【論　　文】

多結晶硅素 太陽電池의 粒界面 再結合 速度에 關한 理論的 分析

" Theoretical analysis of grainboundary recombination" velocity in polycrystalline Si solar cell.

崔 炳浩* 朴 而濬* 崔 永晧*
(B.H. Choi) (I.J.Bark) (Y.H .Chea)

ABSTRACT

Due to the grainboundary recombination and the poor diffusion length, the polycrystalline cell efficiency is lower than the singlecrystalline cell. In order to define the effect of grains and grainboundaries, 2 - dimensional differential diffusion equations of minority carrier are modelled. To solve them, two theoretical formulas are derived, which can be evaluated the grainboundary recombination velocity and the grain diffusion length. Also computer-aided numerical analysis is given.

記 號 說 明

Dn	:	electron diffusion coefficient
Dp	:	hole diffusion coefficient
g_o	:	carrier generation rate
$g_{opt.}$	:	optical carrier generation rate
j_n	:	electron current density
j_p	:	hole current density
L_g	:	grain diffusion length
N_{no}	:	electron density in equilibrium
P_{no}	:	holeddensity in equilibrium
N_p	:	electron density in p-type material
P_p	:	hole density in p-type material
R	:	bulk recombination rate
S_{gb}	:	grainboundary recombination velocity
α	:	absorption coefficient
τ_n	:	electron lifetime
μ_n	:	electron mobility
μ_p	:	hole mobility

*正會員 : 韓國動力資源硏究所

1. 序　　論

1950年 Shockley가 多結晶硅素(polycrystalline silion)의 粒界面(grainboundary)에 關한 電氣的 特性 [1]을 言及한 이래 最近에는 多結晶硅素가 太陽電池뿐만 아니라 薄膜型抵抗體, 트랜지스터, 배리스터 (varistor)등으로 確大, 應用되어 內存하는 粒界面이 電氣的 特性에 미치는 影響에 關한 硏究가 널리 행해지고 있다.

粒界面은 缺陷密度(density of defect)가 높으며 不純物들이 偏析되므로 光生成 小數캐리어(photogenerated excess minority carrier:n_p)가 再結合(recombination)하여 光電子 損失을 유발하는 場所가 된다. 多結晶硅素 NP接合에 빛이 入射할 때 光生成 小數캐리어는 粒界面주위에 발생된 電場의 影響으로 粒界面쪽으로 이동한다. 그러나 粒界面의 初期 多數캐리어(majority carrier)

농도는 낮기 때문에 n_p가 固着되며 空乏層(depletion region)電荷量이 줄어들어 포텐셜障壁(potential barrier)이 낮아지게 된다. 그 結果 P_p는 增加하여 $n_p \cdot S_{gbn} \approx P_p \cdot S_{gbp}$ 等式이 성립하는 즉 定常狀態(steady state)에 도달하게 된다. 이와같이 粒界面의 電氣的 特性을 粒界面 再結合速度(grainboundary recombination velocity : S_{gb})[2~5] 概念을 도입하여 說明하고 있다.

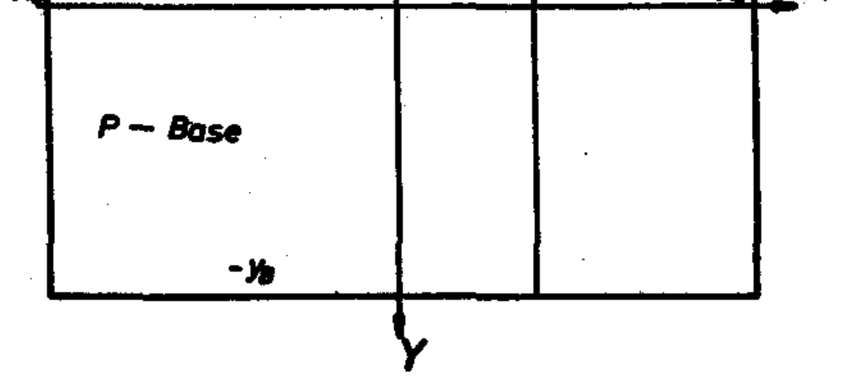
本 硏究는 多結果晶硅素 太陽電池 粒界面의 電氣的 特性을 糾明하기 위해 빛이 入射할 때 生成되는 小數캐리어의 濃度 分布를 구하고자 假定(assumption) 및 境界條件(boundary condition)을 주어 2次元 微分擴散方程式(differential diffusion equation)을 풀었다. 이 濃度分布式에서 電流密度가 구해질 수 있으며 粒界面에서의 電流密度를 糾明하여 短絡電流(short circut current) 減少率과 最小値로 表現되는 S_{gb}와 擴散距離(diffusion length : L_g)를 誘導하였다.

