

[SCHRIFTENVERZEICHNIS  
ZUR HABILITATION VORGELEGTE UND GENEHMIGTE ARBEITEN  
GOTTFRIED WILHELM LEIBNIZ UNIVERSITÄT HANNOVER]

von

Dr. rer. nat. Pietro P. Altermatt

KOLLOQUIUM : 12. Juni 2012

BERICHTERSTATTER : Prof. Dr. Wim Sinke, Utrecht University  
Prof. Dr. Jörg Weber, TU Dresden  
Prof. Dr. Peter Vogel, TU München

# Habilitationsschrift von Dr. Dipl.-Phys. Pietro P. Altermatt

---

Als Habilitationsschrift wird hier folgende Auswahl meiner veröffentlichten Arbeiten vorgelegt:

- [1] P. P. Altermatt, A. Schenk, F. Geelhaar, G. Heiser “Reassessment of the intrinsic carrier density in crystalline silicon in view of band gap narrowing”, *Journal of Applied Physics* 93, pp. 1598 – 1604 (2003).
- [2] P. P. Altermatt, J. O. Schumacher, A. Cuevas, M. J. Kerr, S. W. Glunz, R. R. King, G. Heiser, A. Schenk, “Numerical modeling of highly doped Si:P emitters based of Fermi-Dirac statistics and self-consistent material parameters”, *Journal of Applied Physics* 92, pp. 3187 – 3197 (2002).
- [3] P. P. Altermatt, F. Geelhaar, T. Trupke, X. Day, A. Neisser, E. Daub, “Injection dependence of spontaneous radiative recombination in crystalline silicon: experimental verification and theoretical analysis”, *Applied Physics Letters* 88, 261901 (2006).
- [4] P. P. Altermatt, A. Schenk, G. Heiser, “An empirical model for the density-of-states and for incomplete ionization in crystalline silicon. I: Establishing the model in Si:P”, *Journal of Applied Physics* 100, 113714 (2006).
- [5] P. P. Altermatt, A. Schenk, B. Schmithüsen, G. Heiser, “An empirical model for the density of states and for incomplete ionization in crystalline silicon. II: investigation of Si:As and Si:B, and usage in device simulation”, *Journal of Applied Physics* 100, 113715 (2006).
- [6] P.P. Altermatt, “Models for numerical device simulations of crystalline silicon solar cells – a review”, *Journal of Computational Electronics* 10, 314 – 331 (2011) (invited paper).
- [7] B. Hoex, J. Schmidt, R. Bock, P. P Altermatt, M. C. M. van de Sanden, and W. M. M. Kessels, “Excellent passivation of highly doped p-type Si surfaces by the negative charge-dielectric  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ”, *Applied Physics Letters* 91, 112107 (2007).
- [8] C. Ulzhöfer, P. P. Altermatt, N.-P. Harder, R. Brendel, “Loss analysis of emitter-wrap-through (EWT) silicon solar cells by means of experiment and three-dimensional device modeling”, *Journal of Applied Physics* 107, 104509 (2010).
- [9] S. Steingrube, H. Wagner, H. Hannebauer, S. Gatz, R. Chen, S.T. Dunham, T. Dullweber, P.P. Altermatt, R. Brendel, “Loss analysis and improvements of industrially fabricated Cz-Si solar cells by means of process and device simulations”, *Energy Procedia* 8, 263 – 268 (2011).
- [10] R. Bock, P.P. Altermatt, J. Schmidt, R. Brendel, “Formation of aluminum–oxygen complexes in highly aluminum-doped silicon”, *Semiconductor Science and Technology* 25, 105007 (2010).

# Entwicklung von physikalischen Modellen für die Simulation von Si Solarzellen

Pietro P. Altermatt

Meine Habilitationsschrift umfasst 10 Veröffentlichungen [1 -10] im Bereich der Halbleiterphysik. Silizium Solarzellen werden simuliert, indem man die gekoppelten Halbleitergleichungen [11] numerisch löst:

$$\nabla \cdot (\epsilon \nabla \psi) = -q(p - n + N_{\text{don}}^+ - N_{\text{acc}}^-) \quad (1a)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{J}_n + G - R \quad (1b)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{J}_p + G - R \quad (1c)$$

Dabei sind  $\psi$ ,  $n$  und  $p$  das elektrostatische Potential sowie die Elektronen- und Lochdichten nach denen dieses Gleichungssystem gelöst wird. In der Poisson Gleichung sind noch die Dichten der ionisierten Dotanden gegeben. In den beiden unteren Kontinuitätsgleichungen stehen die Raten der Lichtgeneration  $G$  sowie der Rekombination  $R$  der Teilchen und der Stromfluss  $J$ .

Seit meiner Dissertation im Jahr 1997 habe ich mich im Wesentlichen mit der Entwicklung von Modellen beschäftigt, welche zu den Halbleitergleichungen hinzugefügt werden. Mit ihnen lassen sich zum Beispiel bestimmte Rekombinationseffekte in den Term  $R$  aufnehmen. Diese Modelle beruhen auf grundlegendem physikalischem Verständnis, und deswegen lassen sich aus dem Vergleich zwischen Simulationen und Experimenten folgende Schlüsse ziehen:

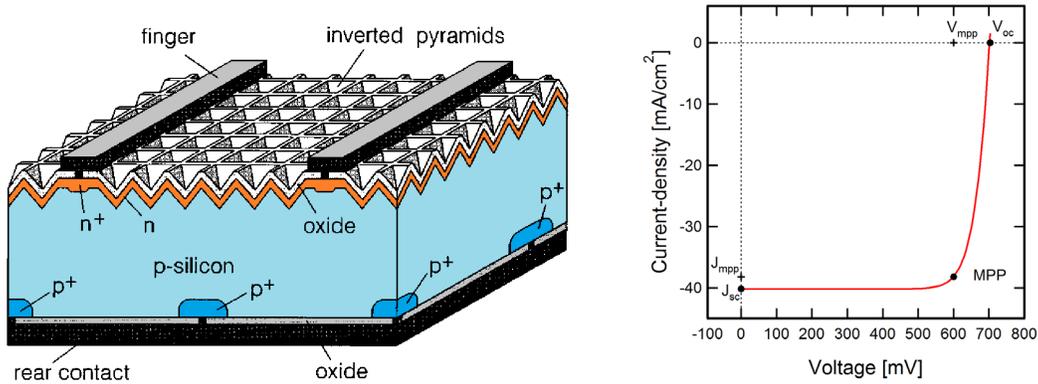
- Man kann grundlegende Silizium Materialparameter extrahieren, wie z.B. die intrinsische Dichte, oder
- das Verhalten von bestimmten Zellregionen untersuchen, wie z.B. die Sättigungs-Stromdichte  $J_0$  des Emitters. Beide Beispiele werden unten erläutert.

