | 1 |
| Schichtdicke | [nm] | 7 | 420 | 25 |

7.2 Ergebnisse und Diskussion

Optische Simulation

Abbildung 34a zeigt das berechnete Generationsratenprofil der FDTD-Simulation an einer 3D-Simulationsdomäne mit der internen Grenzflächenstruktur der AFM-Messung aus Abbildung 29. Die Ausdehnung der a-Si:H p-i-n Solarzellenstruktur in x- und y-Richtung beträgt für

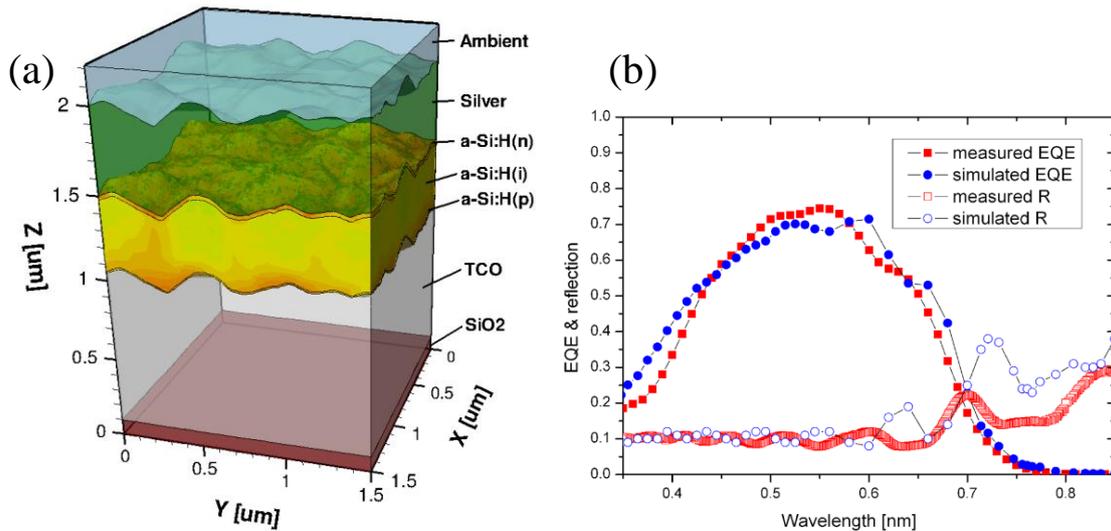


Abbildung 34: (a) Optische Simulationsdomäne einer a-Si:H p-i-n Solarzelle auf Asahi-U Substrat. Die interne Grenzflächenstruktur entspricht einem 1.5 µm x 1.5 µm Ausschnitt der AFM-Messung aus Abbildung 29. In den Siliziumschichten ist die berechnete Generationsrate dargestellt, wobei deren Größenordnung der Legende in Abbildung 35 entspricht. (b) Gegenüberstellung von experimentell bestimmter EQE bzw. Reflexion (rote Rechtecksymbole) und simulierter optischer EQE bzw. Reflexion (blaue Kreissymbole). [21]

die optische Domäne 1.5 µm x 1.5 µm. Diese Dimensionierung ist notwendig, um die Lichtstreuungseigenschaften der rauen Grenzflächen mit experimentellen ADF-Messungen (angular distribution function) vergleichen zu können [21]. Es gilt für die optische Modellierung daher: Je größer die Domänenausdehnung, desto exakter die Nachbildung der Lichtstreuung. Dass die hier verwendete Simulationdomäne zu relativ guten Übereinstimmungen von experimentellen Ergebnissen der Reflexion und EQE führt zeigt Abbildung 34b. Allerdings entsprechen die Simulationsergebnisse der optischen EQE ohne Berücksichtigung von Rekombinationsprozessen in der i-Schicht. Die Gesamtdicken der a-Si:H Schichten wurden mit Hilfe von FIB-Schnitten und REM-Aufnahmen bestimmt und in der Umsetzung der Simulation nicht weiter angepasst, was die leichten Unterschiede in den Interferenzmaxima und -minima erklärt.

Um einen Vergleich der optischen Generationsratenmodelle Raytracer und FDTD zu erhalten, sind in Abbildung 35 zwei Querschnitte der Struktur abgebildet. Es wird deutlich, dass die beiden Profile lokale Unterschiede aufweisen, jedoch ist der Trend der erhöhten Generationsrate in TCO-Senken bei beiden Methoden deutlich zu erkennen. Der vergrößerte Kreisausschnitt zeigt jedoch, dass insbesondere mit der Raytracer-Methode in der p-Schicht niedrigere Generationsraten berechnet werden als mit Hilfe der FDTD-Methode. Zudem ist bei der FDTD-Methode das Generationsratenprofil kontinuierlicher. Da mit FDTD zudem Interferenzeffekte berücksichtigt werden können, empfiehlt es sich diese Methode als Standard in der Modellierung von Dünnschichtsolarzellen festzulegen. Um elektrische Einflüsse oder eine Abschätzung

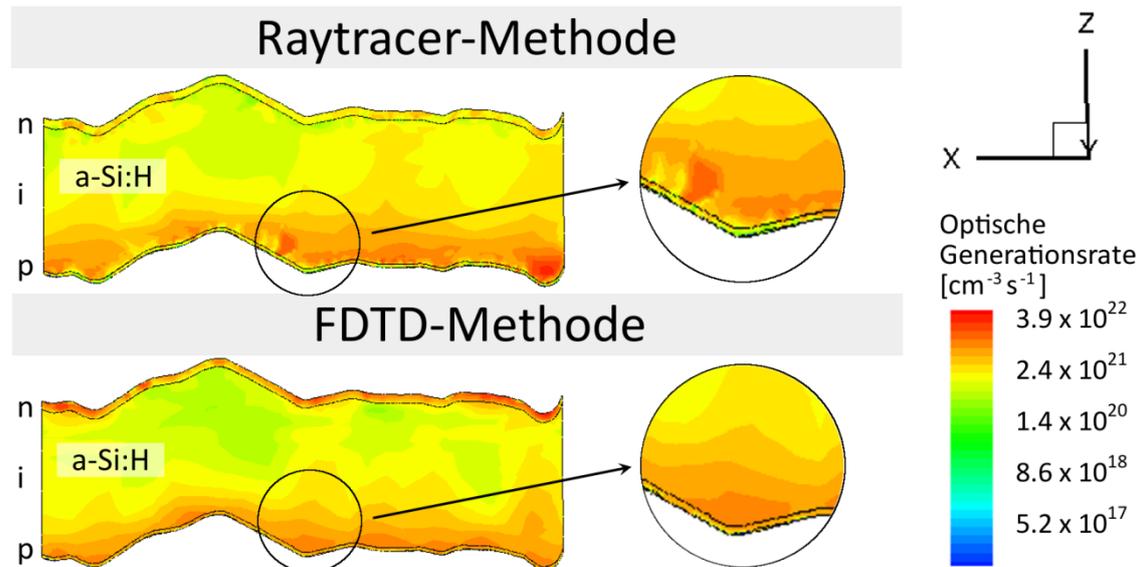


Abbildung 35: Querschnitte der 3D-Simulationsdomäne einer a-Si:H p-i-n Solarzelle an der Stelle $y = 750$ nm und die berechneten optischen Generationsraten mit der Raytracer- und der FDTD-Methode.

von neuen Strukturen zu erhalten ist die wesentlich schnellere Raytracer-Methode jedoch meist ausreichend. Wie im vorherigen Abschnitt 6 gezeigt ist die Anzahl der photogenerierten Ladungsträger entscheidend und nicht deren lokale Verteilung. Leichte Diskrepanzen verfälschen die Ergebnisse der elektrischen Modellierung von IV-Hellkennlinien daher nicht wesentlich.

Elektrische Simulation

Sentaurus TCAD zerlegt die virtuelle Simulationsdomäne in viele finite Elemente mit Hilfe eines Gitternetzes (mesh). Die Spezifikation der Gitterstruktur ist ausschlaggebend für die Genauigkeit der elektrischen Simulation. Ist die Gitterstruktur zu grob gewählt, so wird die Genauigkeit dadurch reduziert oder das numerische Näherungsverfahren konvergiert nicht. Für die optische Simulationsdomäne aus Abbildung 34a konnte kein zufriedenstellendes Gitternetz für die elektrische Simulation gefunden werden, da ein zu grobes Gitternetz beachtliche Berechnungsfehler des Ladungsträgertransports und der Rekombinationsrate zur Folge hat, wie auch die 3D-Simulation in Abschnitt 6.3 zeigt. Simulationsdomänen mit sehr feinen Gitternetzen hingegen können mit den zur Verfügung stehenden Simulationsrechnern nicht berechnet werden. Bei der Verwendung von Subdomänen werden nur Teile aus der optische Simulationsdomäne extrahiert, wie in Abbildung 36a zu sehen. Zum einen wird die Ausdehnung in y-Richtung mit einer variablen Breite w reduziert, die längere Seite in x-Richtung beträgt hier weiterhin $1.5 \mu\text{m}$. Zum anderen werden nur die Siliziumschichten berücksichtigt und alle weiteren Schichten vernachlässigt. Für die elektrische Kontaktierung können die freiliegenden rauen Oberflächen

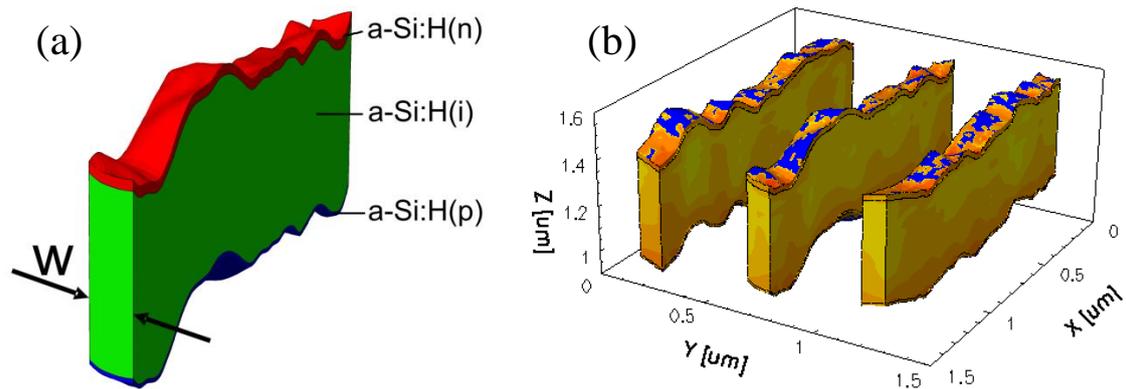


Abbildung 36: (a) Für die elektrische Simulation erstellte Subdomäne der optischen 3D-Simulationsdomäne aus Abbildung 34a. (b) Drei Subdomänen mit interpolierter Generationsrate an unterschiedlichen y-Positionen und jeweils einer y-Ausdehnung von 100 nm.

der dotierten Schichten mit idealen elektrischen Kontakten versehen werden, was den elektrischen Widerstand der ursprünglichen Kontaktschichten aus TCO und Silber vernachlässigt. Allerdings ist dieser in vertikaler Richtung bei den hier verwendeten Schichtdicken sehr klein und daher vernachlässigbar.

Auf das Volumen der erstellten Subdomäne kann im darauffolgenden Schritt die vorher berechnete Generationsrate übertragen werden. Abbildung 36b zeigt drei Subdomänen mit einer Breite $w = 100$ nm an unterschiedlichen y-Positionen mit dem entsprechenden Generationsratenprofil aus Abbildung 34a. Im Folgenden wird der Einfluss des reduzierten Volumens der Siliziumschichten bezüglich der Genauigkeit der elektrischen Modellierung dargestellt. Hierfür wird die Breite w der mittleren Subdomäne ($y = 0.750 \mu\text{m}$) variiert. Abbildung 37 zeigt die

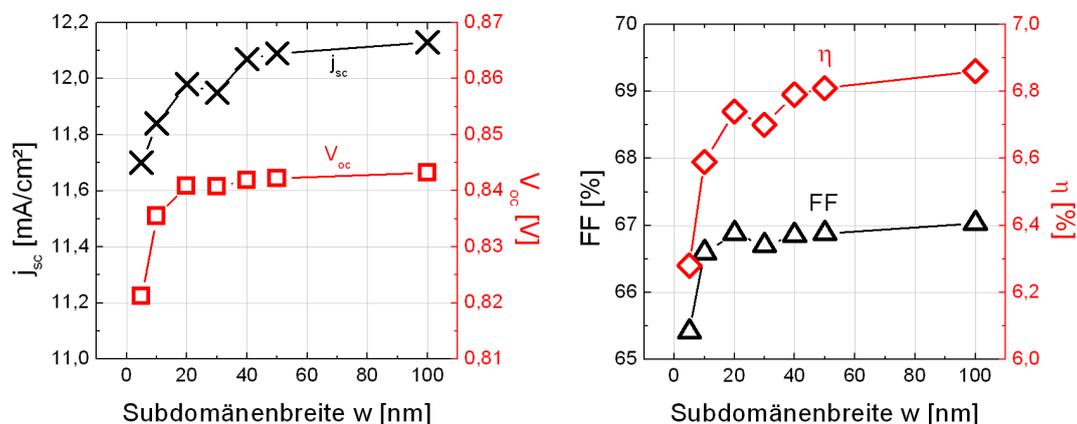


Abbildung 37: Die charakteristischen Kenngrößen der simulierten Subdomäne als Funktion der y-Ausdehnung w .

charakteristischen Parameter der simulierten Hellkennlinien als Funktion der Breite w . Für alle Werte kann eine Sättigung ab einer y -Ausdehnung von mehr als 40 nm verzeichnet werden. Dies kann damit erklärt werden, dass einerseits ab einem gewissen Volumenanteil hinreichend über die lokalen Unterschiede der optischen Generationsrate gemittelt wird. Andererseits stellen sich ab einer gewissen Domänenausdehnung gleichbleibende Gitterpunktabstände in den einzelnen Regionen ein. Diese werden vom Benutzer der Simulationssoftware durch die Vorgaben von maximalen und minimalen Gitterpunktabständen in x -, y - und z -Richtung festgelegt, wobei das endgültige Gitternetz unter Berücksichtigung der festgelegten Kriterien mit Hilfe der Software und des implementierten Mesh-Generators (snmesh) berechnet wird. Die in diesem Abschnitt verwendeten Wertebereiche von minimalen und maximalen Gitterpunktabständen sind in Tabelle 11 aufgeführt. Die Simulationszeit der elektrischen Modellierung von Subdomänen mit einer Breite $w = 100$ nm und den in Tabelle 11 aufgeführten Wertebereiche der Gitterpunktabstände liegt im Bereich von 10-20 Minuten und kann somit als Standard für weitere Simulationen festgehalten werden.