그리고 S_{gb}와 L_g값의 變化에 따른 粒界面의 短絡電流曲線을 컴퓨터계산으로 얻었다.

2. 理　　論

1. 微分擴散方程式의 모델화[6~8]

PN接合이 만들어진 多結晶硅素 太陽電池에 單波長의 빛이 에미터(emitter)에 照射될 때 〔그림 1〕, 生成되는 小數캐리어의 濃度分布를 알기 위해서 境界條件을 주어 2次元 小數캐리어擴散方程式을 구하고자 한다.



〔그림 1〕 多結晶硅素 太陽電池의 斷面圖

假　定

가. 照射되는 光束의 지름은 擴散距離(diffusion length : L_g)보다 훨씬 적으며 캐리어生成速度(carrier generation rate : g_0 in $cm^{-3} s^{-1}$)은 不變이다.

나. 粒界面은 PN接合에 垂直이다.

다. 에미터의 두께와 空乏層의 두께는 무시한다.[8]

라. 兩 結晶粒子의 직경은 L_g에 비해 무한히 크다. $(X_0 \to \infty)$

마. 베이스는 L_g와 $1/\alpha$에 비해 무한히 두껍다.

바. 뒷면 접촉은 오옴접촉이다.

사. 粒界面의 特性은 오직 S_{gb}값으로만 說明하고자 한다.

아. Shockley假定을 적용한다.

자. 線型 再結合法則을 적용한다.

차. 光學的 生成速度는 Lambert法則을 滿足시킨다. : $g_{opt} = g_0 \cdot \exp(\alpha y)$

2. 擴散方程式의 誘導 및 解法[6~7]

일반적으로 電流密度는 drift와 diffusion 성분으로 構成된다.

$$\vec{J}_n = q\mu_n n\vec{E} + qD_n \,\mathrm{grad}\,n \quad \cdots\cdots (1)$$

$$\vec{J}_p = q\mu_p p\vec{E} - qD_p \,\mathrm{grad}\,p \quad \cdots\cdots (2)$$

continuity 方程式과 Poisson方程式은 각각

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q}\,\mathrm{div}\,\vec{J}_n - R \quad \cdots\cdots (3)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q}\,\mathrm{div}\,\vec{J}_p - R \quad \cdots\cdots (4)$$

$$\mathrm{div}\,\vec{E} = \frac{\rho_L}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \quad \cdots\cdots (5)$$

로 표현되며, Shockley假定을 적용하고 또한 정공의 擴散電流는 電子의 擴散電流에 비해 無視되므로 따라서 식(1)~(5)는

$$\vec{J}_n = qD_n \,\text{gradn} \quad \cdots\cdots (6)$$

$$O = \frac{1}{9}\,\text{div}\,\vec{J}_n - R + g_{opt} \quad \cdots\cdots (7)$$

로 쓸 수 있다. 식(6)을 식(7)에 대입하면,

$$D_n \,\text{divgradn} - R + g_{opt} = O \quad \cdots\cdots (8)$$

이 된다. 線型再結合法則 $R = \frac{\Delta n}{\tau_n} = \frac{n_p - n_{po}}{\tau_n}$ 을 식(8)에 대입하면

$$\varDelta_n - \frac{\varDelta_n}{D_n \tau_n} + \frac{g_{opt}}{D_n} = O \quad \cdots\cdots (9)$$

이 되며, $L_n^2 = D_n \cdot \tau_n$, $\varDelta_n = \varDelta_{\Delta n}$ 으로 식(9)에 대입하여 정리하면

$$\varDelta_{\Delta n} - \frac{1}{L_n^2}\,\Delta n = \frac{-g_{opt}}{D_n} \quad \cdots\cdots (10)$$

이 된다. 또한 g_{opt} 는

$$g_{opt} = g_o \cdot \exp(\alpha y) \quad \cdots\cdots (11)$$

로 表示되는 Lambert 法則을 만족시키며 식(10)에 대입하여 정리하면, 빛이 照射된 부분의 inhomogeneous 擴散方程式(12)과 照射되지 않는 부분의 homogeneous 擴散方程式(13)이 계산된다.

