

a-Si_{1-x}Ge_x:H 化合物 p-i-n 太陽電池의 物理 및 電流密度-電壓 特性

權 永植*

서울대학교 電氣工學科

Physics and current density-voltage characteristics of a-Si_{1-x}Ge_x:H alloy p-i-n solar cells

Youngshik Kwon

Dept. of Electrical Eng., Seoul National University

Abstract— The effects of Ge composition variation in a-Si_{1-x}Ge_x:H alloy p-i-n solar cells on the physical properties and current density-voltage characteristics are analyzed by a new simulation modelling based on the update published experimental datas. The simulation modelling includes newly formulated density of gap density spectrum corresponding to Ge composition variation and utilizes the newly derived generation rate formulars which include the reflection coefficients and can apply to multijunction structures as well as single junction structure. The effects in a-Si_{1-x}Ge_x:H single junction are analyzed through the efficiency, fill factor, open circuit voltage, short circuit current density, free carriers, trap carriers, electric field, generation rate and recombination rate. Based on the results analyzed in single junction structure, the applications to multiple junction structures are discussed and the optimal conditions reaching to a high performance are investigated.

1. 序論

a-Si:H에 Ge를 첨가시키면 bandgap 에너지를 낮추어 長波長의 太陽光의 흡수에 효과적이어서 多重接合 太陽電池의 bottom cell로 이용될 경우에 全體性能의 향상을 기대할 수가 있다. 본 論文은 새로운 simulation modelling을 통하여 AM 1.5 太陽光下에서 Ge 造成比變化에 대한 a-Si_{1-x}Ge_x:H 化合物 p-i-n 太陽電池의 諸 物理的 性質의 變化 및 電流密度-電壓 特性 變化의 傾向을 單重接合, 二重接合, 三重接合構造에 걸쳐서 比較-分析한다.

본 論文에서의 simulation modelling은 bandgap 에너지 1.72 eV a-Si:H 單重接合 太陽電池에 대한 Hack & Shur[1]와 Misiacos & Lindholm[2]의 이론적 modelling에 기초하고 있다. 그러나 최신의 실험적 결과를 바탕으로 Ge 造成比變化에 대응하는 새로운 gap state 密度 分布가 형성되었고, deep state 및 tail state를 모두 고려했으며, 反射係數를 반영하고 單-多重接合 모두에 적용될 수 있는 새로운 光發生 率式이 유도되어 이용되었다. 光吸收係數는 많은 실험적 결과로부터 AM 1.5 太陽光하의 모든 光에너지와 모든 Ge 造成比(0.0~1.0)에 대응

하는 값이 주어질 수 있도록 再形成되었다.

以下에서는 본 研究에서 이용되는 simulation modelling에 대하여 소개한 후, a-Si_{1-x}Ge_x:H 單重接合 太陽電池의 諸 物理的 性質 및 J-V 特性에 대한 해석을 수행하고, 이를 바탕으로 하여 多重接合에서의 應用可能性과 최상의 性能을 가져올 수 있는 構造에 대하여 論議한다.

2. Computer simulation modelling

본 研究에서 새롭게 형식화된 부분에 대하여 集中하여 소개한다.

2.1 半導體 基本方程式

본 研究에서의 simulation 결과는 다음의 (1)-(5) 식과 같은 두 개의 自由電送子 連續方程式, Poisson 方程式 및 두 개의 電流密度 方程式의 연립된 解에 근거하고 있다.

$$-\frac{1}{q} \frac{dj_n}{dx} = G(x) - R(x), \tag{1}$$

$$\frac{1}{q} \frac{dj_p}{dx} = G(x) - R(x), \tag{2}$$

$$\frac{dE}{dx} = \rho(x), \tag{3}$$

$$j_n = q\mu_n(nE + kT/q \, dn/dx), \tag{4}$$

$$j_p = q\mu_p(pE - kT/q \, dp/dx). \tag{5}$$

2.2 gap state 密度分布圖

Deep 및 tail state를 모두 고려할 때, a-Si_{1-x}Ge_x:H 化合物의 acceptorlike state와 donorlike state는 각각 다음과 같이 주어진다 고 가정할 수 있다[3].

$$g_a(E) = g(E_c) \exp\left(\frac{E - E_c}{E_{at}}\right) + g_{amin} \exp\left(\frac{E - E_m}{E_{ad}}\right), \tag{6}$$

$$g_d(E) = g(E_v) \exp\left(\frac{E_v - E}{E_{dt}}\right) + g_{dmin} \exp\left(\frac{E_m - E}{E_{dd}}\right). \tag{7}$$

여기서 E_{at}, E_{ad}, E_{dt}, E_{dd}는 그림1에 보여지고 있는 바와 같은 特性에너지기울기이다.