Tabelle 11: Verwendete Wertebereiche der minimalen und maximalen Gitterpunktabstände, welche als Eingangsparameter des verwendeten Mesh-Generators (snmesh) dienen. Δx_{\max} symbolisiert dabei den Maximalwert und Δx_{\min} Minimalwert der Gitterpunktabstände in x -Richtung (y - und z -Richtung analog). Der Wert w entspricht der variablen Subdomänenausdehnung in y -Richtung.

| Materialregion | Δx_{\max} [nm] | Δy_{\max} [nm] | Δz_{\max} [nm] | Δx_{\min} [nm] | Δy_{\min} [nm] | Δz_{\min} [nm] |
|-----------------------|--|--|--|--|--|--|
| a-Si:H(p) | 1500 | w | 10 | 1 | 1 | 1 |
| a-Si:H(i) | 1500 | w | 20 | 1 | 1 | 1 |
| a-Si:H(n) | 1500 | w | 10 | 1 | 1 | 1 |

Aufgrund der dreidimensionalen Struktur der virtuellen Solarzelle weist die Generationsrate lokale Unterschiede auf und ist abhängig von der TCO-Struktur. Um eine durchschnittliche Strom-Spannungs-Charakteristik der gesamten optischen Subdomäne aus Abbildung 34a zu erhalten, zeigt Abbildung 38a die simulierten IV-Hellkennlinien der drei Subdomänen aus Abbildung 36b. Der Vergleich von drei experimentell bestimmten IV-Hellkennlinien mit entsprechender Solarzellenstruktur zeigt eine sehr gute Übereinstimmung, was den verwendeten elektrischen Parametersatz und die optische Modellierung mit Hilfe der FDTD-Methode an importierten AFM-Topographiemessungen validiert.

Jedoch muss eine gute Übereinstimmung der simulierten Ergebnisse mit experimentell ermittelter IV-Charakteristik einer Solarzelle aus dem Herstellungsprozess nicht notwendigerwei-

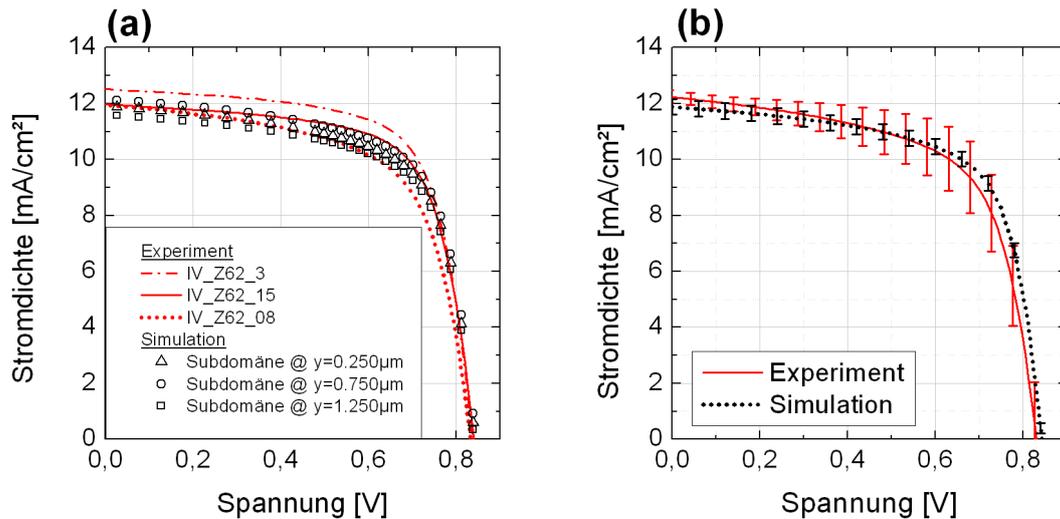


Abbildung 38: (a) Drei experimentelle und drei mit Subdomänen simulierte IV-Hellkennlinien. Insbesondere die experimentelle Kennlinie IV_Z62_15 (rote durchgezogene Linie) und die modellierte Subdomäne bei $y = 0.750 \mu\text{m}$ zeigen eine gute Übereinstimmung. (b) Vergleich der gemittelten IV-Hellkennlinien (Linien) von acht realen Solarzellen aus einem Herstellungsprozess und den drei Subdomänen aus (a). Die Fehlerbalken entsprechen den ermittelten Standardabweichungen.

se das gesamte Experiment widerspiegeln. Abbildung 38b zeigt die durchschnittliche IV-Hellkennlinie der drei modellierten Subdomänen (schwarze Linie). Die Fehlerbalken entsprechen den berechneten Standardabweichungen und sind ein Indiz für die relativ kleinen Unterschiede der endgültigen Simulationsergebnisse bezüglich der Subdomänenposition. Desweiteren ist die gemittelte IV-Hellkennlinie von acht experimentell bestimmten Strom-Spannungs-Charakteristiken und deren Standardabweichung abgebildet. Die acht Solarzellen wurden gemeinsam auf ein $10 \times 10 \text{ cm}^2$ Substrat abgeschieden, so dass die experimentell ermittelten Schichtdicken und TCO-Oberflächenstruktur für alle Simulationsdomänen gleich gesetzt wurden. Die Standardabweichungen im Bereich des Maximum-Power-Point zeigen die relativ großen Schwankungen der elektrischen Materialeigenschaften von experimentellen a-Si:H Schichten, die mit Hilfe der PECVD-Technologie am EWE-Forschungszentrum für Energietechnologie e.V. abgeschieden wurden. Die Homogenitätsschwankungen bezüglich der Dicke und Störstellendichte deponierter Absorberschichten konnten in Kapitel 4 bereits erfolgreich interpretiert und eingeschätzt werden. Es empfiehlt sich daher für die elektrische Simulation Wertebereiche für die elektrischen Eingangsparameter zu definieren, um eine verlässliche Prognose von Strom-Spannungs-Kennlinien erstellen zu können. Die AFM-Topographiemessung an einer Stelle des Asahi-U Substrates, mit einem lateralen Messbereich von $1.5 \mu\text{m} \times 1.5 \mu\text{m}$, ist für die optische Simulation hingegen ausreichend, so dass das durchschnittliche Strukturprofil genügend berücksichtigt wird. Dies wird durch die relative kleine Standardabweichung im Kurzschlussfall der experimentellen und simulierten Hellkennlinien bestätigt.

7.3 Zusammenfassung

Die vollständig gekoppelte optische und elektrische Simulation von dreidimensionalen Simulationsdomänen ist im Vergleich zu 1D- und 2D-Simulationen eine sehr rechenintensive Methode, was in deren Umsetzung an die Grenzen der zur Verfügung stehenden Rechenleistung stoßen kann. Diese Problematik wurde anhand von 3D-Domänen diskutiert, deren Grenzflächenstrukturen experimentell ermittelten AFM-Messungen entsprachen. Eine soft- und hardwarebedingte Limitierung der Domänenausdehnung liegt am benötigten Gitternetz, welches die virtuelle TCAD-Domänenstruktur in finite Elemente zerlegt. Mit steigender Anzahl der Gitterpunkte verlängern sich die Rechenzeiten entsprechend bis zur Unlösbarkeit des mathematischen Problems. Für die optische Modellierung ist für diese Art von Simulationsdomänen mit integrierter AFM-Grenzflächenstruktur eine laterale Ausdehnung von mehr als einem Mikrometer notwendig, um die Lichtstreuungseigenschaften rauer Asahi-U Substrate mit Hilfe der FDTD-Methode exakt abzubilden. Für die elektrische Modellierung können Domänenausdehnungen dieser Größenordnungen mit einem ausreichend feinen Gitternetz nicht ohne weiteres erstellt werden, ohne die Grenze der softwarebedingten maximalen Gitterpunktzahl zu überschreiten. Es wurde daher für die elektrische Modellierung eine neue Strategie mit Hilfe von elektrischen Subdomänen entwickelt, die lediglich einen Teil des ursprünglichen optischen Simulationsdomänenvolumens berücksichtigen, so dass die Anzahl der Gitterpunkte deutlich verringert werden kann. Der Vergleich von simulierten IV-Hellkennlinien und experimentellen Daten führte zu einer sehr guten Übereinstimmung und Validierung der Subdomänenstrategie. Zudem wurde die Interpretation von elektrischen Simulationsergebnissen und deren Vergleichbarkeit mit experimentellen Messungen diskutiert. Hieraus folgte, dass die Modellierung mit einem festen elektrischen Parametersatz nicht ohne weiteres den gesamten Herstellungsprozess der PECVD-Technologie abbilden kann. Mögliche Schwankungen von Homogenität und Qualität der abgechiedenen Schichten müssen in der elektrischen Simulation, wie in Kapitel 4 beschrieben, berücksichtigt werden. Die AFM-Topographiemessung an einer Stelle des Asahi-U Substrates, mit einem lateralen Messbereich von $1.5 \mu\text{m} \times 1.5 \mu\text{m}$, ist für die optische Simulation hingegen ausreichend, was durch die relativ kleine Standardabweichung von experimentellen und simulierten Kurzschlussstromdichten gezeigt werden konnte.

8 a-Si:H p-i-n Solarzellen auf TCO-Nanosäulenstrukturen

In diesem Abschnitt werden 2D- und 3D-Simulationen von a-Si:H Solarzellen auf nanosäulenstrukturierten TCO-Oberflächen präsentiert. Es wird gezeigt, welchen Einfluss die Geometrie von dicht gepackten Nanosäulenstrukturen auf die Lichtstreuung innerhalb der Halbleiterschichten und somit auf die Hellkennlinie von Dünnschichtsolarzellen hat. Außerdem erfolgt die Darstellung von Verringerungen der Leerlaufspannung und des Füllfaktors aufgrund des isotropen Wachstums der Halbleiterschichten, falls die Nanosäulenstrukturen nicht dicht gepackt auf dem Substrat aufgebracht werden und Zwischenräume auftreten.

8.1 Experiment

ZnO-Nanosäulen können mittels eines elektrochemischen Abscheidungsprozesses auf einem Glassubstrat, welches bereits eine gesputterte ZnO-Schicht als Saatschicht besitzt, hergestellt werden. Eine detaillierte Beschreibung des Herstellungsprozesses beschreiben Tena-Zaera et al. [92]. Die Nanosäulensubstrate wurden in Kooperation mit der Universität Bremen hergestellt, die Halbleiter- und Metallschichten wurden am EWE-Forschungszentrum abgeschieden [93]. Der durchschnittliche Durchmesser der Nanosäulen (NR: nanorod) kann durch die Prozessierungsdauer beeinflusst werden und ist für die verschiedenen hergestellten Proben in Tabelle 12 zusammengefasst.

Tabelle 12: Substratinformationen und intrinsische Schichtdicken verschiedener hergestellter a-Si:H p-i-n Solarzellen.

| Probennummer | TCO | Prozessierungsdauer | durchschnittlicher NR-Durchmesser | i-Schicht |
|--------------|----------------|---------------------|-----------------------------------|-----------|
| REF1 | geätztes ZnO | - | - | 300 nm |
| REF 2 | geätztes ZnO | - | - | 100 nm |
| NR1 | ZnO-Nanosäulen | 1 Stunde | ≈ 100 nm | 300 nm |
| NR2 | ZnO-Nanosäulen | 2 Stunden | ≈ 200 nm | 300 nm |
| NR3 | ZnO-Nanosäulen | 1 Stunde | ≈ 100 nm | 200 nm |
| NR4 | ZnO-Nanosäulen | 1 Stunde | ≈ 100 nm | 100 nm |

Abbildung 39a und Abbildung 39b zeigen REM-Aufnahmen der hergestellten Nanosäulenoberflächen NR1 und NR2, die sich in der Prozessierungsdauer unterscheiden. Daraus wird ersichtlich, dass der durchschnittliche Nanosäulendurchmesser von Probe NR2 im Vergleich zu Probe NR1 erheblich größer ist. Desweiteren unterschieden sich die beiden Proben in der Dichte ihrer Nanosäulenstruktur und somit in der Rauigkeit der Oberfläche. Die teilweise weniger dicht gepackte Nanosäulenstruktur von Probe NR2 hat einen signifikanten Einfluss auf die Solarzelleneffizienz, was im Zusammenhang mit zweidimensionalen Simulationen im Abschnitt 8.3 genauer diskutiert wird. Darüber hinaus ist in Abbildung 39c die Oberfläche eines 300 nm dicken a-Si:H p-i-n Schichtstapels zu sehen, der auf das Substrat NR1 abgeschieden wurde. Die Aufnahme zeigt eine Stelle ohne aufgedampften Silber-Rückkontakt. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Nanosäulenstruktur komplett mit einer geschlossenen Schicht aus amorphem Silizium überzogen ist, was aufgrund des isotropen Wachstums der Halbleiterschichten durch den verwendeten PECVD-Prozess eine Oberflächenglättung zur Folge hat. Das isotrope Wachstum hängt mit den verwendeten Prozessparametern zusammen [94] und wird für die Simulation als ein konstantes Schichtwachstum bezüglich der Oberflächennormalen angesetzt. Abbildung 40 zeigt REM-Aufnahmen von FIB-Schnitten zur Verifizierung des isotropen Wachstums von a-Si:H Schichten, die mit Hilfe der PECVD-Technik am EWE-Forschungsinstitut auf TCO-Substrate abgeschieden werden. Die linke Abbildung offenbart im Querschnitt das isotrope Wachstum einer a-Si:H Abscheidung an einer TCO-Kante. Die a-Si:H Schicht zeigt senkrecht zur TCO-Schicht eine nahezu identische Schichtdicke, so dass die Annahme des isotropen Wachstums als richtig angenommen werden kann. Vergleicht man Wachstumseigenschaften der abgeschiedenen Silberschicht, die mit Hilfe der Elektronenstrahlverdampfung deponiert wurde, wird ein anisotropes Wachstum durch die verminderte Schichtdicke an der Flanke der Kantenstruktur deutlich. Grund ist der gerichtete Verdampfungsstrahl bei dieser Technik. Die rechte Abbildung zeigt den Querschnitt von Probe NR4. Auch hier ist das isotrope Wachstum der a-Si:H Schicht auf den TCO-Nanosäulen deutlich sichtbar.