Eine weitere zentrale Absicht meiner Arbeiten ist, mittels dieser Modelle Solarzellen zu analysieren, die sich in Entwicklung oder schon in der Massenproduktion befinden. Solarzellen sind elektronische Bauteile die einen so hohen Komplexitätsgrad haben, dass man präzise Modelle benötigt um folgende Aufgaben zu erfüllen:

- Zuverlässige Vorhersagen machen, wie sich Änderungen in der Zellherstellung auf die Leistung der Zellen auswirken;
- Damit kann man effiziente Verbesserungsstrategien entwickeln;
- Auch das Potential von neuen Technologien lässt sich vorhersagen. Dies dient als Basis für Entscheidungen, welche von den vorhandenen Technologien weiter entwickelt werden soll.

Meine Arbeiten haben auf meinen früheren Erfahrungen aufgebaut, die ich an der University of NSW in Sydney, Australien, in der Arbeitsgruppe des alternativen Nobelpreisträgers Prof. M.A. Green erworben hatte. Ich trug mit Simulationen bei, Si Solarzellen mit Weltrekord-Wirkungsgrad zu verbessern [12, seither 92 mal zitiert]. Wie die Abbildung 1 zeigt [12] sind solche Zellen hochreine, perfekt passivierte, großflächige p-n Dioden, welche aus dem Standpunkt der Halbleiterphysik hervorragend geeignet sind, um Phänomene aufzuklären und physikalische Parameter zu bestimmen. An der Vorderseite wird der  $n^{++}$  *Emitter* in die p-Typ *Basis* diffundiert und der Frontkontakt angebracht; der Rückkontakt muss mit einer  $p^{++}$  Region, dem *back surface field* (BSF), versehen sein um hinreichend selektiv für Löchertransport zu sein. Eine solche Diode erzeugt bei Beleuchtung

die Strom-Spannung (I-V) Kennlinie wie auf Abbildung 1 gezeigt. Die größte Leistung, und damit den größten Wirkungsgrad, erzielt die Solarzelle am *Maximum Power Point* (MPP).



**Abbildung 1** Eine Hocheffizienz-Zelle der University of New South Wales, Sydney, Australien, mit denen der Autor die ersten Erfahrungen in Modellentwicklung gemacht hat. Links: Ausschnitt aus der Struktur [12]. Rechts: Die Strom-Spannungs (I-V) Kennlinie [13] mit dem *maximum power point* (MPP), wo die Leistung der Zelle,  $P = I \cdot V$ , am größten ist.

## Mehrteilcheneffekte

Mir ist dazumal aufgefallen, dass vor allem Mehrteilcheneffekte besser in die bestehenden Simulationsmodelle integriert werden müssen. Doch hatte ich nicht erwartet, dass Mehrteilcheneffekte selbst bei der Bestimmung der *intrinsischen Dichte*  $n_i$  eine wichtige Rolle spielen! In Abbildung 2 sind die damals am präzisesten gemessenen Werte von  $n_i$  eingetragen. Der durchschnittliche Wert von Sproul und Green [14] unterscheidet sich signifikant vom Wert von Misiakos and Tsamakis [15], und es war unklar, warum diese zwei unterschiedlichen Messverfahren unterschiedliche Werte liefern. Ich simulierte deshalb das erstere Experiment in seiner vollen Größe nach: Es war eine  $2 \times 2 \text{ cm}^2$  große Si Solarzelle in einem  $280 \mu\text{m}$  dicken Wafer eingebettet, und dessen Rückseite war dermaßen degradiert, dass der *Saturationsstrom*  $J_0$  direkt von der experimentellen I-V Kurve abgeleitet werden kann und nur von den folgenden Größen abhängt:

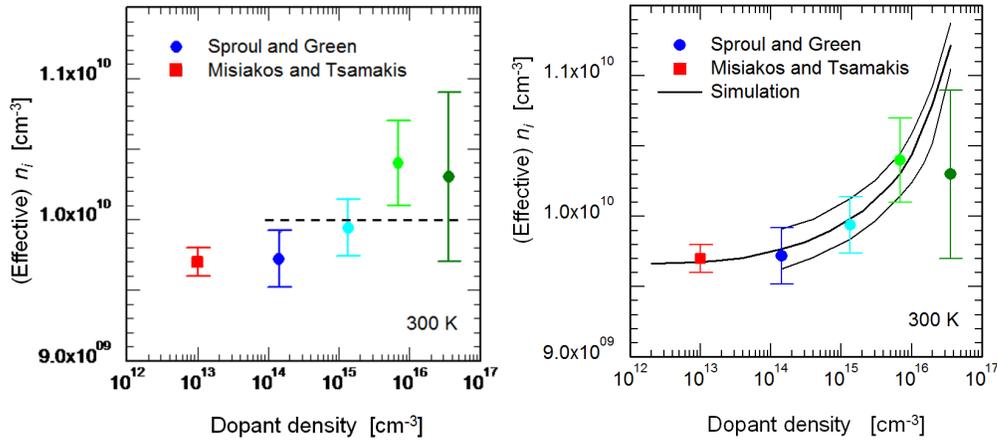
$$J_0 = qA \frac{n_i^2}{N_A} \frac{\coth(W/L)}{L}$$

Dabei ist  $N_A$  die Dotierdichte in der Basis,  $W$  die Dicke der Basis,  $L$  die Diffusionslänge in der Basis, sowie  $A$  die Fläche der Solarzelle. Alle diese Größen lassen sich unabhängig bestimmen. Um das Experiment in der Simulation reproduzieren zu können, musste ich allerdings eine quantenmechanisch begründete Theorie für die *Bandverengung*  $\Delta E_g$  von Schenk [16] wählen. Sie erklärt den Anstieg der  $n_i$  Werte zu höheren Dotierdichten  $N_{\text{dop}}$ :

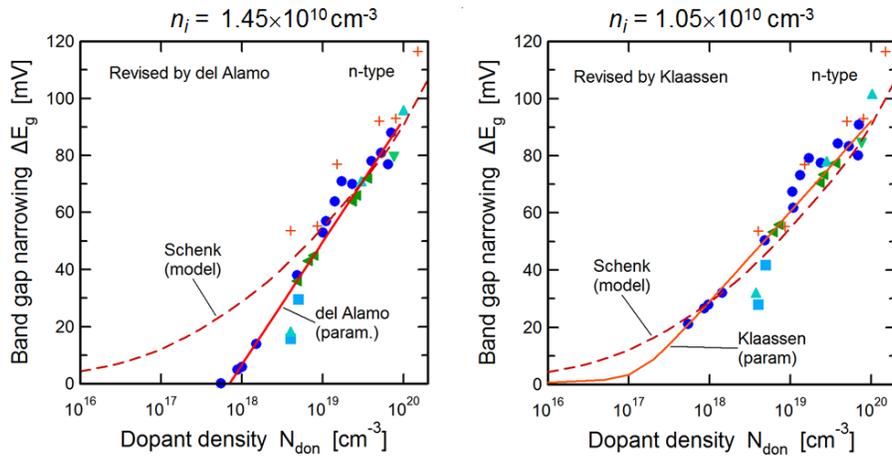
$$n_{i,\text{eff}} = n_i e^{\Delta E_g / (2kT)}$$