$$\varDelta_n - \frac{1}{L^2}\,n = -\frac{g}{D}\exp(\alpha y) \quad \cdots\cdots (12)$$

$$\varDelta_n - \frac{1}{L^2}\,n = O \quad \cdots\cdots (13)$$

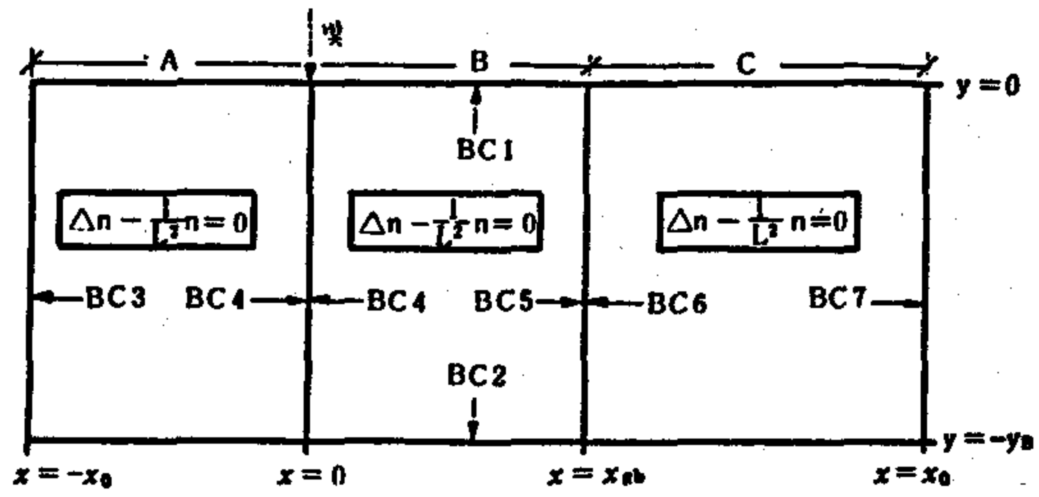
Laplace operator $\varDelta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ 와 二次元的 擴散方程式으로 식(12)와 (13)을 다시 쓰면

$$\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 n}{\partial y^2} - \frac{1}{L^2}\,n = -\frac{g}{D}\exp(\alpha y) \quad \cdots\cdots (12)'$$

$$\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 n}{\partial y^2} - \frac{1}{L^2}\,n = O \quad \cdots\cdots (13)'$$

가 된다.

이제 計算된 擴散方程式을 利用하여 베이스영역의 幾何學的 境界條件을 〔그림 2〕와 같이 주어 小數캐리어 濃度分布式을 구하고자 한다.



〔그림 2〕 베이스영역의 幾何學的 모델

境界條件 1 : $y = 0$인 平面은 베이스와 에미터接合의 空乏層境界面이므로 $n(x, y) = 0$ 즉 $n(x, y=0) = n_{po}(\exp\frac{V}{kT} - 1) = 0$

$$\cdots\cdots (14)$$

가 된다.

境界條件 2 : $y = -y_B$ 平面은 오움접촉을 滿足시키며 베이스의 두께는 L_g 와 $1/\alpha$ 값에 비해 無限히 두껍기 때문에

$$n(x, y = -y_B \to -\infty) = 0 \quad \cdots\cdots (15)$$

이 성립된다.

境界條件 3 : 兩 結晶크기는 L_g 에 비해 無限히 크므로

$$n(x = -x_o \to -\infty, y) = 0 \quad \cdots\cdots (16)$$

이 성립된다.

境界條件 4 : $x = 0$ 平面에서 光生成이 되며, 境界條件 1과 2를 滿足시켜야 하므로

$$g(\lambda, I) = \frac{n\alpha\lambda}{hc}\cdot I \quad \cdots\cdots (17)$$

로 表示되며 식(12)에 대입하여 풀면

$$n(x=0, y) = \frac{g}{D(a^2 - \frac{1}{L^2})}\left(\exp\frac{y}{L} - \exp(ay)\right)\left(1 - \frac{s}{s + D/L}\exp(-\frac{x_{gb}}{L})\right)$$

$$\cdots\cdots (18)$$

이 된다.

境界條件 5 : $x = x_{gb}$ 에서의 擴散電流는 粒界面에서 再結合하는 成分과 粒界面을 통과하는 成分으로 構成된다.

$$\underset{\leftarrow\ j_{Diff}\ \rightarrow}{-qD\frac{\delta n}{\delta x}\Big|_{x=x_{gb},\,y}} = \underset{\leftarrow\ j_{Diff2}=j_{Rec}\rightarrow}{qsn(x=x_{gb},y)} + \underset{\leftarrow\ j_{Diff1}\ \rightarrow}{q\frac{D}{L}n(x=x_{gb},y)} \quad \cdots\cdots (19)$$

境界條件 6 : 領域A와 C의 境界로서 過剩小數캐리어농도는 변하지 않으므로,

$$\underset{\longleftarrow B \longrightarrow}{n(x=x_{gb},y)} = \underset{\longleftarrow C \longrightarrow}{n(x=x_{gb},y)} \quad \cdots (20)$$

이 성립된다.