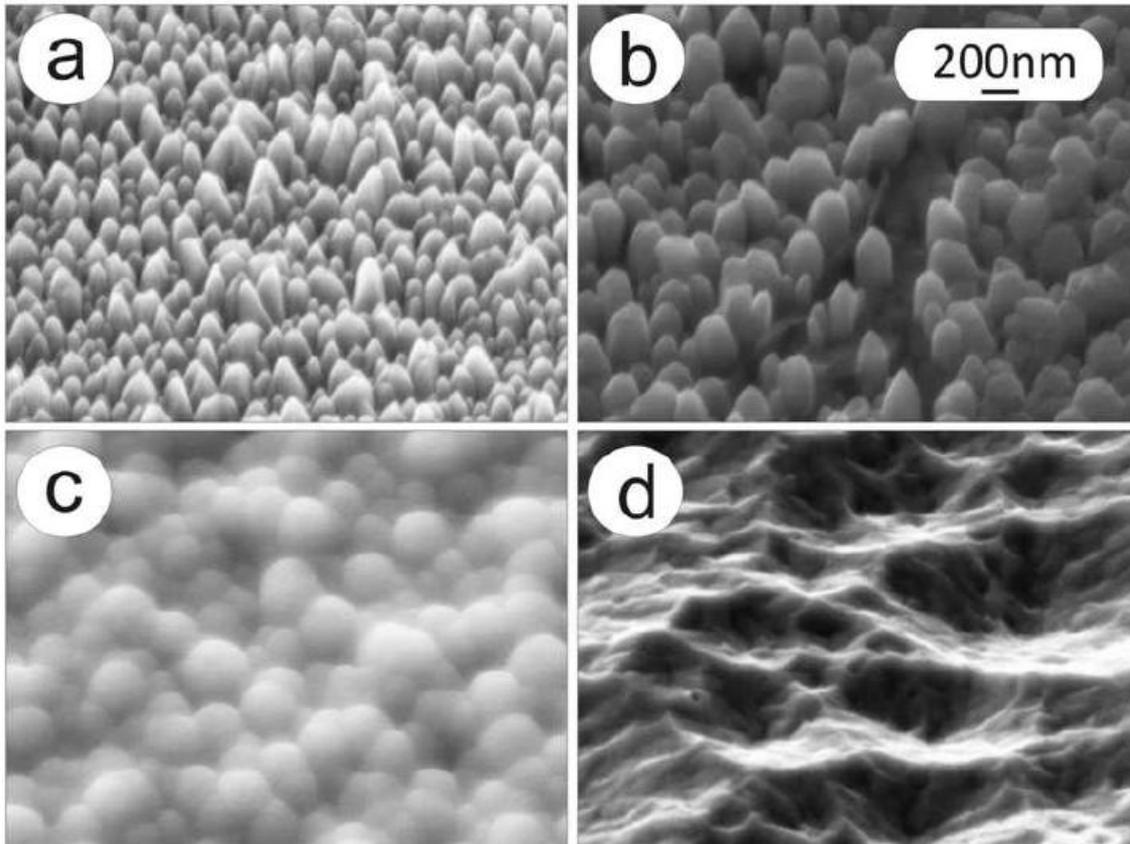


Abbildung 39: Aufnahmen eines hochauflösenden Rasterelektronenmikroskops (Probenneigung: 45°) von (a) der Nanosäulenoberfläche von Probe NR1, (b) der Nanosäulenoberfläche von Probe NR2, (c) der Oberfläche der abgeschiedenen a-Si:H Schichten ohne Silber-Rückkontakt und (d) der nasschemisch geätzten TCO-Oberfläche (REF1 & REF2).

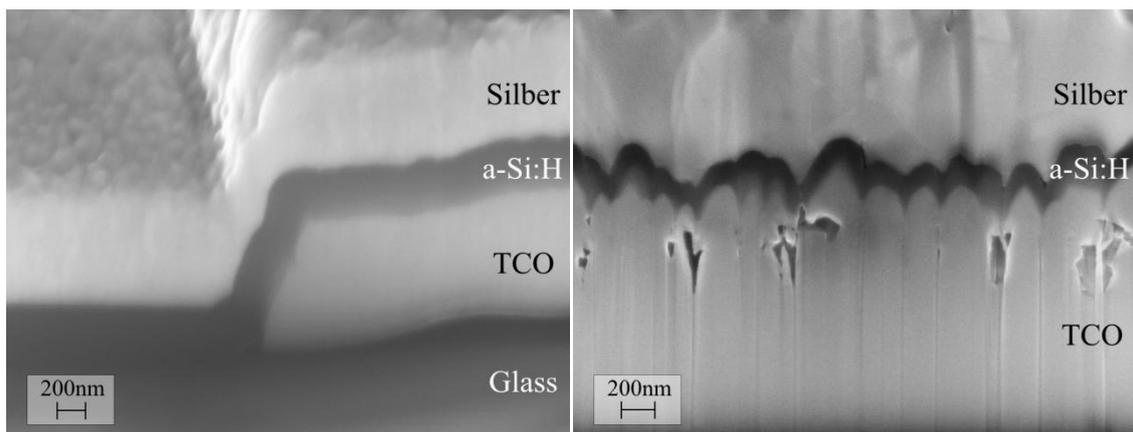


Abbildung 40: REM-Aufnahmen von FIB-Schnitten zur Verifizierung des isotropen Wachstums von a-Si:H Schichten an einer TCO-Kante (links) und auf der TCO-Nanosäulenstruktur NR4 (rechts).

8.2 Simulationsdetails

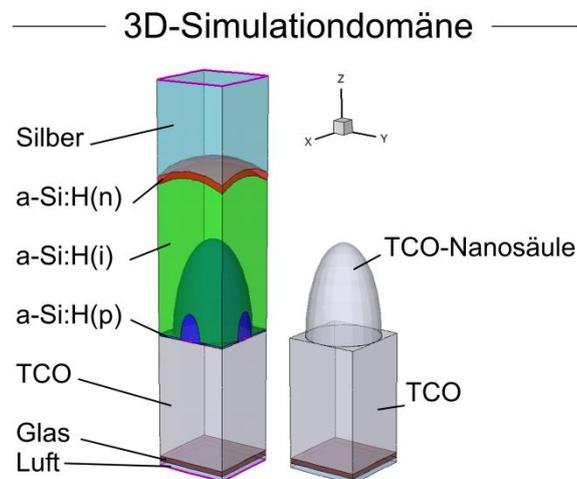


Abbildung 41: Einheitszelle der dreidimensionalen Simulationsdomäne mit (links) und ohne (rechts) a-Si:H p-i-n Solarzelle.

Für den ersten Simulationsabschnitt werden die verschiedenen Nanosäulendurchmesser und die damit verbundene Krümmung berücksichtigt. Abbildung 41 zeigt repräsentativ eine dreidimensionale Simulationsdomäne mit (links) und ohne (rechts) der weiteren Silber- und a-Si:H Schichten. Das TCO-Halbellipsoid auf der flachen TCO-Saatschicht verkörpert in diesem Fall die durchschnittliche Form einer Nanosäule, wobei die Geometrie der Ellipsoide anhand der REM-Aufnahmen aus Abbildung 39 und Abbildung 40 in Abhängigkeit von den durchschnittlichen Nanosäulendurchmessern (Tabelle 12) abgeleitet wurde. Wie die Messungen in Abbildung 40 zeigen, kann zudem ein isotropes Wachstum der Halbleiterschichten angenommen werden. Daher ist die Form der Halbellipsoide für die abgeschiedenen a-Si:H Schichten so angepasst, dass die jeweilige Schichtdicke bezüglich der Oberflächennormalen konstant ist. Eine Bestätigung dieser Annahme legt zudem Abbildung 39c dar, bei der sich ebenfalls die Krümmung der aufgetragenen Halbleiterschichten gegenüber der ursprünglichen Substratoberflächenstruktur deutlich vergrößert. Aufgrund der gesetzten Randbedingungen von 100% Reflexion der vertikalen Außenflächen simuliert dieses Modell sehr dicht gepackte Nanosäulenstrukturen und ist vergleichbar mit Oberflächenstruktur der Probe NR1. Insbesondere die Auswirkungen der Lichtstreuungseigenschaften in Abhängigkeit der Nanosäulendurchmesser werden mit diesem Modell im Folgenden näher untersucht. Die Simulationsdetails sind zudem vergleichbar mit denen in den Kapiteln 6 und 7 gezeigten a-Si:H p-i-n Solarzellen auf Asahi-U Substraten, da die Rauigkeiten der Substratoberflächen in den gleichen Größenordnungen liegen.

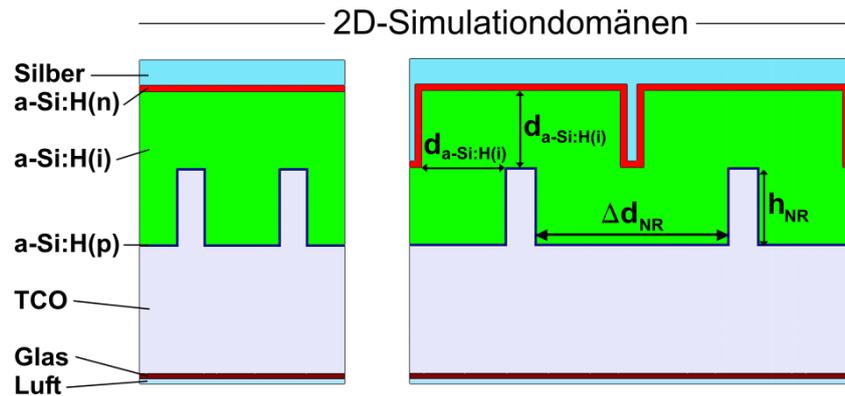


Abbildung 42: Zwei Beispiele der zweidimensionalen Simulationsdomäne mit einem Nanosäulenabstand Δd_{NR} von 300 nm (links) und 700 nm (rechts). Die abgebildeten Domänen zeigen dieselbe Nanosäulenhöhe $h_{NR} = 300$ nm und eine intrinsische Schichtdicke $d_{a-Si:H(i)} = 300$ nm.

Im zweiten Simulationsabschnitt liegt der Fokus auf den elektrischen Solarzeleigenschaften auf Nanosäulenstrukturen mit deutlichen Abständen zu ihren Nachbarn. Ein experimentelles Beispiel für weniger dicht gepackte Nanosäulenstrukturen zeigt die REM-Aufnahme der Probe NR2 in Abbildung 39b im Vergleich zu Probe NR1 in Abbildung 39a. Abbildung 42 zeigt zwei Beispiele der für diese Untersuchung erstellten zweidimensionalen Simulationsdomänen, wobei die Nanosäulenabstände Δd_{NR} variieren. Aufgrund des auch hier verwendeten isotropen Wachstums der Halbleiterschichten kann es wie in der linken Abbildung vorkommen, dass sich der Zwischenraum der zwei Nanosäulen komplett mit intrinsischem a-Si:H füllt. Erst wenn der Abstand Δd_{NR} mehr als das Doppelte der a-Si:H(i)-Schichtdicke beträgt, können die a-Si:H(n)- und Silberschichten ebenfalls in die Zwischenräume abgeschieden werden (Abb. rechts). Im Gegensatz zur 3D-Simulation wird hier auf die Krümmung der Nanosäulenspitzen und somit die Lichtstreuung verzichtet, da lediglich rechteckige Strukturen für die Nanosäulenabbildung verwendet werden. Allerdings soll die 2D-Modellierung die Auswirkungen der räumlichen Nanosäulenverteilung und deren Höhe auf die elektrischen Solarzellenparameter verdeutlichen und diese klar von Lichtstreuereffekten entkoppeln. So werden nicht zwei Effekte miteinander vermischt und die Interpretation der Simulationsergebnisse wird dadurch wesentlich erleichtert.

Für die optischen Simulationen wurde in diesem Kapitel die Raytracer-Methode verwendet, so dass Interferenzeffekte nicht berücksichtigt werden. Die elektrische 3D-Modellierung wurde zudem mit der Strategie von Subdomänen (vgl. Kapitel 7) durchgeführt. Somit werden nur die a-Si:H Schichten und lediglich ein Achtel der ursprünglichen optischen 3D-Simulationsdomäne aus Abbildung 41 (links) berücksichtigt. Alle weiteren elektrischen Eingangsparameter und Schichtdicken sind in Tabelle 13 aufgeführt.