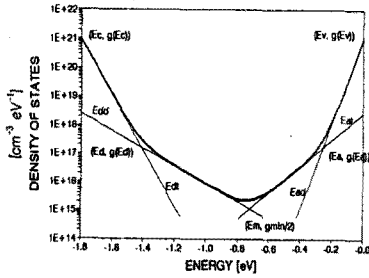


그림1 Gap state 密度分布圖(intrinsic 1.8 eV a-Si:H)

본 研究에서는 band edge에서의 狀態密度인 $g(E_c)$ 와 $g(E_v)$ 는 10^{21} cm^{-3} 으로 고정된 것으로 본 반면에, acceptorlike 및 donorlike state의 最小狀態密度 g_{\min} , g_{\min} 는 각각 전체의 最小狀態密度的 1/2이라고 가정하고 Ge 造成比 및 doping의 程度에 따라 변화하도록 하였고 이에 따라 각 特性에너지기울기도 변화하도록 하였다. 전체의 最小狀態密度는 Ge 造成比와 doping의 程度에 의하여 다음과 같이 변화하도록 하였다.

$$g_{\min}(x, \text{undoped}) = g_{\min}(x=0, \text{undoped}) \exp(mx), \quad (8)$$

$$g_{\min}^n(x, \text{doped}) = g_{\min}(x, \text{undoped}) (N_a/d_{sp})^{p_n}, \quad (9)$$

$$g_{\min}^n(x, \text{doped}) = g_{\min}(x, \text{undoped}) (N_d/d_{dn})^{p_n}. \quad (10)$$

여기서 N_a 와 N_d 는 각각 acceptor와 donor의 濃度이고, m , d_{sp} , d_{dn} , p_n 은 각각 실험값을 반영하는 媒介常數이다[4-8].

본 研究에서는 a-Si:H의 bandgap 에너지를 많은 실험상의 보고가 1.8 eV를 기준으로 하고 있음을 감안하여 1.8 eV로 보고, Ge 造成比에 따라 다음과 같은 線形關係를 가지도록 하였다[4-8].

$$E_g = 1.8 - 0.8x. \quad (11)$$

2.3 空間電荷密度와 再結合率

空間電荷密度와 再結合率은 각각 다음 식들과 같이 주어지는데 각 구성부분이 전자농도 n 과 정공농도 p 의 函數로 표현될 수 있다[1, 2, 9].

$$p(x) = q(p - n + p_i - n_i + N_d' - N_a'), \quad (12)$$

$$R(x) = (pn - n_i^2) C v \sigma_n \left(\frac{1}{n + C p} \int_{E_v}^{E_c} g_n(E) dE + \frac{1}{nC + p} \int_{E_v}^{E_c} g(E) dE \right) \quad (13)$$

여기서 p_n 와 n_n 는 정공 및 전자 trap 농도를, N_d' , N_a' 는 이온화된 dopant의 농도를, n_i 는 intrinsic 電送子濃度를, v 는 전자의 熱速度를 각각 나타낸다. C 는 電荷를 띤 trap의 cross section σ_c 와 中性인 trap의 cross section인 σ_n 의 比로 에너지 level에 독립적이라고 가정된다.

2.4 光發生率

前方の 内部表面 및 後方反射面의 反射係數를 반영하고, 多重接合의 경우에는 두께가 무시될 수 있는 高性能의 얇은 insulator를 이용하여 각 cell의 界面에서 이상적인 tunneling이 일어난다고 가정하며[10], 실제로는 doping된 영역의 光吸收係數가 doping되지 않은 영역에 비하여 약간 크지만 유도의 단순화를 위해서 양 영역에서 동일하다는 가정을

하여 새로운 光發生率式을 유도하였는 바, 이 곳에서는 二重接合의 光發生率式을 소개한다.