Das heißt, nur der Grenzwert zu sehr niedrigen  $N_{\text{dop}}$  hin stellt den eigentlichen  $n_i$ -Wert dar, und die anderen Werte sind das effektive  $n_i$  und entsprechend höher. Ein  $\Delta E_g$  in derart niedrigen Dotierbereich war dazumal ungewöhnlich, denn die gängige Meinung war, dass die Bandverengung erst ab  $N_{\text{dop}}$  von oberhalb  $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$

entsteht, siehe Abbildung 3 (links). Doch die gängige Meinung basierte auf  $\Delta E_g$  Experimenten wo ein höheres  $n_i$  in der Datenauswertung eingeflossen ist. Mit der Korrektur zu niedrigen  $n_i$  Werten hin erhöhte sich die Bandverengung bei kleinen  $N_{dop}$ , wie in der Datensammlung von Klaassen in Abbildung 3 (rechts) ersichtlich ist. Rückblickend hat die Überbewertung von  $n_i$  die Bandverengung zu kleineren Werten gezogen und bewirkte, dass die Bandverengung bei kleinen Dotierdichten komplett verschwunden erschien. Meine Simulationen zeigten, dass das von mir neu extrahierte  $n_i = 9.65 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$  [1] sehr konsistente Simulationen von unterschiedlichen Teststrukturen und Solarzellen ermöglicht.



**Abbildung 2** Links: Experimentell bestimmte Werte der intrinsischen Dichte  $n_i$  von Silizium [14,15]. Im Experiment von Sproul und Green wurde der Durchschnittswert als  $n_i = 1.08 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$  genommen. Rechts: Der Autor hat mit der Theorie von Schenk [16] gezeigt, dass das Experiment von Sproul und Green von Bandverengung  $\Delta E_g$  beeinflusst ist. Der eigentliche  $n_i$  Wert muss deshalb am linken Rand der Abbildung genommen werden, wo er  $9.65 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$  beträgt [1].

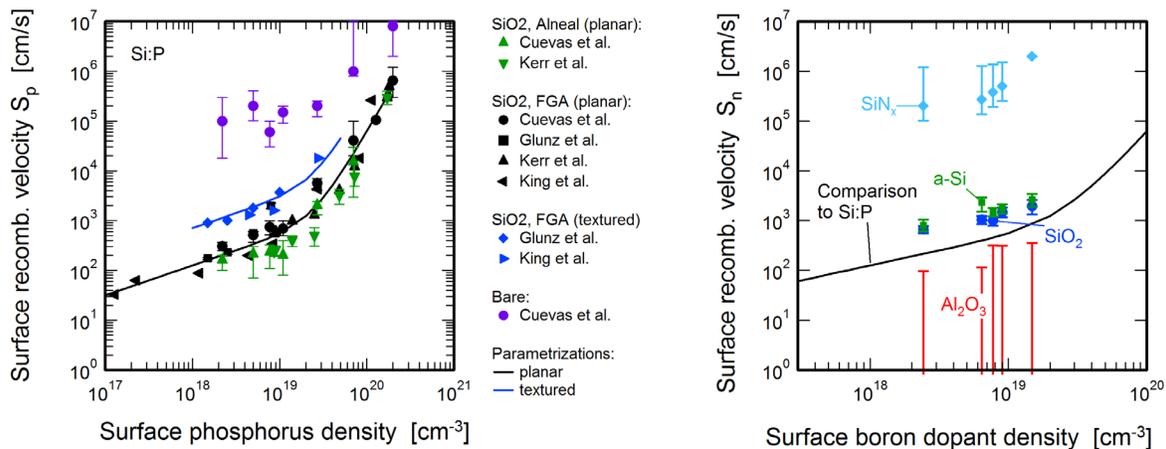


**Abbildung 3** Die gemessene Bandverengung wurde durch der Annahme eines zu großen  $n_i$  Wertes unterschätzt (links), und erst eine Revision des  $n_i$  Wertes durch den Autor machte die Theorie von Schenk [16] mit den experimentellen Werten (Symbole) verträglich.

## Hochdotiertes Silizium

Der Erfolg des Modells von Schenk für die Bandverengung hatte auch Konsequenzen für höher dotiertes Silizium: ich konnte mit dem Schenk Modell eine einwandfreie Selbstkonsistenz zwischen Auger Rekombination,  $\Delta E_g$ ,  $n_i$ , und Mobilität für freie Ladungsträger erreichen wie nie zuvor. Das folgende Beispiel soll dies verdeutlichen.

Beim Diffundieren des  $n^{++}$  Emitters werden unterschiedlich hohe Phosphordichten und Diffusionstiefen erreicht. Ist einer der oben genannten Modell-Parameter unstimmg, kommt es in der Simulation beim Vergleich z.B. von tiefen und flachen Diffusionsprofilen zu Widersprüchen. Allerdings fehlt gewöhnlich ein wesentlicher, fabrikationsabhängiger Parameter: Die *Oberflächenrekombinationsgeschwindigkeit*  $S$ . Da aber  $S$  der einzige unbekannt Parameter im Emitter ist, habe ich  $J_0$  in Abhängigkeit von  $S$  für eine umfangreiche Sammlung von Experimenten nachsimuliert und diejenigen  $S$ -Werte, mit denen ich die gemessenen  $J_0$ -Werte reproduzieren konnte, in Abbildung 4 aufgetragen[2]. Zum ersten Mal ist eine solche Auftragung von  $S$  über  $N_{dop}$  physikalisch sinnvoll und konsistent gelungen; in früheren Arbeiten waren die  $S$ -Werte manchmal von der Tiefe der Diffusion abhängig, oder sind bei hohen  $N_{dop}$  wieder rapide gesunken und sogar negativ geworden. Durch meine Simulationen wurde nicht nur Konsistenz in  $S$  erreicht, sondern auch die Widersprüche in früheren Experimenten und Simulationsmodellen erklärt. Dieses Modell wird inzwischen erfolgreich von anderen Forschungsgruppen angewandt. Zum Beispiel kann  $S$  (und damit die Oberflächengüte) von industriell gefertigten Emittlern konsistent beschrieben werden [17]. Oder bei der Einführung von  $Al_2O_3$  als Passivierschicht in die Photovoltaik haben sich die betroffenen Wissenschaftler auf meine Modelle gestützt um die hervorragend guten  $S$ -Werte, die mit  $Al_2O_3$  erzielt werden, in der Literatur darzustellen [7,43 mal zitiert]. Siehe Abbildung 4 (rechts).