Tabelle 13: Die für diesen Abschnitt 8 verwendeten elektrischen Parameter und Schichtdicken.

| Parameter | | a-Si:H(p) | a-Si:H(i) | a-Si:H(n) |
|------------------------------|--|-------------------|-------------------|-------------------|
| n_{dot} | $[\text{cm}^{-3}]$ | 10^{19} | 10^{10} | 10^{19} |
| χ_0 | $[\text{eV}]$ | 3.9 | 3.9 | 3.9 |
| E_{gap} | $[\text{eV}]$ | 1.75 | 1.75 | 1.75 |
| N_V, N_L | $[\text{cm}^{-3}]$ | 10^{21} | 10^{21} | 10^{21} |
| N_{db} | $[\text{eV}^{-1}\text{cm}^{-3}]$ | 10^{18} | $4 \cdot 10^{15}$ | 10^{18} |
| σ_{db} | $[\text{eV}]$ | 0.2 | 0.2 | 0.2 |
| U | $[\text{eV}]$ | 0.3 | 0.3 | 0.3 |
| $\sigma_{\text{db}}^{+/-}$ | $[\text{cm}^2]$ | 10^{-14} | 10^{-14} | 10^{-14} |
| σ_{db}^0 | $[\text{cm}^2]$ | 10^{-15} | 10^{-15} | 10^{-15} |
| N_{tail} | $[\text{eV}^{-1}\text{cm}^{-3}]$ | $3 \cdot 10^{20}$ | $3 \cdot 10^{20}$ | $3 \cdot 10^{20}$ |
| $E_{V,0}$ | $[\text{meV}]$ | 167 | 50 | 167 |
| $E_{L,0}$ | $[\text{meV}]$ | 83.5 | 25 | 83.5 |
| $\sigma_{\text{tail}}^{+/-}$ | $[\text{cm}^2]$ | 10^{-14} | 10^{-14} | 10^{-14} |
| σ_{tail}^0 | $[\text{cm}^2]$ | 10^{-15} | 10^{-15} | 10^{-15} |
| μ_e | $[\text{cm}^2 \text{V}^{-1}\text{s}^{-1}]$ | 5 | 20 | 5 |
| μ_h | $[\text{cm}^2 \text{V}^{-1}\text{s}^{-1}]$ | 1 | 5 | 1 |
| Schichtdicke | $[\text{nm}]$ | 7 | -variabel- | 25 |

8.3 Ergebnisse und Diskussion

Abbildung 43a stellt den Vergleich der experimentell bestimmten IV-Hellkennlinien der Proben Ref1, NR1 und NR2 dar. Wie bereits in Tabelle 12 aufgeführt, besitzen alle Proben eine intrinsische Schichtdicke von 300 nm und unterscheiden sich nur in der Beschaffenheit der TCO-Fensterelektrode. Die IV-Hellkennlinien demonstrieren deutlich die vergleichbare Lichtstreuung des nanosäulenstrukturierten TCOs von Probe NR1 und dem nasschemisch geätzten TCO der Probe Ref1, da die Kurzschlussströme j_{sc} vergleichbare Werte annehmen. Zudem zeigt die etwas erhöhte Leeraufspannung V_{oc} (Steigerung von etwa 20 mV) von Probe NR1, dass mögliche negative Grenzflächeneigenschaften bei dieser Art von Nanosäulenstrukturen nicht auftreten und in der Modellierung nicht zusätzlich berücksichtigt werden müssen.

Die experimentellen Ergebnisse zeigen bei der Probe NR1 gegenüber der nasschemisch geätzten Probe Ref1 eine leicht verbesserte Lichteinkopplung. Allerdings ist diese abhängig von der Nanosäulenstruktur, wie Probe NR2 zeigt. Diese wurde im selben Prozessdurchlauf wie die beiden anderen Proben hergestellt, sodass alle drei präsentierten Proben denselben Schichtstapel (p-i-n) mit identischen Schichtdicken besitzen. Jedoch zeigen alle charakteristischen Kenngrößen j_{sc} , V_{oc} und FF von Probe NR2 reduzierte Werte gegenüber der Probe NR1. Der Unter-

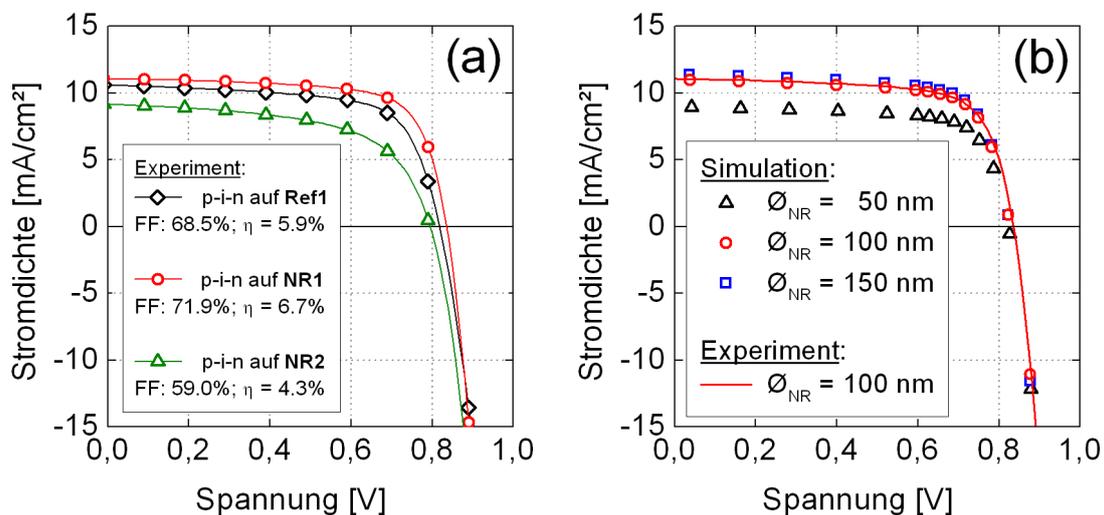


Abbildung 43: (a) Experimentelle IV-Hellkennlinien von a-Si:H p-i-n Solarzellen mit einer 300 nm dicken intrinsischen Schicht auf nasschemisch geätztem TCO (Ref1: schwarze Rauten) und zwei unterschiedlichen TCO-Nanosäulenstrukturen (NR1: rote Kreise; NR2: grüne Dreiecke). (b) Simulierte IV-Hellkennlinien von a-Si:H p-i-n Solarzellen auf Nanosäulenstrukturen mit verschiedenen Nanosäulendurchmessern \varnothing_{NR} und einer festen intrinsischen Schichtdicke von 300 nm. Zudem ist die experimentell ermittelte IV-Hellkennlinie von Probe NR1 (rote Linie) abgebildet.

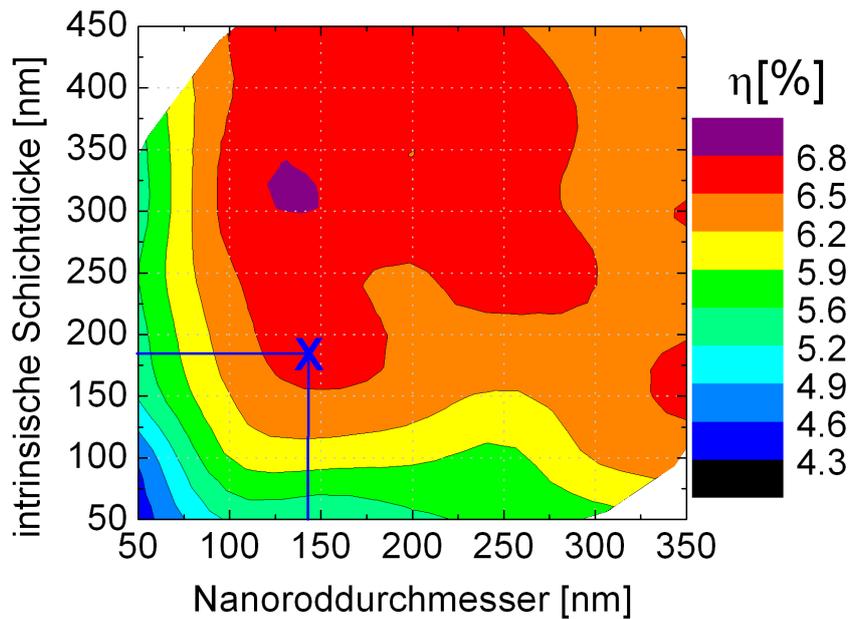


Abbildung 44: Berechnete Solarzelleneffizienz η als Funktion des Nanosäulendurchmessers und der intrinsischen Schichtdicke. Das blaue X markiert die optimale Kombination aus Nanosäulendurchmesser und möglichst geringer i-Schichtdicke zur Reduzierung des Staebler-Wronski-Effekts.

schied von Probe NR2 liegt in der längeren Prozessdauer der Nanosäulen-Synthese. Dies führt zu größeren Nanosäulendurchmessern und einer weniger dicht gepackten Struktur, was in den REM-Aufnahmen in Abbildung 39b zu erkennen ist. Der Unterschied in j_{sc} ist größtenteils verknüpft mit der Lichtstreuung und deren Einkopplung in die Halbleiterschichten und kann mit der folgenden 3D-Simulation erklärt werden. Die Abweichungen von V_{oc} und FF stehen hingegen in einem engen Zusammenhang mit den elektrischen Solarzeleigenschaften, auf die mittels der 2D-Simulationen auf Seite 84 ff. eingegangen wird.

Die drei mit der 3D-Simulationsdomäne simulierten IV-Hellkennlinien in Abbildung 43b manifestieren deutlich den Einfluss der Nanosäulendurchmesser auf die Solarzelleneffizienz, wobei unter Berücksichtigung des isotropen Wachstums alle Domänen dieselbe intrinsische Schichtdicke von 300 nm besitzen. Zudem zeigt die Abbildung die Validierung des erstellten Modells durch eine Übereinstimmung des Simulationsergebnisses für Nanosäulendurchmesser $\varnothing_{NR} = 100$ nm (rote Kreise) und experimenteller Hellkennlinie der Probe NR1 (rote Linie). Die weiteren Simulationen mit dem kalibrierten Modell für unterschiedliche Nanosäulendurchmesser weisen jedoch lediglich Unterschiede in der Kurzschlussstromdichte j_{sc} auf, wobei V_{oc} und FF nahezu unabhängig bleiben.

Ein bedeutendes Leistungsmerkmal, welches die verbesserte Lichteinkopplung widerspiegelt, ist die berechnete Solarzelleneffizienz η , die in Abbildung 44 als Funktion des Nanosäu-

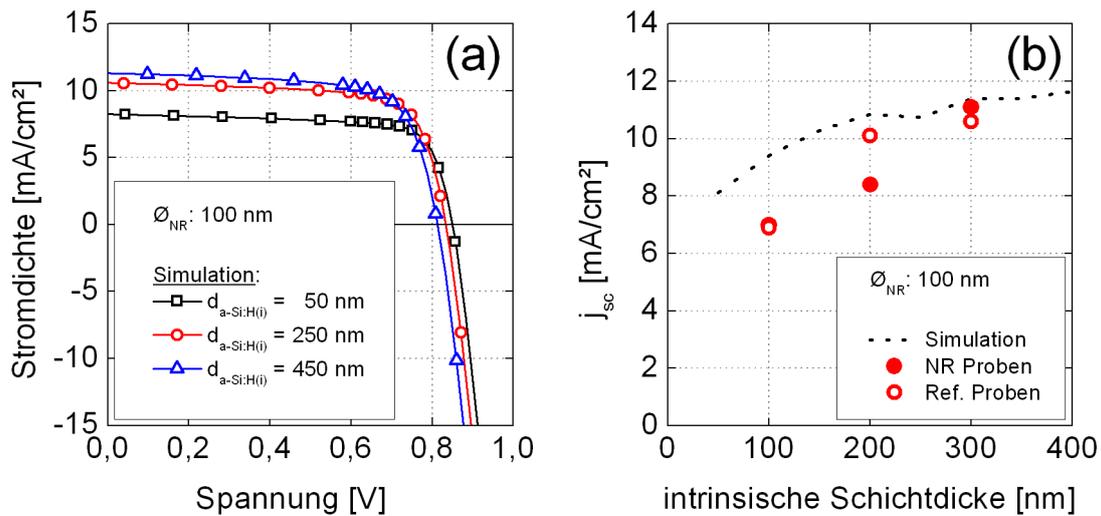


Abbildung 45: (a) Simulierte IV-Hellkennlinien von a-Si:H p-i-n Solarzellen auf nanosäulenstrukturiertem TCO mit konstantem Nanosäulendurchmesser $\varnothing_{\text{NR}} = 100 \text{ nm}$ bei variierender i-Schichtdicke $d_{\text{a-Si:H(i)}}$. (b) Kurzschlussstromdichten j_{sc} als Funktion der i-Schichtdicke. Die schwarze gestrichelte Linie zeigt den modellierten Trend für Nanosäulendurchmesser von ebenfalls 100 nm im Vergleich zu experimentell ermittelten Werten (gefüllte Symbole: auf Nanosäulenstrukturen; nicht-gefüllte Symbole: auf nasschemisch geätzten TCO).

lensäulendurchmessers und der intrinsischen Schichtdicke dargestellt ist. Es wird dadurch offensichtlich, dass Nanosäulen mit einem durchschnittlichen Durchmesser von weniger als 100 nm zu einer starken Abnahme von η führen kann. Für größere Durchmesser, d.h. für Durchmesser über 200 nm , bleibt η nahezu konstant und verringert sich nur leicht. Ein lokales Maximum der Effizienz ist bei einer i-Schichtdicke von ca. 320 nm und einem Nanosäulendurchmesser von ca. 130 nm zu erkennen. Berücksichtigt man jedoch, dass sich die lichtinduzierte Degradation von a-Si:H Solarzellen für dünnere a-Si:H(i)-Schichten verringert, so ist die optimale Kombination von hohen Effizienzen und dünnen i-Schichten von besonderem Interesse. Aufgrund der Simulationsergebnisse kann daher die optimale Kombination für Nanosäulendurchmesser von ca. 140 nm und einer i-Schichtdicke von ca. 180 nm prognostiziert werden, wobei mit dieser Kombination immer noch 90% des Wertes des lokalen Effizienzmaximums erreicht werden und eine lichtinduzierte Degradation kaum noch zu erwarten ist. Unter Berücksichtigung der Langzeitstabilität von Silizium-Dünnschicht solarzellen wird in dieser Kombination ein optimaler Wirkungsgrad erreicht.