- Top cell의 光發生率式

$$G_t(x) = \sum_{AM1.5} \frac{t_s F_0 \alpha_i}{1 - r_i r_f f_b} (e^{-\alpha_i x} + r_f f_b e^{\alpha_i(x-l)}), \quad (14)$$

- Bottom cell의 光發生率式

$$G_b(x) = \sum_{AM1.5} \frac{t_s F_0 \alpha_b}{1 - r_i r_f f_b} (e^{-\alpha_b(x-l)} + r_f f_b e^{\alpha_b(x-l)}). \quad (15)$$

여기서, $f_t = e^{-\alpha_i l}$, $f_b = e^{-\alpha_b(l-l)}$ 이고, t_s 는 맨처음 입사광의 表面透過係數이며, F_0 는 AM1.5 太陽光의 要素 flux, r_i 는 前方の 内部表面의 反射係數, r_f 는 後方 反射面의 反射係數, x 는 前方表面으로부터의 길이, 그리고 l 와 b 는 각각 top cell 및 bottom cell을 나타내어 α 는 光吸收係數, l 은 前方表面으로부터 각 cell의 末端까지의 길이이다. 光發生率에 이용되는 光吸收係數는 그림2와 같이 새로이 再形成된 關係曲線을 이용한다[4-8].

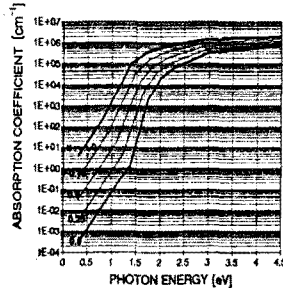


그림2 Ge 造成比에 대응하는 光에너지-光吸收係數 關係曲線

2.5 境界條件 및 simulation setting

電界가 0인 영역에서 $p(x) = 0$, $G(x) = R(x)$ 이라는 두 조건을 써서 境界값을 구해냈으며, 이 값을 기초로 (1)-(5)식의 非線形聯立方程式이 finite difference method와 Newton method를 써서 반복적으로 풀려진다. 본 simulation에서는 각 cell의 subsection을 720개로 나누어 모든 subsection의 반복 error가 10^{-4} 이하가 되도록 하였다. 입력 data는 가능한 실험값에 일치시켜, C 는 100, σ_n 는 $1.7e-11 \text{ cm}^2/\text{sec}$, d_{sp} , d_{dn} 는 각각 $5.0e+17 \text{ cm}^{-3}$, m 은 7.102, μ_n 은 $10 \text{ cm}^2/\text{Vsec}$, μ_p 는 $1 \text{ cm}^2/\text{Vsec}$, n 은 0.12, r_i 는 0.7, t_s 는 0.97, N_a , N_d 는 각각 $1.0e+19 \text{ cm}^{-3}$, $g_{\min}(x=0.0, \text{undoped})$ 는 $2.215e+15 \text{ cm}^{-3}$ 를 적용하였다. 入射光은 p type layer쪽으로 입사하도록 했으며, 공히 AM 1.5 태양광(83.18 mW cm^{-2})을 적용하였다. 單重接合에서는 길이를 6000 Å으로 고정 한 후 Ge 造成比變化에 대응하는 諸物理的 性質의 變化 및 J-V 特性의 變化를 해석하였고, 多重接合의 경우에는 Ge 造成比變化를 주요 parameter로 이용하였으나 current matching과 光安定性의 도모를 위해서 要素 cell의 길이의 변화 혹은 탄소의 注入동을 고려하는 접근방법을 채택하였다. Doping된 영역은 공히 100 Å으로 設定하였다.

3. 結果 및 考察

單重接合에서의 Ge의注入은 全般적으로 性能의 低下를 보여주었으나, 二重接合 혹은 三重接合에서는 Ge을 注入하여 bottom cell로 이용되는 경우에는 현저한 性能향상을 나타내었다.

3.1 a-Si_{1-x}Ge_x:H 單重接合 太陽電池

그림3에 보여지고 있는 J-V 特性에서 알 수 있는 바와 같이, Ge 造成比의 증가에 따라 a-Si_{1-x}Ge_x:H 太陽電池의 性能은 短絡電流密度(혹은 電流密度)를 제외하고는 전반적인 하락을 보여주었다.