境界條件 7 : 結晶粒子의 크기는 L_g 에 비해 무한히 크므로

$$n(x=x_0 \rightarrow +\infty, y) = 0 \quad \cdots\cdots (21)$$

이 된다.

식 (14) ~ (21)을 이용하여 領域A, B, C 에서 n(x, y)값을 구하면

$$n_A(x,y) = K(y)\exp\frac{x}{L} \quad \cdots\cdots (22)$$

$$n_B(x,y) = K(y)\frac{\frac{D}{L}\mathrm{Cosh}\left(\frac{x-x_{gb}}{L}\right) - (s+D)\mathrm{Sinh}\left(\frac{x-x_{gb}}{L}\right)}{\frac{D}{L}\mathrm{Cosh}\left(\frac{x_{gb}}{L}\right) + (s+D/L)\mathrm{Sinh}\left(\frac{x_{gb}}{L}\right)} \quad \cdots\cdots (23)$$

$$n_C(x,y) = K(y)\frac{\frac{D}{L}\exp\left(\frac{x_{gb}-x}{L}\right)}{\frac{D}{L}\mathrm{Cosh}\left(\frac{x_{gb}}{L}\right) + (s+D/L)\mathrm{Sinh}\left(\frac{x_{gb}}{L}\right)} \quad \cdots\cdots (24)$$

이 되며, 여기서 K(y)는

$$K(y) = \left(1 - \frac{s}{s+D/L}\exp\left(-\frac{x_{gb}}{L}\right)\right)\cdot\frac{g}{D\left(a^2-\frac{1}{L^2}\right)}\left(\exp\frac{y}{L} - \exp ay\right)$$

이다.

3. 短絡電流密度의 解法

過剩小數캐리어농도가 주어졌으므로, $y=0$ 에서 y성분 擴散電流벡터를 적분하므로 短絡電流密度는 구해질 수 있다.

$$j = j_A + j_B + j_C \quad \cdots\cdots (25)$$

$$j_A = qD\int_{-\infty}^{0}\frac{\delta n_A}{\delta y}\Big|_{y=0}\delta x \quad \cdots\cdots (26)$$

$$j_B = qD\int_{0}^{x_{gb}}\frac{\delta n_B}{\delta y}\Big|_{y=0}\delta x \quad \cdots\cdots (27)$$

$$j_C = qD\int_{x_{gb}}^{\infty}\frac{\delta n_C}{\delta y}\Big|_{y=0}\delta x \quad \cdots\cdots (28)$$

식 (26) ~ (28)을 적분하여 식 (25)에 대입하면 전체 電流密度는

$$j = -K\left(1 + \frac{\frac{D}{L}\left(\mathrm{Sinh}\frac{x_{gb}}{L}+1\right) + \left(s+\frac{D}{L}\right)\left(\mathrm{Cosh}\frac{x_{gb}}{L}-1\right)}{\frac{D}{L}\mathrm{Cosh}\frac{x_{gh}}{L} + \left(s+\frac{D}{L}\right)\mathrm{Sinh}\frac{x_{gb}}{L}}\right) \quad \cdots\cdots (29)$$

이 되며 여기서 K는

$$K = qD\frac{g\tau}{aL+1}\left(1-\frac{s}{s+D/L}\exp-\frac{x_{gb}}{L}\right)$$

이며 $\tau = L^2/D$ 이다.

粒界面에서의 短絡電流度 $j = f(x_{gb})$ 는 入射光波長에 따라 變하는 g, α, S_{gb} 그리고

半導體素材 自體 特性인 L, D 값에 依存함을 식(29)에서 볼 수 있다. 또한 식(29)을 短絡電流密度의 最大値 즉 $x_{gb} \to \infty$로 normalize하면,

$$j_{max} = j\,(x_{gb} \to \infty) = -2\,qD\,\frac{g\tau}{aL+1} \qquad \cdots\cdots (30)$$

$$j^N = \frac{j\,(x_{gb})}{j\,(x_{gb} \to \infty)}$$

$$\frac{D}{L}\left(\mathrm{Sinh}\,\frac{x_{gb}}{L}+1\right)+(s+D/L)$$

$$C\left(1+\frac{\left(\mathrm{Cosh}\,\frac{x_{gb}}{L}-1\right)}{\frac{D}{L}\mathrm{Cosh}\,\frac{x_{gb}}{L}+(s+D/L)\,\mathrm{Sinh}\,\frac{x_{gb}}{L}}\right) \qquad \cdots\cdots (31)$$

가 되며, 여기서 C는

$$C = \frac{1}{2}\left(1-\frac{s}{s+D/L}\,\exp-\frac{x_{gb}}{L}\right)$$

이다. 식(31)은 過剩小數캐리어의 normalize된 短絡電流密度는 入射光線의 波長에 無關한 값으로 表示됨을 알 수 있다.