Abbildung 45a zeigt drei simulierte IV-Hellkennlinien von a-Si:H p-i-n Solarzellen auf identischen Nanosäulenstrukturen mit einem durchschnittlichen Durchmesser von 100 nm und verschiedenen intrinsischen Schichtdicken. Dünne i-Schichten ($d_{\text{a-Si:H(i)}} = 50 \text{ nm}$) führen aufgrund des geringeren Volumens des Absorbermaterials zu einer reduzierten Kurzschlussstromdichte. Aufgrund der höheren optischen Generationsrate pro Halbleitervolumen steigt allerdings auch

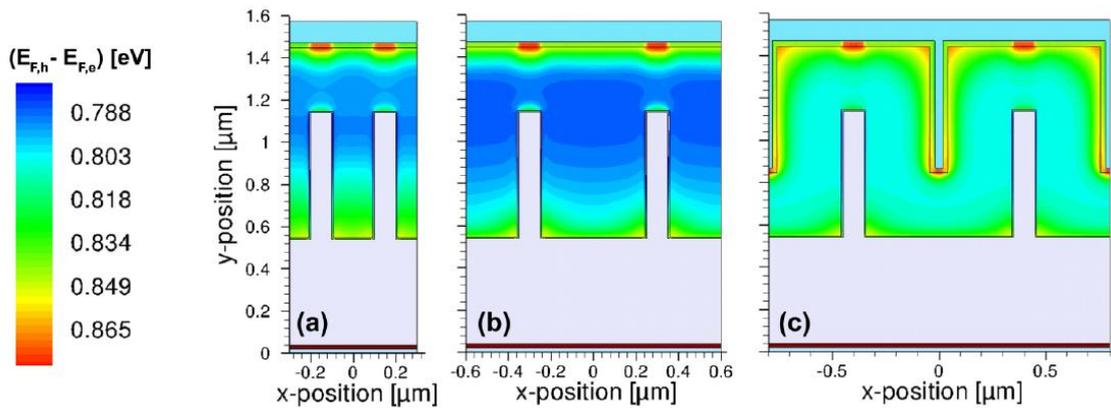


Abbildung 46: Berechnete Differenz der Quasi-Fermi-Niveaus von Löchern und Elektronen ($E_{F,h} - E_{F,e}$) für drei Simulationsdomänen mit unterschiedlichen Nanosäulenabständen unter Beleuchtung und offenen Kontakten.

die Leerlaufspannung [46]. Die Effizienz der Solarzellen verhält sich somit in Abhängigkeit der Schichtdicke wie bereits in Abbildung 44 gezeigt.

Um die Simulationsergebnisse weiter zu verifizieren, sind in Abbildung 45b zusätzliche experimentelle und simulierte Messdaten der Kurzschlussstromdichte aufgeführt. Der berechnete Trend ist vergleichbar mit den experimentellen Daten von Solarzellen mit variierender i-Schichtdicke und ist unabhängig von nasschemisch geätztem (Ref) und nanosäulenstrukturierter (NR) TCOs. In beiden Fällen ist der Effekt der i-Schichtreduktion auf j_{sc} etwas ausgeprägter als von der Simulation erwartet. Die hier vorgestellten Nanosäulenstrukturen unterscheiden sich aufgrund ihres direkten Kontakts von freistehenden Einzelsäulen, wie sie beispielsweise in Publikationen von Vanecek et al. zu finden sind [95]. Wie sich im Folgenden zeigen wird, benötigt dieses Konzept der sogenannten „gefalteten Solarzelle“ Nanosäulenstrukturen mit einem durchschnittlichen Nanosäulenabstand, der mehr als das Doppelte der Siliziumschichtdicken beträgt, damit sich die erhöhte Photonenabsorption auch in der Solarzelleneffizienz widerspiegeln kann.

Auf den Effekt unterschiedlicher Nanosäulenabstände bezüglich der elektrischen Transporteigenschaften von Dünnschicht solarzellen wird mit Hilfe der bereits vorgestellten 2D-Simulationsdomäne näher eingegangen. Die Charakteristik der internen Bandverbiegung innerhalb der intrinsischen Schicht hängt hauptsächlich vom effektiven Abstand der p- und dotierten Schichten und demzufolge der intrinsischen Schichtdicke ab. Allerdings ist die Verteilung des elektrostatischen Potentials für die 2D-Simulationsdomäne komplexer als für eindimensionale Simulationsdomänen, da laterale Unterschiede aufgrund der zusätzlichen Nanosäulengeometrien mit in die Berechnungen einfließen. Aus dem gleichen Grund ist auch die Aufspaltung der berechneten Quasi-Fermi-Niveaus (QFN) von Elektronen ($E_{F,e}$) und Löcher ($E_{F,h}$)

Tabelle 14: Aus den simulierten IV-Hellkennlinien berechneten Kurzschlussstromdichten j_{sc} , Leerlaufspannungen V_{oc} und Füllfaktoren FF der drei Solarzellenstrukturen aus Abbildung 46.

| Simulationsdomäne | j_{sc} [mA/cm ²] | V_{oc} [mV] | FF [%] |
|-------------------|--------------------------------|---------------|--------|
| Abbildung 46a | 5.0 | 795 | 73 |
| Abbildung 46b | 8.2 | 781 | 64 |
| Abbildung 46c | 11.3 | 802 | 73 |

innerhalb der intrinsischen Schicht im eindimensionalen Fall deutlich einfacher zu interpretieren. Wie bereits in Abbildung 8 auf Seite 14 für a-Si:H p-i-n Solarzellen unter Beleuchtung und offenen Kontakten gezeigt, entspricht die Differenz der QFNs ($E_{F,h} - E_{F,e}$) dem Produkt aus Elementarladung und Leerlaufspannung [68]. Dies gilt für den eindimensionalen Fall nahezu in der gesamten i-Schicht, da $E_{F,e}$ bzw. $E_{F,h}$ fast über das gesamte intrinsische Volumen konstant ist. Bei zweidimensionalen Simulationsdomänen mit ausgeprägten Substratstrukturen gilt dieses Verhalten allerdings nicht mehr. Drei Beispiele mit derart ausgeprägten Substratstrukturen sind in Abbildung 46 dargestellt, bei denen die i-Schichtdicke jeweils 300 nm, die Nanosäulenhöhe jeweils 600 nm und deren Abstände (a) 200 nm, (b) 600 nm und (c) 700 nm betragen.

Die räumliche Verteilung der QFN-Differenz resultiert aus dem komplexen Zusammenspiel von Ladungsträgerdrift/-diffusion, optischer Generation und Rekombination, was mit Sentaurus TCAD numerisch für die gesamte Struktur gelöst werden kann. Die in Abbildung 46 berechneten QFN-Aufspaltungen machen deutlich, dass mit größer werdendem Nanosäulenabstand die Differenz $E_{F,h} - E_{F,e}$ in den Zwischenräumen der Säulen kleiner wird (vgl. (a) und (b)). Erst im Falle der gefalteten Solarzelle (c) gelangen die Schichten aus a-Si:H(n) und Silber wieder durch die verschiedenen Depositionsprozesse in die Nanosäulen-Zwischenräume, was in einer homogenen internen Potentialverteilung resultiert. Der Ladungsträgertransport der photogenerierten Ladungsträger in der i-Schicht ist somit nicht mehr vornehmlich vertikal, sondern kann an den Flanken der Nanosäulen ebenso horizontal erfolgen. Dadurch verringert sich der effektive Transportweg in den Nanosäulen-Zwischenräumen erheblich, was eine verringerte Rekombinationsrate in diesem Bereich und dementsprechend eine erhöhte Ladungsträgerdichte in der quasistationären Betrachtung zur Folge hat. Die damit verbundene vergrößerte Aufspaltung der QFNs wird in Abbildung 46c durch die erhöhte Differenz wiedergegeben und sorgt wiederum für eine erhöhte Leerlaufspannung. Aber auch die Kurzschlussstromdichte und der Füllfaktor der gefalteten Solarzelle erhöhen sich gegenüber des Solarzellentyps (b). Dies wird durch die Auflistung der charakteristischen Kenngrößen aller drei Simulationsdomänen in Tabelle 14 verdeutlicht.

Abbildung 47 fasst die Resultate weiterer Simulationen mit variierenden Nanosäulenabständen von 0 bis 700 nm bezüglich der Leerlaufspannung und des Füllfaktors zusammen. ΔV_{oc}

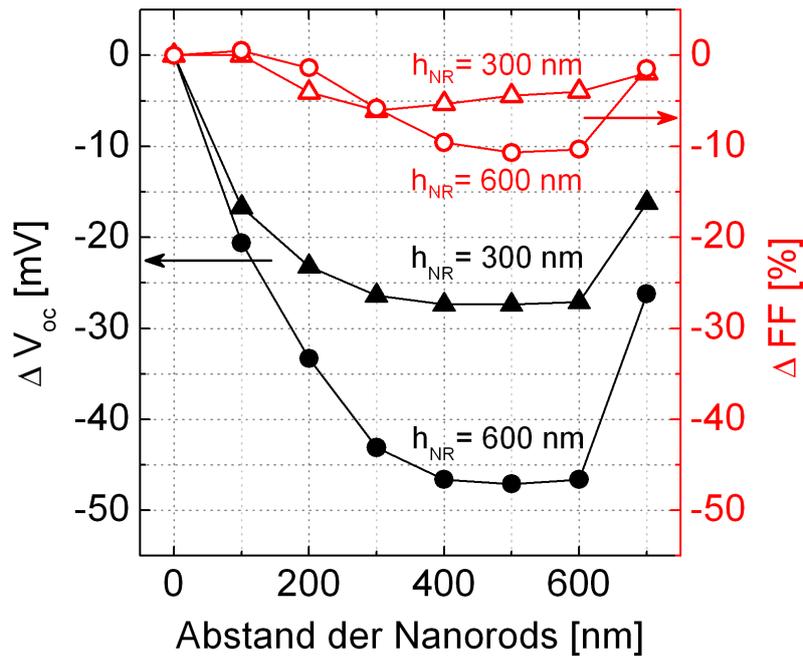


Abbildung 47: Berechnete Differenz von V_{oc} (schwarze gefüllte Symbole) und FF (rote nicht-gefüllte Symbole) in Bezug auf Simulationsdomänen mit Nanosäulenabständen $\Delta d_{NR} = 0$ als Funktion des Nanosäulenabstands. Dreieckige Symbole repräsentieren die Ergebnisse für Nanosäulenhöhen $h_{NR} = 300$ nm und kreisförmige Symbole diejenigen für $h_{NR} = 600$ nm.

(schwarze gefüllte Symbole) und ΔFF (rote nicht-gefüllte Symbole) zeigen die Differenzen der beiden Werte V_{oc} und FF im Hinblick auf die Simulationsergebnisse mit glatten Grenzflächen als Funktion des Nanosäulenabstands. Für alle Simulationsdomänen wurde eine intrinsische Schichtdicke von 300 nm angenommen. Neben dem generellen Absinken von V_{oc} und FF mit zunehmendem Nanosäulenabstand kann weiterhin beobachtet werden, dass dieser Effekt für größere Nanosäulenhöhen h_{NR} ausgeprägter erscheint (dreieckige Symbole: $h_{NR} = 300$ nm; runde Symbole: $h_{NR} = 600$ nm). Im Falle der gefalteten Solarzelle (Abstand der Nanosäulen > 600 nm) hingegen kann in allen vier gezeigten Fällen erneut ein deutlicher Anstieg der beiden Kenngrößen registriert werden, was durch die oben erwähnten verbesserten Transporteigenschaften zu erklären ist.

Diese Ergebnisse zeigen klar, dass der Trend von verringertem V_{oc} und FF in beiden Fällen mit dem vollständigen Füllen der Nanosäulen-Zwischenräume mit Absorbermaterial (i-Schicht) begründet werden kann, welches aus der verwendeten PECVD-Technik und dem damit verbundenen isotropen Wachstum der a-Si:H Schichten folgt. Weiterhin zeigen die Ergebnisse, dass auch die Höhe der nicht dicht gepackten Nanosäulenstrukturen eine entscheidende Rolle für die charakteristischen Kenngrößen spielt und mit ansteigender Höhe h_{NR} der Einfluss auf V_{oc} und FF ausgeprägter ist. Erst im Falle der gefalteten Solarzelle, also bei einem Mindestabstand der

Nanosäulen von mehr als dem Doppelten der Siliziumschichtdicken, verbessern sich wieder die Transporteigenschaften für die photogenerateden Ladungsträger in der i-Schicht und die Aufspaltung der QFN wird wieder maximiert.

Abbildung 48 zeigt die Abhängigkeit der Leerlaufspannung V_{oc} vieler 2D-Simulationsdomänen mit unterschiedlichen Oberflächenrauigkeiten, bei denen die Nanosäulenhöhe h_{NR} und deren Abstände Δd_{NR} in einem großen Wertebereich variiert wurden. Die Oberflächenrauigkeit rms wurde gemäß der folgenden Formel für Impulsfolgen berechnet [96]:

$$rms = h_{NR} \cdot \sqrt{\frac{\phi_{NR}}{\phi_{NR} + \Delta d_{NR}}}$$

Abbildung 48 zeigt somit das kontinuierliche Abfallen von V_{oc} mit zunehmender Oberflächenrauigkeit für Solarzellen mit a-Si:H(i)-Schichtdicken von 300 nm mit konstantem Nanosäulendurchmesser $\phi_{NR} = 100$ nm. Der Effekt ist umso ausgeprägter, je größer die Nanosäulenhöhe ausfällt. Allerdings ist für Rauigkeiten $rms \approx 50$ nm das Abfallen von V_{oc} nahezu vernachlässigbar. Diese Beobachtung deckt sich mit den Simulationen aus Kapitel 6, in denen die experimentell bestimmte Oberflächenrauigkeit von ca. 50 nm des Asahi-U Substrates ebenfalls keine negativen Auswirkungen auf die Solarzelleneffizienz hat. Die Abbildung zeigt daher für die expe-

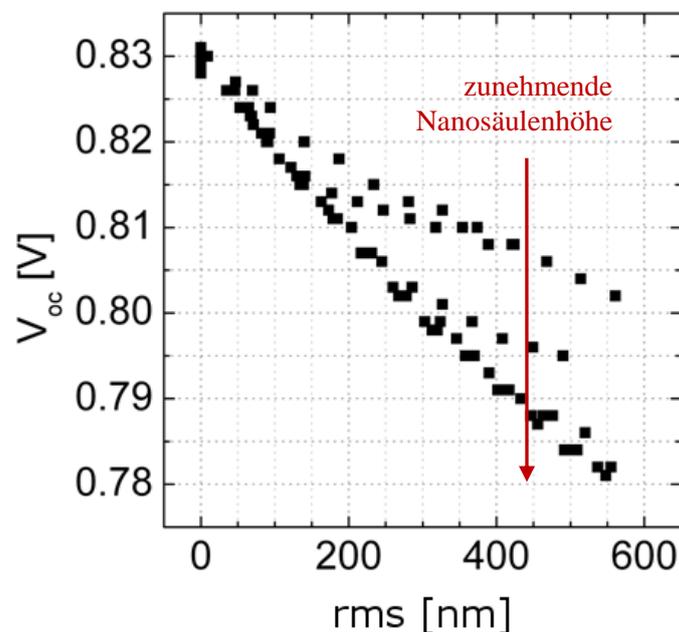


Abbildung 48: Leerlaufspannung V_{oc} in Abhängigkeit der Oberflächenrauigkeit rms (root mean square) für 2D-Simulationsdomänen.

rimentelle Umsetzung von neuen Substratstrukturen die negativen Einflüsse auf die Leerlaufspannung, falls die Substratoberfläche eine sehr große Rauigkeit aufweist und aufgrund des isotropen Wachstums von a-Si:H mögliche Zwischenräume vollständig gefüllt werden.