**Abbildung 4** Die Rekombinationsgeschwindigkeit  $S$  von Phosphor- bzw. Bordiffundierten Oberflächen, extrahiert aus dem Vergleich zwischen experimentellen und simulierten  $J_0$  Werten der Diffusionen. Links für unterschiedlich fabrizierte Oxide auf planarer oder texturierter Oberfläche, rechts für unterschiedliche Dielektrika auf planarer Oberfläche.

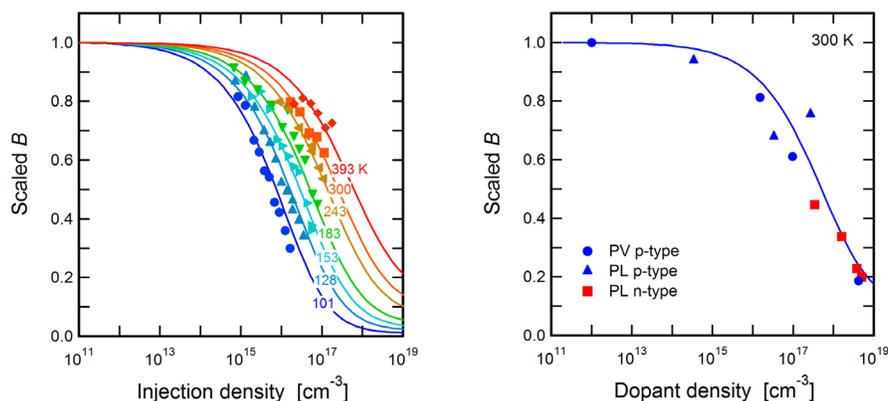
## Strahlende Rekombination

Als ich 2005 zu Herrn Prof. Rolf Brendel nach Hannover wechselte, habe ich mich in die kamerabasierten Photolumineszenz-Methode am ISFH eingearbeitet und es wurde mir bewusst, dass die Abhängigkeit der strahlenden Rekombinationsrate  $R_{\text{rad}}$  (von  $N_{\text{dop}}$  und der *Injektionsdichte*  $\Delta n$ ) einen Einfluss auf die Datenauswertung haben kann:

$$R_{\text{rad}} = Bpn = g_{eh}B_0pn$$

Dabei ist  $B$  der Koeffizient für strahlende Rekombination. Die Abhängigkeit  $g_{eh}$  von  $N_{\text{dop}}$  und  $\Delta n$  entsteht weil sich Elektronen und Löcher durch die Coulomb Wechselwirkung anziehen. Bei hohen  $N_{\text{dop}}$  oder  $\Delta n$  werden Elektron-Loch Paare so effektiv durch die vielen anderen Elektronen und Löcher abgeschirmt, dass die Elektronen und Löcher als freies Gas beschreiben werden können, wie dies in der einführenden Literatur in die Halbleiterphysik getan wird. Jedoch bei Trägerdichten unterhalb etwa  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  werden die Elektron-Loch Paare nicht mehr effektiv abgeschirmt, weil weniger andere geladene Teilchen existieren, und so ziehen sich die Elektron-Loch Paare gegenseitig an. Nun kann Rekombination nur dann geschehen, wenn sich die Wellenfunktionen der beiden Teilchen überlappen. Die anziehende Coulomb Wechselwirkung führt zu einem größeren Überlapp der beiden Wellenfunktionen und erhöht damit die Rekombinationsrate. Dies ist in Abbildung 5 zu sehen [3]: Die Symbole stammen von Messungen aus der Literatur, welche ich nach meinen Gesichtspunkten ausgewertet hatte, und die Linien wurden in einer Zusammenarbeit mit Schenk et al. mittels des Debye Potentials aus der Zweiteilchen Schrödinger-Gleichung gelöst.

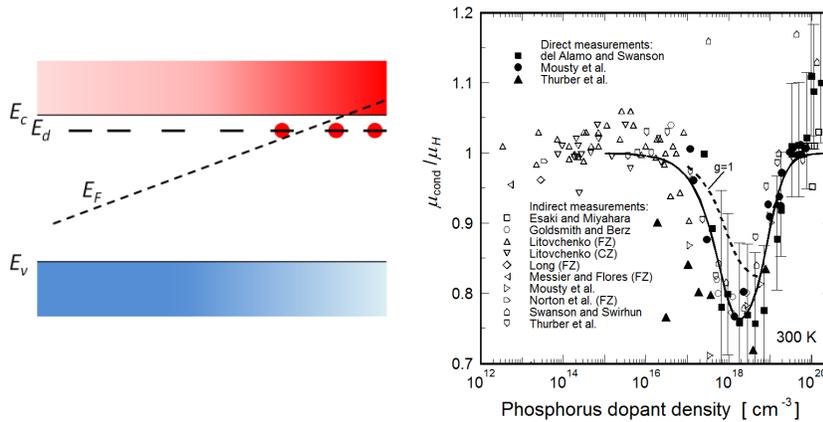
Diese Ergebnisse haben verschiedene Auswirkungen. Zum Beispiel bestehen große Bestrebungen [18], statt mit direkten Halbleitern nun mit Silizium optoelektronische Bauteile zu entwickeln um sie in die standardmäßige, Si-basierte ultra-large-scale integration (ULSI) Technologie zu integrieren. Um maximale Lichtemission zu erreichen, müssen die Bauteile bei optimalen Injektionsdichten und Dotierdichten betrieben werden [19]. Es ist gegenwärtig unklar, wie stark Silizium optimal strahlen kann, und ich habe von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) ein Projekt eingeworben um unter Anderem diese Frage näher zu untersuchen.



**Abbildung 5** Die Abhängigkeit des Koeffizienten für strahlende Rekombination von der Injektionsdichte  $\Delta n$  (links) bzw. von  $N_{\text{dop}}$  (rechts), aus Experimenten (Symbole) und berechnet (Linien) [3]. Die Abhängigkeit entsteht infolge der Coulomb Abschirmung der Elektronen und Löcher.