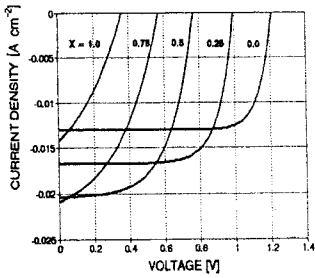


그림3 a-Si_{1-x}Ge_x:H 單重接合 太陽電池의 電流密度-電壓 特性

Ge 造成比를 0.0→0.25→0.5→0.75→1.0으로 변화시켰을 때, 短絡電流密度는 그 절대값에 있어 13.0→16.7→20.4→20.9→14.2 mA/cm²로 Ge 造成比 0.0인 경우에 비하여 증가하는 반면에 效率는 15.1→14.6→11.0→5.9→2.1 %로, fill factor는 0.80→0.73→0.59→0.41→0.34로, 開放電壓은 1.207→0.993→0.768→0.572→0.360로 각각 하락하였다. 따라서 單重接合에서의 Ge의注入은 실제로 응용에 있어 유용하지 않음을 알 수 있으나, 短絡電流密度的 증대는 多重接合에서의 Ge의 응용가능성을 암시해준다.

거의 線形的 關係를 보여주는 開放電壓의 감소는 bandgap 에너지의 감소에 대응하는 것이며, fill factor의 급격한 감소는 gap state의 증가에 대응하는 再結合律의 상대적 증가에 기인하는 것이다. 따라서 短絡電流密度的 증가에도 불구하고 效率特性은 점점 악화하게 된다. 短絡電流密度가 Ge 造成比 0.0인 경우에 비하여 증가하는 것은 높은 光吸收係數에 대응한 높은 光發生率때문이며, Ge 造成比 0.5에서 0.75사이에서 反轉現象을 보이는 것은 gap density 密度的 상승으로 인한 再結合律의 증가가 transport의 악화를 가져오기 때문이다(그림4 참조).

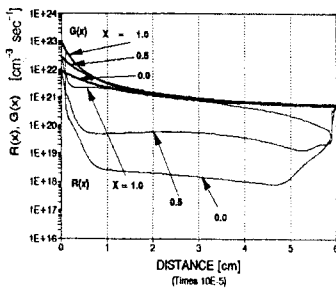


그림4 a-Si_{1-x}Ge_x:H 單重接合 太陽電池의 光發生律 G(x)와 再結合律 R(x)의 比較(短絡狀態下)

Simulation의 결과는 p, n type 영역에서는 이온화된 dopant가 空間電荷密度를 지배하지만 intrinsic 영역에서는 trap 電遷子が 지배함을 보여 주었다. 따라서 Poisson 方程式으로 결정되는 電界의 分布가, 그림5에서 보이고 있는 바와 같이, 동일한 농도로 doping된 영역에서는 Ge 造成比變化에 따라 거의 변화가 없는데에 비하여 intrinsic 영역에서는 극심한 변화를 보여주고 있다. 이러한 薄膜構造에 있어서는 電界가 일정하지도 않을 뿐만 아니라 短絡狀態下에서도 電界符號의 逆轉現象을 보여주고 있다. 따라서 薄膜의 a-Si_{1-x}Ge_x:H 太陽電池에 있어서 電界가 일정하다는 가정은 가능하지 않을 것이다.

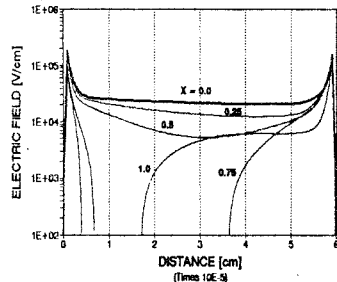


그림5 a-Si_{1-x}Ge_x:H 單重接合 太陽電池의 電界特性(短絡狀態下)

3.2 a-Si:H/ a-Si_{1-x}Ge_x:H 二重接合 및 a-Si_{1-x}C_x:H/ a-Si:H/ a-Si_{1-x}Ge_x:H 三重接合 太陽電池