8.4 Zusammenfassung

Unter Verwendung der erzielten Ergebnisse zur Modellvalidierung von 1D-Simulationsdomänen (Kapitel 4 und 5), zur Untersuchung der Einflüsse der Generationsratenprofile auf die elektrischen Eigenschaften von siliziumbasierten Dünnschichtsolarzellen (Kapitel 6) und zur elektrischen Modellierung mit Hilfe von 3D-Subdomänen (Kapitel 7) konnte die vollständig gekoppelte elektrische und optische Simulation von a-Si:H Solarzellen auf neuartigen TCO-Nanosäulensubstraten verlässlich durchgeführt werden. Mit Hilfe von REM-Aufnahmen an Probenquerschnitten wurde einerseits die durchschnittliche Nanosäulengeometrie extrahiert und andererseits das isotrope Wachstum der abgeschiedenen a-Si:H Schichten nachgewiesen. Diese Erkenntnisse ermöglichten das Erstellen von realitätsnahen 3D-Simulationsdomänen, mit denen Hellkennlinien in Abhängigkeit des Nanosäulendurchmessers und der intrinsischen Siliziumschichtdicke modelliert wurden. Die simulative Effizienzbestimmung von dicht gepackten Nanosäulenstrukturen weist ein Maximum für einen Nanosäulendurchmesser von 140 nm auf, was für die künftige experimentelle Umsetzung dieser Art von neuartigen Solarzellenstrukturen als Anhaltspunkt für die Effizienzmaximierung dient.

Zudem wurde der Einfluss der Nanosäulen in Abhängigkeit ihrer Höhe und Abstände untereinander hinsichtlich der Leerlaufspannungen und Füllfaktoren darauf abgeschiedener Dünnschichtsolarzellen untersucht. Es wurde unter Berücksichtigung des isotropen Wachstums der abgeschiedenen a-Si:H Schichten festgestellt, dass eine Reduktion von V_{oc} und FF zu verzeichnen ist, wenn der Abstand der Nanosäulen weniger als die Hälfte der Halbleiterschichtdicken beträgt. Der Grund dieses Verhaltens liegt im vollständigen Füllen der Nanosäulen-Zwischenräume mit Absorbermaterial, da mit der PECVD-Abscheidung auch an den Seiten der TCO-Nanosäulen Siliziummaterial deponiert wird. Dies resultiert in einer Vergrößerung der effektiven intrinsischen Schichtdicken. Durch die Darstellung der Differenz der Quasiferminiveau-Aufspaltungen konnte so der Leerlaufspannungsabfall von Zellsystemen auf unterschiedlichen Nanosäulensubstraten visualisiert und die kritischen Bereiche eindeutig detektiert werden. Aus diesen Erkenntnissen konnte zudem eine Abschätzung des Einflusses der Substratrauigkeit auf die charakteristischen Kenngrößen gegeben werden. Übereinstimmend mit den Ergebnissen zur mehrdimensionalen Simulation von Asahi-U Substraten (Kapitel 6), zeigen Rauigkeiten von

ca. 50 nm keinen großen Einfluss auf Leerlaufspannung und Füllfaktor. Für neuartige Substrate mit ausgeprägten 3D-Strukturen, deren Rauigkeiten mehrere hundert Nanometer betragen, müssen allerdings das isotrope Wachstum und der mögliche Abfall von V_{oc} und FF berücksichtigt werden. Die optischen Eigenschaften allein reichen daher für die simulative Optimierung derartiger Substratstrukturen nicht aus, sondern auch die elektrischen Eigenschaften der gesamten Solarzellenstruktur stellen einen entscheidenden Faktor dar.

9 Fazit und Ausblick

Diese Arbeit setzte sich mit der Modellentwicklung optischer und elektrischer TCAD-Simulationen von amorphen und mikrokristallinen Silizium-Dünnschichtsolarzellen auseinander, welche von hoher Bedeutung für die theoretische Wirkungsgradoptimierung bekannter Schichtsysteme sowie die Potentialabschätzung neuartiger Schichtsysteme ist. Der Fokus der durchgeführten Untersuchungen lag auf der elektrischen Modellierung, deren Erkenntnisse im Folgenden kurz zusammengefasst sind:

- Die in dieser Arbeit aufgeführten **elektrischen Parametersätze** und die angewandten physikalischen Modelle sind in der Lage **amorphe Silizium-Dünnschichtsolarzellen** mit **variierenden Absorberschichtdicken** simulativ zu beschreiben, so dass die Simulationsergebnisse mit experimentell ermittelten Hell- und Dunkelkennlinien sowie EQE-Spektren übereinstimmen. Dies ermöglicht die theoretische Beschreibung von komplexen Schichtsystemen aus a-Si:H Materialien und somit eine sichere Prognose der elektrischen Solarzellencharakteristiken.
- Werden in der Simulation **TCO-Elektroden** nicht als Metalle sondern als **hochdotierte Halbleiter** behandelt, so kann aufgrund der zusätzlichen internen pn-Struktur, und dem Ausbilden möglicher Potentialtöpfe in der Bandstruktur, ein s-förmiger Verlauf in den simulierten IV-Charakteristiken beleuchteter Silizium-Dünnschichtsolarzellen beobachtet werden. Um experimentell beobachtete IV-Diodenkennlinien dennoch simulativ abbilden zu können, muss ein weiterer Transportprozess an der TCO/Silizium-Grenzfläche in die elektrische Modellierung integriert werden, was sich mit einem Band-zu-Band-Tunnelprozesses erfolgreich umsetzen lässt. Dies bietet künftig die Möglichkeit experimentell ermittelte Bandlücken und Dotierkonzentrationen der verschiedenen TCOs in die Simulation einfließen zu lassen, was das bisherige Standardmodell erweitert und neue Optimierungsmöglichkeiten der Solarzelleneffizienzen eröffnet.
- Damit elektrisch modellierte Hellkennlinien von mikromorphen **Tandemsolarzellen** experimentell gemessenen Diodencharakteristiken entsprechen, muss die **serielle Verschaltung**

der amorphen und mikrokristallinen Silizium-Subzellen mit einem Tunnelprozess am internen pn-Übergang umgesetzt werden. Ohne das zusätzliche Transportmodell kann auch hier ein s-förmiger Verlauf in der Hellkennlinie festgestellt werden, dessen Ursprung mit dem simulierten IV-Verhalten von dotierten TCO-Halbleiterschichten als Elektroden in Einzelzellenstrukturen vergleichbar ist. Der interne Rekombinationsstrom kann desweiteren mit einer zusätzlichen virtuellen Metallschicht (transparentes Metall) erreicht werden, falls die optischen Materialparameter entsprechend angepasst werden. Diese neue Strategie simuliert eine perfekte serielle Verschaltung der beiden Subzellen, ohne eine Kalibrierung des Tunnelprozesses vorauszusetzen, was künftige simulative Potentialabschätzungen neuartiger Material- und Schichtsysteme erheblich vereinfacht.

- **Mehrdimensionale Simulationen** von Silizium-Dünnschichtsolarzellen unter Einbeziehung experimentell bestimmter **AFM-Grenzflächenstrukturen** kommerziell erhältlicher Asahi-U Substrate weisen laterale und vertikale Unterschiede der Generationsratenprofile in den Halbleiterschichten auf. Allerdings haben diese nur geringen Einfluss auf die Strom-Spannungs-Charakteristiken von amorphen, mikrokristallinen und mikromorphen Silizium-Dünnschichtsolarzellen. Begründen lässt sich dies durch die ausreichend großen Mobilitäten der Ladungsträger und der ausreichend geringen Störstellendichten, so dass in den intrinsischen Schichten die photogenerierten Elektronen und Löcher nahezu vollständig aus der Solarzellenstruktur extrahiert werden können. Entscheidend ist daher die absolute Anzahl der photogenerierten Ladungsträger in der Absorberschicht, die in der simulativen Umsetzung mit 3D-Simulationsdomänen ein Maximum erreicht. Daher sollten künftig optische Simulationen unter Verwendung von AFM-Grenzflächenstrukturen mit 3D-Simulationsdomänen durchgeführt werden.
- Durch das Übertragen von **Rasterkraftmikroskopiemessungen in die Simulationssoftware** kann der Lichtstreuungseffekt an rauen Grenzflächen modelliert werden. Optische Simulationsdomänen müssen hierfür eine ausreichende Ausdehnung besitzen um Randeffekte zu minimieren. Für die elektrische Simulation ist es ausreichend nur Teile der optischen Simulationsdomäne zu berücksichtigen, was eine deutliche Verringerung der Simulationszeit zur Folge hat. Das Anwenden dieser **Subdomänen-Strategie** liefert eine gute Übereinstimmung von experimentellen und simulierten Hellkennlinien amorpher Siliziumsolarzellen und reduziert die Simulationszeiten ohne Einbußen der Genauigkeit erheblich.
- Elektrochemisch abgeschiedene **TCO-Nanosäulen** auf glatten Glas/TCO-Substraten können den Lichtstreuungseffekt von nasschemisch geätzten TCO-Substraten ersetzen. **3D-**

Simulationen, welche die durchschnittliche **Substratoberflächenstruktur** nachbilden, können experimentelle Strom-Spannungs-Messungen von a-Si:H Solarzellen auf den TCO-Nanostrukturen verlässlich abbilden und die optimale Säulengeometrie simulativ vorhersagen. Aufgrund der isotropen Wachstumseigenschaften von amorphen Siliziumschichten, wie sie bei Abscheidungen mittels der PECVD-Technologie auftreten, können Zwischenräume der TCO-Substratstruktur vollständig gefüllt werden. Dies kann zu verminderten Leerlaufspannungen und Füllfaktoren führen, da eine effektiv dickere intrinsische Absorberschicht die Folge ist und erzeugte Ladungsträger schlechter extrahiert werden können. Für die Effizienzbeurteilung von Dünnschicht solarzellen auf Substraten mit ausgeprägten 3D-Strukturen können daher nicht nur die optischen Absorptionseigenschaften, sondern müssen auch die elektrischen Transporteigenschaften berücksichtigt werden.

Als Resümee dieser Arbeit ist festzuhalten, dass anhand der durchgeführten Untersuchungen wichtige Erkenntnisse zur optischen und elektrischen Simulation von Silizium-Dünnschicht solarzellen gewonnen werden konnten. Dies betrifft zum einen die Modellvalidierung von a-Si:H Dünnschicht solarzellen mit unterschiedlichen Absorberschichtdicken, unter Berücksichtigung von TCO-Schichten als hochdotiertes Halbleitermaterial und der Subzellenverschaltung in mikromorphen Tandemsolarzellen. Zum anderen die mehrdimensionale Modellierung zur volumenbezogenen Detektion von Verlustmechanismen in der Solarzellenstruktur. Es konnte eindeutig demonstriert werden, dass die optische Simulation, die lediglich die Photonenabsorption in den intrinsischen Halbleiterschichten und keinerlei Rekombinationsverluste berücksichtigt, für die Berechnung von optischen EQE-Spektren und daraus resultierenden Photostromdichten für erste Potentialabschätzungen neuer Schichtsysteme herangezogen werden kann. Um allerdings neuartige Substratstrukturen mit ausgeprägten Rauigkeiten bezüglich der potentiellen Solarzelleneffizienz beurteilen zu können, ist die mehrdimensionale elektrische Simulation unumgänglich.

Ausblick

Die vorgestellten Parametersätze befähigen die verlässliche Simulation von EQE-Spektren sowie Hell- und Dunkelkennlinien der p-i-n Solarzellenstruktur. Wie in Kapitel 7 gezeigt, weisen die IV-Hellkennlinien allerdings oft eine gewisse Streubreite auf, insbesondere im Hinblick auf den Füllfaktor. Der Grund kann hauptsächlich an der Störstellendichte innerhalb der intrinsischen Schicht festgemacht werden, deren Schwankungen der verwendeten PECVD-Technologie und den lokalen Schwankungen beim Plasmaprozess zugrunde liegen. Sollte die Simulation künftig mit Prozessparametern gekoppelt werden, so müssten insbesondere die Qua-

litätsschwankungen der Abscheidetechnologie stärker in der Simulation berücksichtigt werden. Es wäre daher nötig, die Einzelschichtcharakterisierung bezüglich Störstellenstruktur experimentell zu vertiefen und in die Simulation zu übertragen, so dass deren Wertebereiche weiter eingegrenzt werden könnten. Mit Hilfe der Simulation könnten somit durchschnittliche, maximale und minimale Hellkennliniencharakteristiken der verwendeten PECVD-Technologie berechnet werden, was für die prozessierunahe Simulation weitere Optimierungsmöglichkeiten aufzeigen könnte.