## Unvollständige Ionisierung

Ein weiterer Effekt bei hoher Dotierung ist die unvollständige Ionisierung der Dotanden. Dies geschieht aus rein statistischen Gründen, die in Abbildung 6 skizziert sind: Mit steigendem  $N_{\text{dop}}$  kommt die Fermi Energie  $E_F$  in die Nähe der Bandkantenenergie  $E_c$ . Kapp unterhalb  $E_c$  befinden sich die Dotierzustände bei  $E_d$ . Ihre Besetzungswahrscheinlichkeit steigt demnach an. Wäre das  $E_d$  unabhängig von  $N_{\text{dop}}$ , könnte man mittels Dotieren die Ladungsträgerdichten nicht höher als etwa  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  bringen, weil ein hohes  $N_{\text{dop}}$  zur Besetzung der Dotanden führen würde. Doch die Dotierzustände wandern mit steigendem  $N_{\text{dop}}$  an die Bandkanten (aufgrund der Wechselwirkung der Dotanden untereinander als auch der Coulomb Abschirmung). Der Autor hat den Grad der unvollständigen Ionisierung aus Experimenten der Literatur entnommen, welche die Mobilität bestimmen. Das mag überraschend klingen. Doch schaut man sich die Annahmen an, welche getroffen werden wenn sie aus Leitfähigkeit bzw. Hall Messungen die Mobilität extrahiert werden, gibt das Verhältnis der Leitfähigkeits- zur Hall Mobilität gerade den Ionisierungsgrad der Dotanden wider und ist auf Abbildung 6 (rechts) gezeigt. Es ist offensichtlich, dass bei  $N_{\text{dop}}$  von ungefähr  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  der Ionisierungsgrad am kleinsten ist. Gerade in diesem Dotierbereich befindet sich das Aluminium-dotierte back surface field (BSF) der meisten industriell hergestellten Si Solarzellen. Deshalb wurden nach dem Veröffentlichen von Abbildung 6 (rechts) bald in anderen Instituten Teststrukturen mit unterschiedlichen BSF hergestellt und analysiert, und der Einfluss der unvollständigen Ionisierung auf die Simulation des BSFs untersucht. Die Ref. [20] zeigt einen großen Datensatz der mit meinem Modell in konsistenter Weise simuliert werden konnte.



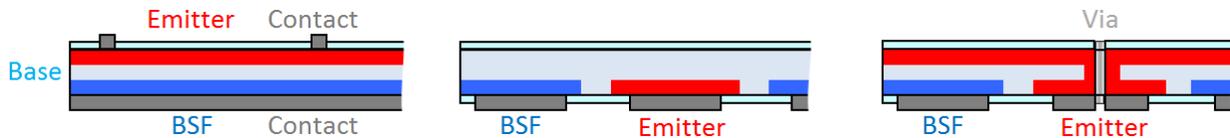
**Abbildung 6** Links: Nähert sich die Fermi Energie  $E_F$  mit wachsender Dotierung der Bandkante an, nimmt die Besetzungswahrscheinlichkeit des Dotierzustandes bei der Energie  $E_d$  zu und führt zur unvollständigen Ionisierung der Dotanden. Rechts: Bestimmung des Ionisierungsgrades aus dem Verhältnis der Leitfähigkeits- zur Hallmobilität durch den Autor [4,5] in Phosphordotiertem Silizium.

Bis vor kurzem wurden die gemessenen  $J_0$  Werte der BSFs von den Simulationsmodellen wesentlich unterschätzt. Das lag nicht nur an der unvollständigen Ionisierung der Al-Dotanden, sondern auch an den Aluminium-Sauerstoff Komplexen. Unter anderem hat ein Vergleich zwischen Simulation und Experiment dazu beigetragen, dass die Anzahl der Al-O wenigstens empirisch festgelegt werden konnte. Sie agieren im BSF als Rekombinationszentren und sind der wesentliche Grund für die erhöhten  $J_0$  Werte [10]. Erst mit der Berücksichtigung dieser Al-O Komplexe ist es dem Autor möglich geworden, industriell hergestellte Si Solarzellen hinreichend genau zu simulieren, um verlässliche Vorhersagen zu machen [21].

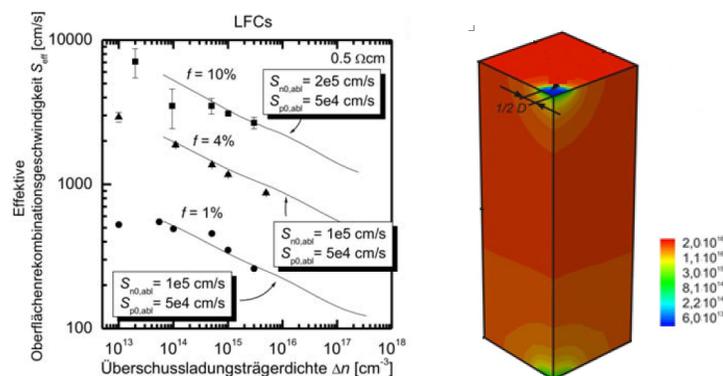
Wie oben gesagt, ist einer der zentralen Absichten meiner Arbeiten, mittels physikalisch begründeten Modellen diejenigen Silizium Solarzellen zu analysieren die sich in Entwicklung oder in der Massenproduktion befinden. Damit können zum Beispiel Verbesserungsstrategien entwickelt werden, sowie das Potential von neuen Technologien vorhergesagt werden. Im Folgenden gebe ich ein paar Beispiele, bei welchen dies den Doktorandinnen und Doktoranden der Universität Hannover bzw. des ISFHs unter meiner Betreuung gelungen ist.

## Laserschädigung

Am ISFH werden Herstellungsverfahren entwickelt, um mit Lasern die Si Wafer in sehr effizienter Weise zu strukturieren [22]. Damit können z.B. Zellkonzepte realisiert werden, bei welchen sich auf der Rückseite nicht nur das BSF, sondern auch den Emitter befinden und deshalb nur an der Rückseite mit Metallkontakten versehen werden müssen, siehe Abbildung 7 (Mitte) für ein Beispiel. Doch Laserbearbeitung führt eventuell auch zur Materialschädigung, d.h. zu zusätzlicher lokaler Rekombination! Dies muss vermieden werden. Um die Rekombination durch Laserschädigung zu quantifizieren, hat die Doktorandin Sonja Hermann mit dem Laser eine Reihe von SiO<sub>2</sub>-passivierten Wafern punktweise laserbearbeitet [23]. Die Punkte haben auf allen Wafern dieselbe gleichförmigen Anordnung, aber die Punktgröße variiert von Wafer zu Wafer. Es wurde der totale (d.h. durchschnittliche) S-Wert in Abhängigkeit von  $\Delta n$  für jede Waferoberfläche bestimmt und in Abbildung 8 als Symbole aufgetragen. Die Linien auf dieser Abbildung zeigen Simulationen dieses Experimentes. Dabei musste nur ein Viertel der symmetrischen Einheitsstruktur auf dem laserablatierten Wafern nachgebildet sein, siehe Abbildung 8 (rechts). Diese Linien beschreiben die experimentellen Punkte bei verschiedenen Punktgrößen nur für einen bestimmten Schädigungsgrad (ausgedrückt in S der bearbeiteten Flächen).