二重接合에 있어 top cell에는 Ge 造成比를 0.0으로 하였으나 bottom cell은 太陽光중 長波長의 absorber로써 이용하기 위해서 Ge을 注入하고 각 cell간의 current matching을 감안하여 각 cell의 길이를 조정하여 여러조합에 대하여 simulation한 결과, 모든 Ge 造成比(이 곳에서는 0.25~1.0) 변화에 대하여 a-Si:H 單重接合 太陽電池보다 2~4 %의 效率향상의 特性을 보여주었다. 물론 top 및 bottom cell의 重疊으로 결정되는 二重接合 전체의 fill factor는 감소하지만 a-Si:H 單重接合 太陽電池에 있어서의 fill factor의 90 % 이상으로 유지되어 效率상승의 정도를 함께 고려할 때, 전반적인 性能향상을 가져올 수 있음을 알 수 있다. 그림6은 본 simulation 결과중에서 가장 높은 效率를 가져오는 조합의 각 要素 cell 및 전체소자의 특성곡선으로, 이 경우에 전체效率는 18.6 %, 전체fill factor는 0.75를 나타내었다. a-Si:H 單重接合에 비

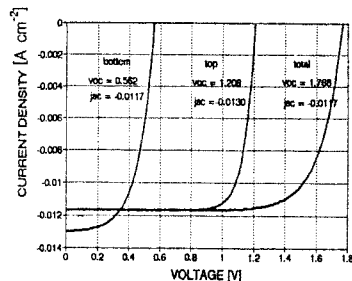


그림6 a-Si:H/ a-Si_{1-x}Ge_x:H 二重接合 太陽電池의 電流密度-電壓 特性(길이 6000/3000 Å, 造成比 0.0/0.75)

해서 短絡電流密度도 13.0에서 11.7 mA/cm²로 감소하여 光照射劣化現象(Staebler-Wronski effect)도 감소시킬 수 있으리라고 판단된다.

그러나 본 simulation modelling에서는 이론적 mechanism의 불명료 때문에 表面再結合을 고려하지 않았고, a-Si:H/ a-Si_{1-x}Ge_x:H 二重接合의 경우에는 太陽光의 單波長 영역에서의 光에너지의 손실이 불가피하다는 점을 고려할 때, top cell로 a-Si_{1-x}C_x:H를 이용하는 a-Si_{1-x}C_x:H/ a-Si:H/ a-Si_{1-x}Ge_x:H 三重接合構造를 채택하면 前方表面再結合을 감소시키고 太陽光의 單波長 영역에서의 光에너지 손실을 줄여 전체 性能의 향상을 가져오리라는 기대를 할 수 있다. 따라서 본 연구에서는 이전에 발표된 a-Si_{1-x}C_x:H 太陽電池의 modelling[11]을 결합하여 이러한 三重接合에 대한 simulation을 수행하였다. Current matching을 감안한 造成比 및 cell 길이의 조정을 통한 여러 조합이 simulation되었는 바, a-Si_{1-x}C_x:H/ a-Si:H/ a-Si_{1-x}Ge_x:H 구조에서 길이가 2000/7000/3000 Å, 造成比가 0.078/ 0.0/ 0.5인 경우에 가장 좋은 特性을 보여 주었다. 效率이 19.2 %, fill factor 0.81, 開放電壓 3.261 V로 증가한 반면에, 短絡電流密度는 6.0 mA/cm²로 감소하였다. 따라서 이러한 三重接合構造를 통해서 a-Si:H/ a-Si_{1-x}Ge_x:H 二重接合構造에 비하여 效率은 비슷한 값을 유지하지만 fill factor가 현저히 상승하는 한편 短絡電流密度의 강하로 光照射劣化現象의 감소도 기대할 수 있을 것이다. 또한 본 simulation modelling에서는 고려하지 않았던 前方再結合의 감소효과를 감안한다면 전체적, 실제적 性能향상은 더욱 증진될 것으로 예상된다.

4. 結論

새로운 simulation modelling을 이용한 a-Si_{1-x}Ge_x:H 化合物 p-i-n 太陽電池의 特性解析을 통해서 얻은 결론을 다음과 같이 요약한다.