Als Optimierung des elektrischen Parametersatzes könnte die weitere Korrelation der Eingangsparameter untereinander genannt werden, so dass sich beispielsweise die Defektdichteverteilung tiefer Störstellen anhand der Lage des Fermilevels und dem Wert der Urbachenergie bestimmen ließe. Dieses Prinzip beschreibt das sogenannte Defect-Pool-Model, welches bereits in der ASA-Software der TU Delft implementiert ist und künftig in die Software Sentaurus TCAD übertragen werden sollte. Dieses Modell ermöglicht eine weitere Reduzierung der Freiheitsgrade zur elektrischen Modellierung. Dies wäre von besonderer Bedeutung, sollten prozessbegleitende Simulationen durchgeführt werden. Das Ziel dieser Art der Modellierung wäre die Berechnung der Simulations-Eingangsparameter aus anlagenspezifischen Parametern wie z.B. Depositionsdruck, Plasmaleistung, Silankonzentration oder Substrattemperatur, welche somit als direkte Eingangsparameter der Simulationsdomänenenerstellung sowie bei der Bestimmung der optischen und elektrischen Materialparameter verwendet werden könnten. Die Auswirkungen auf die elektrischen Materialeigenschaften sind teilweise bereits experimentell untersucht, so dass bekannte Korrelationen von Prozess- und Materialparametern bereits jetzt in die Simulation einfließen könnten.

Mit Hilfe von mehrdimensionalen Simulationsdomänen wäre weiterhin die Möglichkeit gegeben volumenbezogene Eigenschaften wie experimentell bestimmte Morphologien von mikrokristallinen Siliziumschichten in die Simulationsdomänenenerstellung einfließen zu lassen. So könnte aus experimentell durchgeführten Raman-Spektroskopien oder Transmissions-elektronenmikroskopien die Kristallinität bestimmt werden, welche das Verhältnis sowie die Volumenzusammensetzungen der nanokristallinen und amorphen Materialphasen festlegt. Diese ist ebenfalls gekoppelt mit den Prozessierungsparametern und könnte als Eingangsparameter in die Modellierung eingehen. Durch die Berücksichtigung der Wachstumseigenschaften mit Hilfe der mehrdimensionalen Simulation von $\mu\text{-Si:H}$ Einzelschichten müssten diese künftig nicht mehr als effektives Medium behandelt werden, wie in dieser Arbeit in Kapitel 5 und 6 dargestellt wurde.

Literaturverzeichnis

1. Zeman, M. and J. Krc. *Electrical and Optical Modelling of Thin-Film Silicon Solar Cells*. in *Mater. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 989*. 2007.
2. Zeman, M., et al., *Computer modelling of current matching in a-Si : H/a-Si : H tandem solar cells on textured TCO substrates*. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 1997. **46**(2): p. 81-99.
3. Arch, J.K., et al., *Computer analysis of the role of p-layer quality, thickness, transport mechanisms, and contact barrier height in the performance of hydrogenated amorphous silicon p-i-n solar cells*. *Journal of Applied Physics*, 1991. **69**(10): p. 7057-7066.
4. Topic, M., F. Smole, and J. Furlan, *Band-gap engineering in CdS/Cu(In,Ga)Se₂ solar cells*. *Journal of Applied Physics*, 1996. **79**(11): p. 8537-8540.
5. Burgelman, M., P. Nollet, and S. Degraeve, *Modelling polycrystalline semiconductor solar cells*. *Thin Solid Films*, 2000. **361-362**: p. 527-532.
6. Froitzheim, A., et al. *AFORS-HET, a Computer Program for the Simulation of Heterojunction Solar Cells to be Distributed for Public Use*. in *3rd World Conference of Photovoltaic Energy Conversion*. 2003. Osaka, Japan.
7. Burgelman, M., et al., *Modeling thin-film PV devices*. *Progress in Photovoltaics : Research and Applications*, 2004. **12**(2-3): p. 143-153.
8. Green, M.A., et al., *Solar Cell Efficiency Tables (Version 35)*. *Progress in Photovoltaics : Research and Applications*, 2010. **18**(2): p. 144-150.
9. Bailat, J., et al. *Recent Developments of High-Efficiency Micromorph[®] Tandem Solar Cells in KAI-M PECVD Reactors*. in *25th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition*. 2010. Valencia, Spain: EU PVSEC Proceedings.
10. Ding, K., *Charakterisierung und Simulation von a-Si:H/uc-Si:H Tandem Solarzellen*. 2009, rheinische-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen: Jülich.
11. Ding, K., et al., *Characterization and simulation of a-Si:H/[μ]c-Si:H tandem solar cells*. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2011. **95**(12): p. 3318-3327.
12. Ostertag, J.P., et al., *Application of an optimization tool for inverse modelling of thin-film silicon solar cells*. *Energy Procedia*, 2010. **10**: p. 266-270.
13. Haase, C. and H. Stiebig, *Thin-film silicon solar cells with efficient periodic light trapping texture*. *Journal of Applied Physics*, 2007. **91**(6): p. 061116 - 061116-3.
14. Dewan, R., et al., *Light trapping in thin-film silicon solar cells with submicron surface texture*. *Opt. Express*, 2009. **17**(25): p. 23058-23065.
15. Dewan, R., et al., *Optical enhancement and losses of pyramid textured thin-film silicon solar cells*. *Journal of Applied Physics*, 2011. **110**(1): p. 013101.
16. Pflaum, C., et al. *Simulation of light in-coupling at oblique angles in thin-film silicon solar cells*. in *24th European Photovoltaic Solar Energy Conference*. 2009. Hamburg, Germany: EU PVSEC Proceedings.
17. Campa, A., et al., *Potential of diffraction gratings for implementation as a metal back reflector in thin-film silicon solar cells* *Thin Solid Films*, 2008. **516**(20): p. 6963-6967.

18. Dewan, R. and D. Knipp, *Light trapping in thin-film silicon solar cells with integrated diffraction grating*. Journal of Applied Physics, 2009. **106**(7): p. 074901 - 074901-7.
19. Campa, A., et al., *Optimal design of periodic surface texture for thin-film α -Si:H solar cells*. Progress in Photovoltaics : Research and Applications, 2009. **18**(3): p. 160-167.
20. Taflove, A. and S.C. Hagness, *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method*. Third ed. 2005, Boston: ARTECH HOUSE, INC.
21. Lacombe, J., et al., *Three dimensional optical modeling of amorphous silicon thin film solar cells using the finite-difference time-domain method including real randomly surface topographies*. Journal of Applied Physics, 2011. **110**(2): p. 023102.
22. Jandl, C., et al. *Simulation of Thin-Film Silicon Solar Cells with Integrated AFM Scans for Oblique Incident Waves*. in *26th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition*. 2011. Hamburg, Germany: EU PVSEC Proceedings.
23. Sawada, T., et al. *Theoretical analysis of textured thin-film solar cells and a guideline to achieving higher efficiency*. in *Proc. 23rd IEEE PVSC*. 1993. Louisville, KY.
24. Fantoni, A., et al., *A two-dimensional numerical simulation of a non-uniformly illuminated amorphous silicon solar cell*. Journal of Physics D: Applied Physics, 1996. **29**(12): p. 3154.
25. Letay, G. in *International Workshop on Modeling of Thin-Film Silicon Solar Cells*. Feb 2012. NEXT ENERGY, Oldenburg, Germany.
26. Voigt, F., T. Stelzner, and S.H. Christiansen, *Influence of the contacting scheme in simulations of radial silicon nanorod solar cells*. Materials Science and Engineering: B, 2011(0).
27. Chang, S.T., B.F. Hsieh, and Y.C. Liu, *A simulation study of thin film tandem solar cells with a nanoplate absorber bottom cell*. Thin Solid Films, 2011. **520**(8): p. 3369-3373.
28. Chang, S.T. and B.F. Hsieh, *TCAD studies of novel nanoplate amorphous silicon alloy thin-film solar cells*. Thin Solid Films, 2011. **520**(5): p. 1612-1616.
29. Chang, S.T., et al., *TCAD simulation of hydrogenated amorphous silicon-carbon/microcrystalline-silicon/hydrogenated amorphous silicon-germanium PIN solar cells*. Thin Solid Films, 2009. **518**(6, Supplement 1): p. S250-S254.
30. Deceglie, M.G., et al., *Design of Nanostructured Solar Cells Using Coupled Optical and Electrical Modeling*. Nano Letters, 2012. **12**(6): p. 2894-2900.
31. Chittick, R.C., J.H. Alexander, and H.F. Sterling, *The Preparation and Properties of Amorphous Silicon*. Journal of The Electrochemical Society, 1969. **116**(1): p. 77-81.
32. Shah, A.V., et al., *Thin-film silicon solar cell technology*. Progress in Photovoltaics : Research and Applications, 2004. **12**(2-3): p. 113-142.
33. Sze, S.M., *Physics of semiconductor devices*. 2 ed. 1981, [S.l.]: John Wiley & Sons.
34. Street, R.A., *Hydrogenated amorphous silicon*. 1 ed, ed. Cambridge University Press. 1991, Cambridge: Press Syndicate of the University of Cambridge
35. Staebler, D. and C. Wronski, *Optically induced conductivity changes in discharge-produced hydrogenated amorphous silicon*. J. Appl. Phys., 1980. **51**(6): p. 3262.
36. Kolodziej, A., *Staebler-Wronski Effect in Amorphous Silicon and its Alloys*. OPTO-ELECTRONICS REVIEW, 2004. **12**(1): p. 21-32.
37. Baranovski, S., *Charge Transport in Disordered Solids*. 1st ed. 2006, West Sussex, England: John Wiley & Sons, Ltd.
38. Kilper, T., *Großflächige Plasmaabscheidung von mikrokristallinem Silizium für mikromorphe Dünnschichtsolarmodule*. 2009, Technische Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig: Jülich, Germany.
39. Wronski, C.R., et al., *Internal photoemission of holes and the mobility gap of hydrogenated amorphous silicon*. Physical Review Letters, 1989. **63**(13): p. 1420-1423.

40. Bailat, J., *Growth, microstructure and electrical performances of thin film microcrystalline silicon solar cells*. 2005, Universite de Neuchatel: Neuchatel.
41. Droz, C., *Thin Film Microcrystalline Silicon Layers and Solar Cells: Microstructure and Electrical Performances*. 2003, University of Neuchatel: Neuchatel.
42. Wyrsh, N., et al., *Effect of the microstructure on the electronic transport in hydrogenated microcrystalline silicon* Journal of Non-Crystalline Solids, 2002. **299-302**(1): p. 390-394.
43. Vallat-Sauvain, E., et al., *Microstructure and surface roughness of microcrystalline silicon prepared by very high frequency-glow discharge using hydrogen dilution*. Journal of Non-Crystalline Solids, 2000. **266-269**(1): p. 125-130.
44. Meier, J., et al., *J. Non-Cryst. Solids*, 1998. **227-230**: p. 1250.
45. Walder, C., *Effiziente optische Modellierung von Silizium-Dünnschicht-Solarzellen - Kombination von Transfer-Matrix-Methode und Strahlverfolgungsalgorithmus basierend auf dem integralen Haze*. 2011, Carl von Ossietzky Universität: Oldenburg.
46. Würfel, P., *Physics of solar cells : from principles to new concepts*. 2005, Weinheim: Wiley-VCH.
47. Fischer, D., et al. *The "micromorph" solar cell: extending a-Si:H technology towards thin film crystalline silicon* in *Photovoltaic Specialists Conference*. 1996. Washington DC, USA.
48. Shah, A., et al., *Micromorph ($\mu\text{c-Si:H/a-Si:H}$) Tandem solar Modules Basic limits, present status and future potential*. 2001, University of Neuchatel.
49. American Society for Testing and Materials, *ISO 9845-1:1992-10-(E)*. Air Mass 1.5G. **ISO 9845-1:1992-10-(E)**: p. <http://rredc.nrel.gov/solar/spectra/am1.5/>.
50. Vukadinovic, M., F. Smole, and M. Topic, *Transport in tunneling recombination junctions: A combined computer simulation study*. Journal of Applied Physics, 2004. **96**: p. 7289.
51. Vukadinovic, M., *Numerical modelling of trap-assisted tunneling mechanism in a-Si:H and $\mu\text{c-Si n/p}$ structures and tandem solar cells*. Solar Energy Materials and Solar Cells, 2001. **66**: p. 361-367.
52. Rath, J.K., *Microcrystalline n- and p-layers at the tunnel junction of a-Si:H / a-Si:H tandem cells*. Non-Crystalline Solids, 1998. **227-230**: p. 1282-1286.
53. Lacombe, J., *Herstellung und Charakterisierung von amorphen Siliziumschichten für den Einsatz in Solarzellen*. 2007, Institut für Materialphysik der WWU Münster: Münster.
54. Schropp, R.E.I. and M. Zeman, *Amorphous and Microcrystalline Silicon Solar Cells: Modeling, Materials and Device Technology*. Vol. 5. 1998, Berlin: Springer-Verlag.
55. Repmann, T., *Stapelsolarzellen aus amorphem und mikrokristallinem Silizium. Prozess und Modulentwicklung*, F. Jülich, Editor. 2003, RWTH Aachen.
56. Nelson, J., *The Physics of Solar Cells* 5ed, ed. I.C. Press. Vol. 1. 2003, London Imperial Collage Press.
57. Willemen, J.A., *Modelling of Amorphous Silicon Single- and Multi-Junction Solar Cells*. 1998, Delft University of Technology.
58. Pieters, B.E., *CHARACTERIZATION OF THIN-FILM SILICON MATERIALS AND SOLAR CELLS THROUGH NUMERICAL MODELING*. 2008, Technische Universität Delft: Delft.
59. Shockley, W. and W.T. Read, Jr., *Statistics of the Recombinations of Holes and Electrons*. Physical Review, 1952. **87**(5): p. 835-842.
60. Chang, S.T., B.F. Hsieh, and Y.C. Liu, *A simulation study of thin film tandem solar cells with a nanoplate absorber bottom cell*. Thin Solid Films, 2011(0).