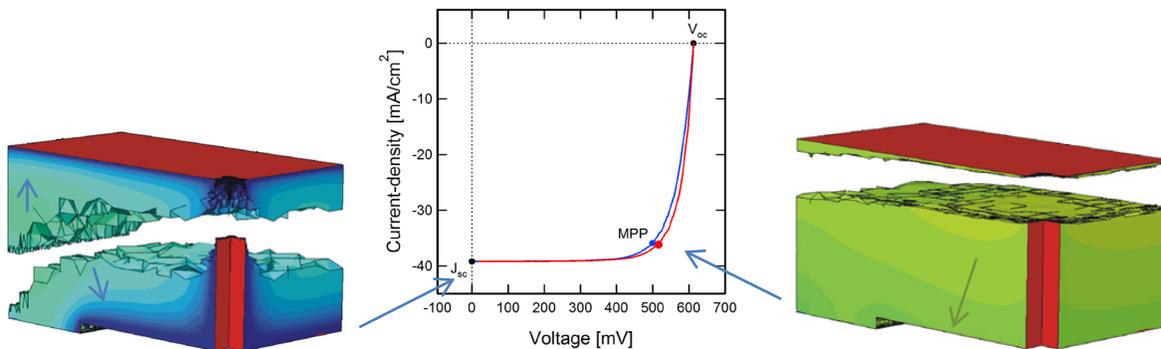
**Abbildung 7** Struktur der üblichen industriell hergestellten Si Solarzelle (links), und einer rückseitig kontaktierten Zelle (Mitte). Mittels Laser können Löcher (Via) im Wafer erzeugt werden [22], so dass der Emitter die Löcher umhüllt und in diesem emitter-wrap-through (EWT) Konzept von der Rückseite her kontaktiert werden kann (rechts).



**Abbildung 8** Links: Messung (Symbole) und Simulation (Linien) der durchschnittlichen Oberflächengeschwindigkeit  $S$  in Abhängigkeit der Injektionsdichte  $\Delta n$  für gleichförmig angeordnete Laserpunkte auf der SiO<sub>2</sub>-passivierten Oberfläche des Wafers für drei verschiedene Punktgrößen [23]. Rechts: Die Simulationsdomäne umfasst ein Viertel der symmetrischen Einheitsstruktur des Wafers.

## Löcher in Solarzellen

Platziert man sowohl das BSF als auch den Emitter an der Rückseite der Solarzelle, wie in Abbildung 7 (Mitte) gezeigt, müssen die Ladungsträger, die an der Vorderseite der Zelle durch Licht generiert werden, an die Rückseite diffundieren. Dies verursacht Transport- und Rekombinationsverluste. Im dem folgenden Zellkonzept werden deshalb mit dem Laser eine große Anzahl Löcher im Wafer erzeugt, siehe Abbildung 7 (rechts), so dass bei der nachfolgenden Phosphordiffusion ein Emitter an der Vorderseite entsteht, der die Löcher umhüllt und deshalb von der Rückseite her kontaktiert werden kann. Dieses Solarzellenkonzept heißt emitter wrap-through (EWT). Der Transport der lichtgenerierten Ladungsträger zu den Rückkontakten hin erfolgt demnach nicht nur mittels Diffusion durch die Basis, sondern zusätzlich mittels Drift entlang des Emitters. Die gängige Erwartung ist deshalb, dass durch diese Struktur die Solarzelle auf jeden Fall besser wird, da der Stromfluss erhöht ist. Doch ist bis vor kurzem die Strom-Spannungs (I-V) Kurven dieser Zellen runder verlaufen als in Standard Solarzellen, und hat den Wirkungsgrad der Zelle reduziert, wie auf Abbildung 9 (Mitte) als blaue Kurve dargestellt ist. Dieses Verhalten wird mit einem kleineren Füllfaktor  $FF = J_{mpp} V_{mpp} / J_{sc} V_{oc}$  charakterisiert. Die gängige Meinung war, dass der verminderte  $FF$  durch Widerstandsverluste zustande kommt, und Verbesserungsstrategien konzentrierten sich hauptsächlich darauf, den Widerstand in den Löchern zu verkleinern. Mit bescheidenem Erfolg.



**Abbildung 9** Simulation der Elektronendichte in EWT Solarzellen. Durch solche Simulationen ist bekannt geworden [8], dass nur bei kleinen Spannungen (links) ein beachtlicher Teil der lichtgenerierten Elektronen mittels Diffusion in der Basis nach vorne durch den vorderen Emitter abfließt; am MPP (rechts) fließt ein großer Teil der lichtgenerierten Elektronen direkt nach hinten. Mittels Simulationen kann die optimale Rückseite der Zellen eruiert werden, so dass möglichst viele Elektronen am MPP durch den vorderen Emitter abfließen können. Die blaue I-V Kurve hat einen kleineren  $FF$ , und deshalb eine kleinere Zelleffizienz, als die rote I-V Kurve.

Der Doktorand Christian Ulzhöfer hat mit meiner Hilfe zum ersten Mal die EWT Zellen mit einem vollständigen drei-dimensionalen Modell simuliert [8]. Er hat dabei herausgefunden, dass der  $FF$  nicht einfach mittels des Serienwiderstandes in den Löchern erklärbar ist. Durch den Widerstand im Loch befindet sich der Emitter an der Vorderseite der Zelle auf einem höheren Potential, und dadurch fließen viele lichtgenerierte Ladungsträger durch die Basis statt durch den Emitter nach hinten zu den Kontakten. Diese Diffusionsströme erhöhen die Rekombinationsverluste in der Basis. Das heißt, der Widerstand wirkt als Verstärker der Rekombinationsverluste, und es sind deshalb hauptsächlich die Rekombinationsverluste, die den  $FF$  verkleinern. Die Abbildung 9 zeigt zum Beispiel, dass eine typische EWT Zelle am maximum power point bereits eine

rücksammelnde Zelle ist. Reduziert man aber einerseits den Widerstand der Basis (statt den Widerstand der Löcher), und passt man gleichzeitig auch die Struktur der Rückseite so an dass sich die Strompfade in der Basis minimieren, ist es für lichtgenerierte Ladungsträger vorteilhaft, durch die Löcher statt durch die Basis an die Rückseite zu gelangen, und der  $FF$  erhöht sich. Christian Ulzhöfer hat am Schluss seiner Doktorarbeit EWT Zellen mit einem ungewohnt hohen  $FF$  hergestellt, obwohl der Emitter im Loch einen unüblich hohen Schichtwiderstand von  $110 \Omega/\text{sq}$  aufwies!