- (1) a-Si_{1-x}Ge_x:H 短絡接合構造에서의 Ge의 注入은 전반적인 性能의 저하를 가져와서 그 有用성이 없다는 점을 확인하였다. Intrinsic 영역에서의 空間電荷密度를 지배하는 것은 trap 전송자라는 점을 확인하였고, 薄膜型 構造의 太陽電池내의 電界가 일정하지 않은 물론이고 Ge 造成比의 증가에 따라서는 短絡狀態下에서도 電界의 符號가 逆轉되는 영역이 있음을 밝혀내었다. Ge 造成比 증가에 따른 短絡電流密度的 증가는 높은 gap state 密度에 의한 높은 再結合率에도 불구하고 높은 光吸收係數에 의한 光發生率의 높은 order 때문인 것으로 해석되었다.
- (2) a-Si:H/ a-Si_{1-x}Ge_x:H 二重接合構造는 效率의 현저한 상승을 가져와서 약간의 fill factor의 저하에도 불구하고 실제적 응용에 있어 유용할 것이라는 점이 지적되어졌다. 그러나 前方表面再結合 및 短波長의 光에너지 손실감소라는 점을 고려할 때에 a-Si_{1-x}C_x:H/ a-Si:H/ a-Si_{1-x}Ge_x:H 三重接合構造가 적합할 것이라는 점이 예측되었고, simulation 결과를 통해서 이 구조가 效率, fill factor, 光照射劣化現象 등에서 최상의 성능을 가져올 수 있음을 實證하였다.
- (3) 위에서 논의된 바와 같이 본 연구에서 형식화된 simulation modelling은 Ge 造成比 및 cell 길이의 변화에 의한 a-Si_{1-x}Ge_x:H 太陽電池의 諸物理的 特性變化的 傾向을 예측하는 데 유용하다고 판단되므로 이러한 構造의 太陽電池의 最適設計에 도

움이 될 것으로 여겨진다. 다만 정확한 결과를 위해서는 지배하는 mechanism의 정확한 解明과 신뢰성있는 풍부한 실험적 data의 確保가 緊要하다고 본다.

參考文獻

- [1] H. Hack and H. Shur, "Physics of amorphous silicon alloy p-i-n solar cells," J. Appl. Phys., vol. 58, no. 3, pp. 997-1020, 1985.
- [2] K. Misiacos and F. A. Lindholm, "Analytical and numerical modelling of amorphous-silicon p-i-n solar cells," J. Appl. Phys., vol. 64, no. 4, pp. 383-393, 1988.
- [3] H. Hack and H. Shur, and J. G. Shaw, "Physical models for amorphous-silicon thin-film transistors and their implementation in a circuit simulation program," IEEE Trans. Electron Devices, vol. 36, no. 12, 1989.
- [4] K. D. Mackenzie et al., "Structural, electrical, and optical properties of a-Si_{1-x}Ge_x:H and inferred electronic band structure," Phys. Rev. B, vol. 92, no. 4, pp.2198-2212, 1985.
- [5] T. Unold and J. D. Cohen, "Density of states and carrier dynamics in amorphous germanium," J. Non-Cryst. Solids, vol. 137 & 138, pp. 809-812, 1991.
- [6] M. Stutzmann, R. A. Street, C. C. Tsai, J. B. Boyce, and S. E. Ready, "Structural, optical, and spin properties of hydrogenated amorphous silicon-germanium alloys," J. Appl. Phys., vol. 66, no. 2, pp. 569-592, 1989.
- [7] M. Stutzmann, D. K. Biegelson, and R. A. Street, "Detailed investigation of doping in hydrogenated amorphous silicon and germanium," Phys. Rev. B, vol. 35, no. 11, pp. 5666-5701, 1987.
- [8] T. Pisarkiewicz et al., "Density of states in the pseudo-gap of amorphous silicon-germanium alloys from electrical and optical measurements," Appl. Phys. Lett., vol. 60, no. 12, pp. 1465-1467, 1992.
- [9] J. G. Simmons and G. W. Taylor, "Nonequilibrium steady state statistics and associated effects for insulators and semiconductors containing an arbitrary distribution of traps," Phys. Rev. B, vol. 87, no. 5, pp. 835-842, 1972.
- [10] D. S. Shen et al, "Improving tunneling junction in amorphous silicon tandem solar cells," Appl. Phys. Lett., vol. 56, no. 19, pp. 1871-1873, 1990.
- [11] 權永植, 韓民九, "Computer simulation을 이용한 a-Si_{1-x}C_x:H 二重接合 太陽電池의 特性解析," 大韓電氣學會 電氣材料研究會 春季學術研究發表會 論文集, pp. 87-90, 1994.