61. Sturiale, A. and F.A. Rubinelli, *Evidences of the defect pool model in the dark current-voltage characteristics of hydrogenated amorphous silicon based p-i-n devices*. Thin Solid Films, 2008. **516**(21): p. 7708-7714.
62. Sturiale, A., et al., *Exploring dark current voltage characteristics of micromorph silicon tandem cells with computer simulations*. Journal of Applied Physics, 2009. **106**(1): p. 014502.
63. Klaver, A. and R.A.C.M.M. van Swaaij, *Modeling of light-induced degradation of amorphous silicon solar cells*. Solar Energy Materials and Solar Cells, 2008. **92**(1): p. 50-60.
64. Zeman, M., et al. *Application of the Defect Pool Model in Modelling of a-Si:H Solar Cells*. in *Mat. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 377*. 1995.
65. Vukadinovic, M., et al., *Numerical modelling of trap-assisted tunnelling mechanism in a-Si:H and μ c-Si n/p structures and tandem solar cells* Solar Energy Materials and Solar Cells, 2001. **66**(1-4): p. 361-367.
66. Pieters, B.E., et al., *Determination of the mobility gap of intrinsic μ c-Si:H in p-i-n solar cells*. Journal of Applied Physics, 2009. **105**(4): p. 044502.
67. Stutzmann, M., D.K. Biegelsen, and R.A. Street, *Detailed investigation of doping in hydrogenated amorphous silicon and germanium*. Physical Review B, 1987. **35**(11): p. 5666-5701.
68. Jiang, L., et al., *Open-Circuit Voltage Physics in Amorphous Silicon Solar Cells*. MRS On-line Proceedings Library, 2000. **609**: p. A18.3.
69. Schiff, E.A., R.A. Street, and R.L. Weisfield, *Reverse bias currents in amorphous silicon nip sensors (Section 19. Sensors and other devices)*. Journal of Non-Crystalline Solids, 1996. **198-200**(2): p. 1155-1158.
70. Tauc, J., R. Grigorovici, and A. Vancu, *Optical Properties and Electronic Structure of Amorphous Germanium*. physica status solidi (b), 1966. **15**(2): p. 627-637.
71. Tauc, J., *Optical properties and electronic structure of amorphous Ge and Si*. Materials Research Bulletin, 1968. **3**(1): p. 37-46.
72. Stenzel, O., *The Physics of Thin Film Optical Spectra - An Introduction*. 2005, Berlin Heidelberg, Germany: Springer-Verlag.
73. Jackson, W.B., et al., *Energy dependence of the optical matrix element in hydrogenated amorphous and crystalline silicon*. Physical Review B, 1985. **31**(8): p. 5187-5198.
74. Anderson, J.C., *Noise spectroscopy in amorphous silicon films*. Philosophical Magazine Part B, 1983. **48**(1): p. 31-45.
75. Brammer, T., et al. *Illumination Dependence of Microcrystalline PIN Diodes*. in *MRS Spring Meeting*. 2001. San Francisco, USA: MRS Proceedings.
76. Ding, K., et al., *Characterization and simulation of a-Si:H/[μ c-Si:H tandem solar cells*. Solar Energy Materials and Solar Cells, 2011. **In Press, Corrected Proof**.
77. Winer, K., *Defect formation in a-Si:H*. Physical Review B, 1990. **41**: p. 12150-12161.
78. Stutzmann, M., *The defect density in amorphous silicon*. Philosophical Magazine Part B, 1989. **60**(4): p. 531-546.
79. Powell, M.J. and S.C. Deane, *Improved defect-pool model for charged defects in amorphous silicon*. Physical Review B, 1993. **48**(15): p. 10815-10827.
80. Kanevce, A. and W.K. Metzger, *The role of amorphous silicon and tunneling in heterojunction with intrinsic thin layer (HIT) solar cells*. Journal of Applied Physics, 2009. **105**(9): p. 094507.
81. Tang, M., et al., *Simulation of nanorod structures for an amorphous silicon-based solar cell*. Thin Solid Films, 2009. **518**(6, Supplement 1): p. S259-S261.
82. SYNOPSISYS Inc., *Sentaurus Device User Guide*. Vol. E-2010.12. 2010, Zurich: Synopsys.

-
83. Krc, J., F. Smole, and M. Topic, *Analysis of Light Scattering in Amorphous Si:H Solar Cells by a One-Dimensional Semi-coherent Optical Model*. Progress in Photovoltaics : Research and Applications, 2003. **11**(1): p. 15-26.
 84. Tan, S.T., et al., *Blueshift of optical band gap in ZnO thin films grown by metal-organic chemical-vapor deposition*. Journal of Applied Physics, 2005. **98**(1): p. 013505.
 85. Chakanga, K., *Texturing ZnO:Al for the use as a light scattering layer in Micromorph thin film solar cells*. 2010, Carl von Ossietky Universität: Oldenburg.
 86. Sai, H. and M. Kondo, *Effect of self-orderly textured back reflectors on light trapping in thin-film microcrystalline silicon solar cells*. Journal of Applied Physics, 2009. **105**(9): p. 094511.
 87. Sai, H., H. Jia, and M. Kondo, *Impact of front and rear texture of thin-film microcrystalline silicon solar cells on their light trapping properties*. Journal of Applied Physics, 2010. **108**(4): p. 044505-044505-9.
 88. Haug, F.-J., et al. *Light trapping effects in thin film silicon solar cells in MRS Spring Meeting*. 2009. San Francisco, USA: Scholar One.
 89. Söderström, T., et al., *TCOs for nip thin film silicon solar cells*. Progress in Photovoltaics : Research and Applications, 2008. **17**(3): p. 165-176.
 90. Isabella, O., et al., *Modulated surface-textured substrates with high haze for thin-film silicon solar cells*. MRS Proceedings, 2011: p. mrss11-1321-a17-04.
 91. von Maydell, K., et al. *Micromorph Silicon Solar Cell Research and Development at NEXT ENERGY*. in *25th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition*. 2010. Valencia.
 92. Tena-Zaera, R., et al., *Influence of the Potassium Chloride Concentration on the Physical Properties of Electrodeposited ZnO Nanowire Arrays*. The Journal of Physical Chemistry C, 2008. **112**(42): p. 16318-16323.
 93. Geißendörfer, S., K. von Maydell, and C. Agert, *Numerical 3D-Simulation of Micromorph Silicon Thin Film Solar Cells*. MRS Online Proceedings Library, 2011. **1321**: p. mrss11-1321-a08-09.
 94. Tsai, C.C., et al., *Film formation mechanisms in the plasma deposition of hydrogenated amorphous silicon*. Journal of Applied Physics, 1986. **59**(8): p. 2998-3001.
 95. Vanecek, M., et al. *New 3-Dimensional Nanostructured Thin Film Silicon Solar Cells*. in *EU PVSEC*. 2010. Valencia.
 96. Bissel, C.C. and D.A. Chapman, *Digital signal transmission*. second ed. 1992, Cambridge, UK: Cambridge University Press.

Publikationsliste

Diese Dissertation betreffende Publikationen

Artikel in wissenschaftlicher Zeitschrift

S. Geißendörfer, M. Vehse, T. Voss, J.-P. Richters, B. Hanke, K. von Maydell, and C. Agert, „Integration of n-doped ZnO Nanorod Structures as Novel Light-trapping Concept in Amorphous Thin Film Silicon Solar Cells“, *Solar Energy Materials & Solar Cells*, 2012, [doi:10.1016/j.solmat.2012.12.042](https://doi.org/10.1016/j.solmat.2012.12.042)

Artikel in Tagungsbänden

S. Geißendörfer, J. Lacombe, G. Letay, K. von Maydell, and C. Agert, „Simulation of Amorphous and Microcrystalline Thin Film Silicon Solar Cells with Sentaurus TCAD“, *Proceedings of the 25th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition*, 2010, Valencia/Spain, [doi:10.4229/25thEUPVSEC2010-3AV.1.86](https://doi.org/10.4229/25thEUPVSEC2010-3AV.1.86)

S. Geißendörfer, J. Lacombe, O. Sergeev, K. von Maydell, and C. Agert, „Multidimensional Coupled Electrical and Optical Modeling of Amorphous Silicon Thin Film Solar Cells“, *Proceedings of the 26th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition*, 2011, Hamburg/Germany, [doi:10.4229/26thEUPVSEC2011-3AV.2.24](https://doi.org/10.4229/26thEUPVSEC2011-3AV.2.24)

S. Geißendörfer, K. von Maydell, and C. Agert, „Numerical 3D-Simulation of Micromorph Silicon Thin Film Solar Cells“, *MRS Proceedings*, 2011, San Francisco/USA, mrss11-1321-a08-09, [doi:10.1557/opl.2011.934](https://doi.org/10.1557/opl.2011.934)

M. Vehse, S. Geißendörfer, T. Voss, J.-P. Richters, B. Schumacher, K. von Maydell, and C. Agert, „Investigation on Nanorod TCO Light-trapping for a-Si:H Solar Cells in Superstrate Configuration“, *MRS Proceedings*, 2012, San Francisco/USA, mrss12-1426-A17-11.R1, [doi:10.1557/opl.2012.1017](https://doi.org/10.1557/opl.2012.1017)

S. Geißendörfer, C. Walder, O. Sergeev, K. von Maydell, C. Agert: "Simulation of Single-Junction Thin-Film Silicon Solar Cells with Varying Intrinsic Layer Thickness", *38th IEEE Photovoltaic Specialists Conference*, 2012, Austin/USA, [doi:10.1109/PVSC.2012.6317638](https://doi.org/10.1109/PVSC.2012.6317638)

Posterbeiträge

S. Geißendörfer, J. Lacombe, K. von Maydell, and C. Agert, „Optische und elektrische Simulation von Silizium-Dünnschichtsolarzellen“, *Niedersächsische Photovoltaik Symposium*, 2009, Hameln/Germany

J. Lacombe, S. Geißendörfer, K. von Maydell, C. Agert: "Electrical and optical modelling of micromorphous Thin Film Solar Cells using Sentaurus TCAD", *3rd International Workshop on Thin Film Silicon Solar Cells*, 2010, Nagasaki/Japan

Vorträge

S. Geißendörfer, „Simulation of amorphous and microcrystalline thin film silicon solar cells with the software Sentaurus TCAD“, *EHF-Kompaktseminar*, 2010, Papenburg/Germany

S. Geißendörfer, J. Lacombe, K. Chakanga, O. Sergeev, K. von Maydell and C. Ager, „2D modelling of amorphous and microcrystalline silicon thin film solar cells“, *DPG spring meeting*, 2011, Dresden/Germany

S. Geißendörfer, M. Vehse, T. Voss, J.-P. Richters, B. Schumacher, K. von Maydell, and C. Agert, “Modelling of a-Si:H solar cells on TCO nanorods in consideration of the silicon layer growth process”, *International Workshop on Modeling of Thin-Film Silicon Solar Cells*, 2012, Oldenburg/Germany

Weitere Publikationen

Artikel in Tagungsbänden

J. Lacombe, K. Chakanga, S. Geißendörfer, K. von Maydell, and C. Agert, „Optical modeling of light trapping in thin film silicon solar cells using the FDTD method“, *35th IEEE Photovoltaic Specialists Conference*, 2010, Hawaii/USA, [doi:10.1109/PVSC.2010.5617030](https://doi.org/10.1109/PVSC.2010.5617030)

K. von Maydell, K. Chakanga, O. Sergeev, C. Feser, D. Rogler, F. Stahr, S. Geißendörfer, J. Lacombe, O. Siepmann, B. Schumacher, and P. Klement: "Micromorph Silicon Solar Cell Research and Development at NEXT ENERGY", *Proceedings of the 25th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition*, 2010, Valencia/Spain, [doi:10.4229/25thEUPVSEC2010-3AV.1.51](https://doi.org/10.4229/25thEUPVSEC2010-3AV.1.51)

Posterbeiträge

J. Lacombe, S. Geißendörfer, and K. von Maydell: "Advanced modelling of thin film solar cells", *12th Euregional Workshop on Novel Concepts for Future Thin-Film Silicon Solar Cells*, 2010, Delft/Netherlands

K. von Maydell, S. Geißendörfer, and J. Lacombe: "Numerical simulation of thin film silicon solar cells on glass", *International Conference of Coatings on Glass and Plastics*, 2010, Braunschweig/Germany

Vorträge

C. Feser, O. Sergeev, S. Geißendörfer, J. Lacombe, T. Kilper, K. von Maydell, and C. Agert, „Systematic Study of a-Ge:H and μ -Ge:H as Bottom Cell Absorber Material for Silicon Based High Efficiency Multi Junction Thin Film Solar Cells“, *Proceedings of the 26th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition*, 2011, Hamburg/Germany, [doi:10.4229/26thEUPVSEC2011-3CO.1.5](https://doi.org/10.4229/26thEUPVSEC2011-3CO.1.5)

Lebenslauf

Persönliche Daten

Stefan Ewald Geißendörfer

Geboren am 22. April 1978 in Ochsenfurt

Staatsangehörigkeit: deutsch

Ausbildung

- 09/1994 – 03/1998 Berufsausbildung zum Landmaschinenmechaniker
Ausbildungsbetrieb: BayWa AG in Rothenburg o.d. Tauber
- 09/1999 – 07/2002 Besuch der Staatlichen Berufsoberschule (Technischer Zweig),
Franz-Oberthür-Schule in Würzburg
Abschluss: Fachgebundene Hochschulreife
- 10/2002 – 09/2008 Studium der Physik an der Julius-Maximilians-Universität in Würzburg
Abschluss: Diplom
Thema der Diplomarbeit: Untersuchung charakteristischer Kenngrößen
organischer Bulk-Heterojunction-Solarzellen
durchgeführt am Zentrum für angewandte Energieforschung / ZAE Bayern e.V. in Würzburg,
betreut durch Prof. V. Dyakonov, Lehrstuhl für Experimentelle Physik VI
der Universität Würzburg
- 03/2009 – 02/2012 Promotionsstudium an der Carl-von-Ossietzky-Universität in Oldenburg,
durchgeführt am EWE-Forschungszentrum für Energietechnologie e.V. /
NEXT ENERGY in Oldenburg,
betreut durch Prof. Dr. Carsten Agert, Universität Oldenburg

Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe.

Datum, Name