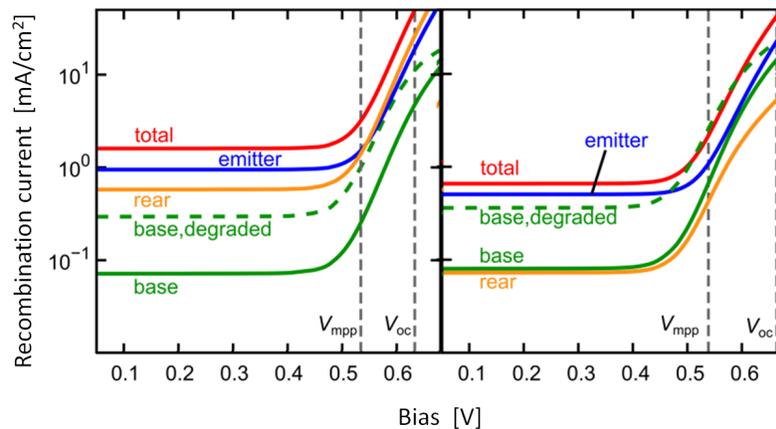
Man mag sich im Nachhinein wundern, warum solche Resultate nicht schon vor diesen Simulationen einfach durch Ausprobieren im Experiment gelungen sind. Der Grund liegt in der Komplexität der Solarzellen: Es reicht oft nicht aus, im Experiment nur einen Parameter zu verändern (z.B. den Widerstand der Basis), sondern man muss gleichzeitig auch noch andere Veränderungen vornehmen um signifikante Verbesserungen zu erzielen (in diesem Falle die Struktur der Rückseite verändern, d.h. die Anordnung des Emitters und des BSFs). Da in Solarzellen nun mal die elektrostatischen Potentiale und die Transportprozesse via Gleichung (1) miteinander gekoppelt sind, lässt sich der Fortschritt nur schwer erzielen, indem man nur am einen dieser beiden Parameter arbeitet – vor allem nicht in neuen Zellkonzepten mit stark lateraler Struktur.

## Industriell hergestellte Solarzellen

Für mich ist es eine Genugtuung, wenn ich durch das Entwickeln von physikalischen Modellen helfen kann Solarzellen zu verbessern, die industriell im großen Masse hergestellt werden, d.h. wenn aus einem physikalischen Verständnis heraus (z.B. unvollständige Ionisierung) einen Beitrag zur Veränderung der Welt geleistet wird (z.B. die Klimaerwärmung gehemmt wird). Als ich nach dem Erfolgreichen Simulieren der Solarzellen mit Weltrekord-Wirkungsgrad versucht habe, industriell gefertigte Solarzellen zu simulieren, war mir dies spontan nicht möglich. Im Gegensatz zu Weltrekord-Solarzellen sind die Industriezellen nun mal nicht hochreine und perfekt passivierte p-n Dioden; stattdessen ist der Emitter sehr hoch dotiert (und von Mehrteilcheneffekten dominiert), es ist dabei kaum eine Oberflächenpassivierung möglich (d.h. eine Verkleinerung von  $S$ ), und die Al-O Defekte verschlechtern das BSF.

Um Industriesolarzellen zu verstehen, kann man vom allgemeinen Funktionsprinzip der Solarzellen ausgehen: Mit Licht generiert man die Rate  $G$  an Elektron-Loch Paaren, unabhängig von der Spannung  $V$  an den Metallkontakten. Doch die Rekombinationsrate  $R(V)$  steigt exponentiell mit  $V$  an, da die Injektionsdichte  $\Delta n$  exponentiell mit  $V$  ansteigt. Zudem greift man den Strom  $J(V) = G - R(V)$  ab. Mittels der Simulation kann man die Rekombinationsverluste  $R(V)$  für alle Zellregionen separat berechnen. Die Abbildung 10 zeigt  $R(V)$  einer am ISFH industrienah gefertigten Solarzelle [24] (links) sowie eine Vorhersage für eine verbesserte Industriesolarzelle (rechts) die noch nicht hergestellt wurde [9]. Die Doktorandin Silke Steingrube hat für die Simulation der gefertigten Zelle (links) unabhängig gemessene Inputparameter verwendet (z.B. des Dotierprofils,  $S$ , usw.) und damit das Verhalten dieser Zelle gut reproduziert. Weil diese Simulationen auch die hier entwickelten Modelle für die Mehrteilcheneffekte im Emitter enthalten, sowie für die Defekte im BSF, ist die Vorhersage für einen verbesserten Emitter und ein verbessertes BSF auf Abbildung 10 (rechts) verlässlich. Doch die Vorhersage stimmt nicht mit den tendenziellen Erwartungen der PV Industrie überein: Die Simulationen sagen eine Verkleinerung des Füllfaktors  $FF$  voraus, und damit wird es schwierig sein, mit heutigen Wafermaterial mehr als 19.5% Wirkungsgrad zu erreichen. Als Grund für ein solches Verhalten des  $FF$  werden gewöhnlich die hohen

Widerstandsverluste im verbesserten Emitter angegeben, und diese lassen sich z.B. mit Veränderungen in den Metallfingern an der Frontoberfläche der Zellen vermeiden. Doch der hauptsächliche Grund für den niedrigen  $FF$  ist auf der Abbildung 10 (rechts) direkt ersichtlich: Die Rekombinationsverluste  $R(V)$  in der Basis flachen mit steigender Spannung  $V$  ab (gestrichelte Linie). Dies rührt daher, weil mit steigendem  $V$ , und damit mit steigendem  $\Delta n$ , die Lebensdauer der lichtgenerierten Ladungsträger ansteigt. Dieser Effekt kommt durch die Bildung von Bor-Sauerstoff Komplexen im Wafer unter Beleuchtung zustande. Er wird B-O Degradation genannt und wird am ISFH intensiv erforscht [25]. Durch die Degradation steigt die Rekombination in der Basis an, von der ausgezeichneten zu den gestrichelten Kurven in Abbildung 10. Statt eine Verbesserungsstrategie zu wählen, bei der die Widerstandsverluste des Emitters verkleinert werden, ist es wesentlich effizienter z.B. den Sauerstoffgehalt des Wafermaterials zu verkleinern, Methoden zur Deaktivierung der B-O Komplexe zu finden, oder Gallium-dotierte statt Bor-dotierte Wafer zu verwenden. Eine weitere Möglichkeit ist die Produktion auf n-Typ Wafer umzustellen – was jedoch eine Entwicklung eines  $p^{++}$  statt eines  $n^{++}$  Emitters benötigt. Da die Optimierung des Emitters und die Reduktion der Rekombinationsverluste in der Basis zwei sehr unterschiedliche Strategien sind, setze ich mich dafür ein, dass dieses Wissen schon jetzt in der Langzeitstrategie zur Produktionsverbesserung berücksichtigt wird. Ich habe vom BMU (Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit) ein Projekt am Laufen um unter Anderem solche Verbesserungsstrategien für die Massenfabrikation von Si Solarzellen zu entwickeln.



**Abbildung 10** Die simulierten Rekombinationsverluste  $R(V)$  [9] in einzelnen Regionen einer industriennah fabrizierten Zelle [24] (links) und eine Vorhersage mit verbessertem Emitter und BSF (rechts). Durch Lichteinwirkung wird der Bor-Sauerstoff Komplex gebildet und degradiert das Wafermaterial [25], was die Rekombinationsverluste in der Basis erhöht (gestrichelte Linien).

Anhand von diesen Beispielen habe ich für Sie dargelegt, wie ich mittels Modellentwicklung und Simulation den Bogen vom grundlegenden physikalischen Verständnis bis hin zur Entwicklung von Verbesserungsstrategien für Industrie-Solarzellen gespannt habe. Ich hoffe, ich habe Ihnen damit einen interessanten Einblick in dieses aktuelle Forschungsgebiet gegeben.

Mit freundlichen Grüßen

## Referenzen

- [1] P. P. Altermatt, A. Schenk, F. Geelhaar, G. Heiser "Reassessment of the intrinsic carrier density in crystalline silicon in view of band gap narrowing", *Journal of Applied Physics* 93, 1598 – 1604 (2003).
- [2] P. P. Altermatt, J. O. Schumacher, A. Cuevas, M. J. Kerr, S. W. Glunz, R. R. King, G. Heiser, A. Schenk, "Numerical modeling of highly doped Si:P emitters based of Fermi-Dirac statistics and self-consistent material parameters", *J. Appl. Phys.* 92, 3187 – 3197 (2002).
- [3] P. P. Altermatt, F. Geelhaar, T. Trupke, X. Day, A. Neisser, E. Daub, "Injection dependence of spontaneous radiative recombination in crystalline silicon: experimental verification and theoretical analysis", *Applied Physics Letters* 88, 261901 (2006).
- [4] P. P. Altermatt, A. Schenk, B. Schmihüsen, G. Heiser, "An empirical model for the density-of-states and for incomplete ionization in crystalline silicon. I: Establishing the model in Si:P", *Journal of Applied Physics* 100, 113714 (2006).
- [5] P. P. Altermatt, A. Schenk, B. Schmihüsen, G. Heiser, "An empirical model for the density of states and for incomplete ionization in crystalline silicon. II: investigation of Si:As and Si:B, and usage in device simulation", *Journal of Applied Physics* 100, 113715 (2006).
- [6] P.P. Altermatt, "Models for numerical device simulations of crystalline silicon solar cells – a review", *Journal of Computational Electronics* 10, 314 – 331 (2011) (invited paper).
- [7] B. Hoex, J. Schmidt, R. Bock, P. P Altermatt, M. C. M. van de Sanden, and W. M. M. Kessels, "Excellent passivation of highly doped p-type Si surfaces by the negative charge-dielectric Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>", *Applied Physics Letters* 91, 112107 (2007).
- [8] C. Ulzhöfer, P. P. Altermatt, N.-P. Harder, R. Brendel, "Loss analysis of emitter-wrap-through (EWT) silicon solar cells by means of experiment and three-dimensional device modeling", *Journal of Applied Physics* 107, 104509 (2010).
- [9] S. Steingrube, H. Wagner, H. Hannebauer, S. Gatz, R. Chen, S.T. Dunham, T. Dullweber, P.P. Altermatt, R. Brendel, "Loss analysis and improvements of industrially fabricated Cz-Si solar cells by means of process and device simulations", *Energy Procedia* 8, 263 – 268 (2011).
- [10] R. Bock, P.P. Altermatt, J. Schmidt, R. Brendel, "Formation of aluminum–oxygen complexes in highly aluminum-doped silicon", *Semiconductor Science and Technology* 25, 105007 (2010).
- [11] W. van Roosbroeck, "Theory of the flow of electrons and holes in Germanium and other semiconductors", *Bell Syst. Tech. J.* 29, 560 (1950)
- [12] J. Zhao, A. Wang, P. P. Altermatt, M. A. Green, "Twenty-four percent efficient silicon solar cells with double layer antireflection coatings and reduced resistance loss", *Applied Physics Letters* 66, 3636 – 3638 (1995).
- [13] Zelle w413-9, vom Autor an der UNSW gemessen.
- [14] A.B. Sproul, M.A. Green, J. Zhao, "Improved value for the silicon intrinsic carrier concentration at 300 K", *Appl. Phys. Lett* 57, 255 (1990)
- [15] K. Misiakos and D. Tsamakis, "Accurate measurements of the silicon intrinsic carrier density from 78 to 340 K", *J. Appl. Phys.* 74, 3293 (1993).
- [16] A. Schenk, "Finite-temperature full random-phase approximation model of band gap narrowing for silicon device simulation", *J. Appl. Phys.* 84, 3684 (1998).
- [17] A. Kimmerle, A. Wolf, U. Belledin, D. Biro, "Modelling carrier recombination in highly phosphorus-doped industrial emitters", *Energy Procedia* 8 275–281 (2011).
- [18] D. A. B. Miller, "Rationale and challenges for optical interconnects to electronic chips", *Proceedings of the IEEE* 88, 728 – 749 (2000).
- [19] M. A. Green, J. Zhao, A. Wang, P. J. Reece, M. Gal, "Efficient silicon light-emitting diodes", *Nature* 412, Issue 6849, 805 – 808 (2001).
- [20] M. Rüdiger, M. Rauer, C. Schmiga, M. Hermle, "Effect of incomplete ionization for the description of highly aluminum-doped silicon", *J. Appl. Phys.* 110, 024508 (2011).
- [21] P. P. Altermatt, S. Dreissigacker, Y. Yang, C. Sprodowski, T. Dezhdar, S. Koc, B. Veith, S. Herrman, R. Bock, K. Bothe, J. Schmidt, R. Brendel, "Highly predictive modelling of entire Si solar cells for industrial applications", 24th European Photovoltaic Solar Energy Conference, Hamburg, Germany, 2009, pp. 901 – 906.
- [22] ISFH, Gruppe "Wafersolarzellen", unter Leitung von Prof. Nils-Peter Harder.
- [23] S. Herrman, "Laserstrahlablation von SiO<sub>2</sub>-Passivierschichten mit Anwendung auf die RISE-EWT-Solarzelle" (Laser ablation of SiO<sub>2</sub> passivation layers with applications to the RISE-EWT solar cell), PhD Thesis, ISFH, 2010.
- [24] ISFH, Gruppe „Produktionsprozesse“ unter Leitung von Dr. Thorsten Dullweber.
- [25] ISFH, Gruppe „PV Materialforschung“ unter Leitung von Prof. Jan Schmidt.