3. 結果 및 討議

앞에서 이미 計算된 j^N은 x_{gb}, S_{gb}, L 및 D의 함수로 表現되었으며 $x_{gb}=0$일 때 電流密度 j^N을 구하면

$$j^N\,(x_{gb}=0) = \frac{\frac{D}{L}}{S_{gb}+\frac{D}{L}} \qquad \cdots\cdots (32)$$

이 되며 기울기값은

$$\left.\frac{\delta j^N}{\delta x_{gb}}\right|_{x_{gb}} = -\frac{1}{2}\,\frac{S_{gb}}{D}\,j^N\,(x_{gb}=0)$$

$$= \frac{1}{2}\,\frac{S_{gb}}{D}\,\frac{\frac{D}{L}}{S_{gb}+\frac{D}{L}} \qquad \cdots\cdots (33)$$

이 된다. 식(32)과 (33)에서 변수S_{gb}과 L_g 값으로 表現하면

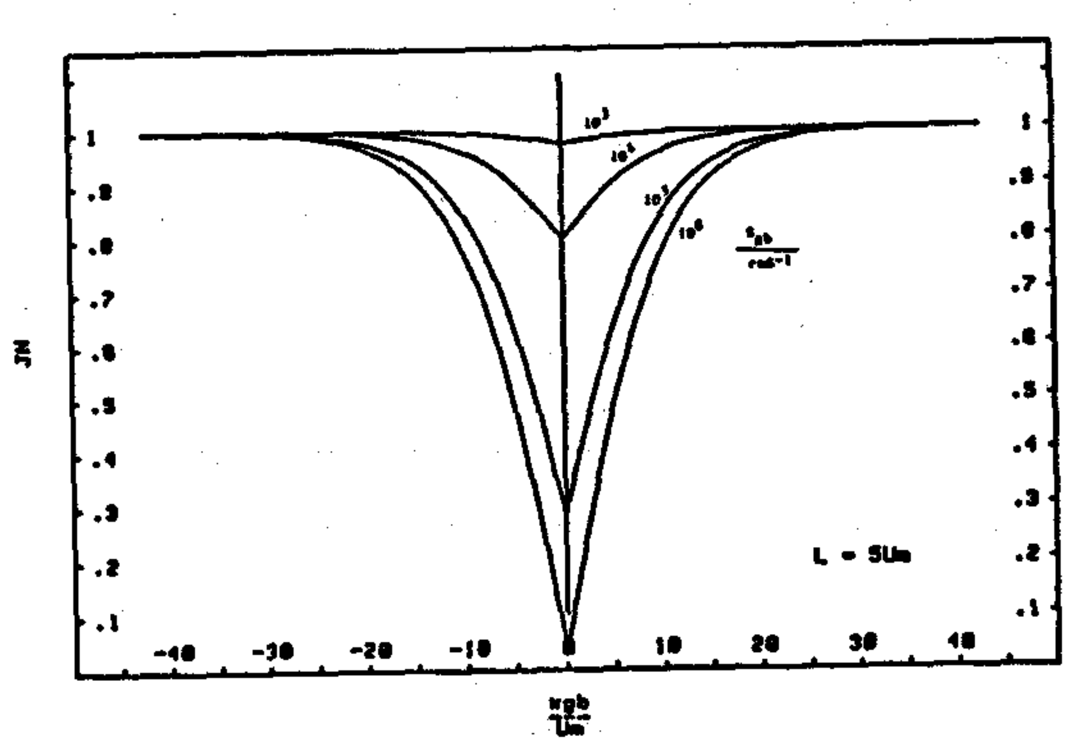
$$S_{gb} = 2D\,\frac{\left|\left.\frac{\delta j^N}{\delta x_{gb}}\right|_{x_{gb}=0}\right|}{j^N\,(x_{gb}=0)} \qquad \cdots\cdots (34)$$

$$L_g = \frac{1-j^N(x_{gb}=0)}{2\left|\left.\frac{\delta j^N}{\delta x_{gb}}\right|_{x_{gb}=0}\right|} \qquad \cdots\cdots (35)$$

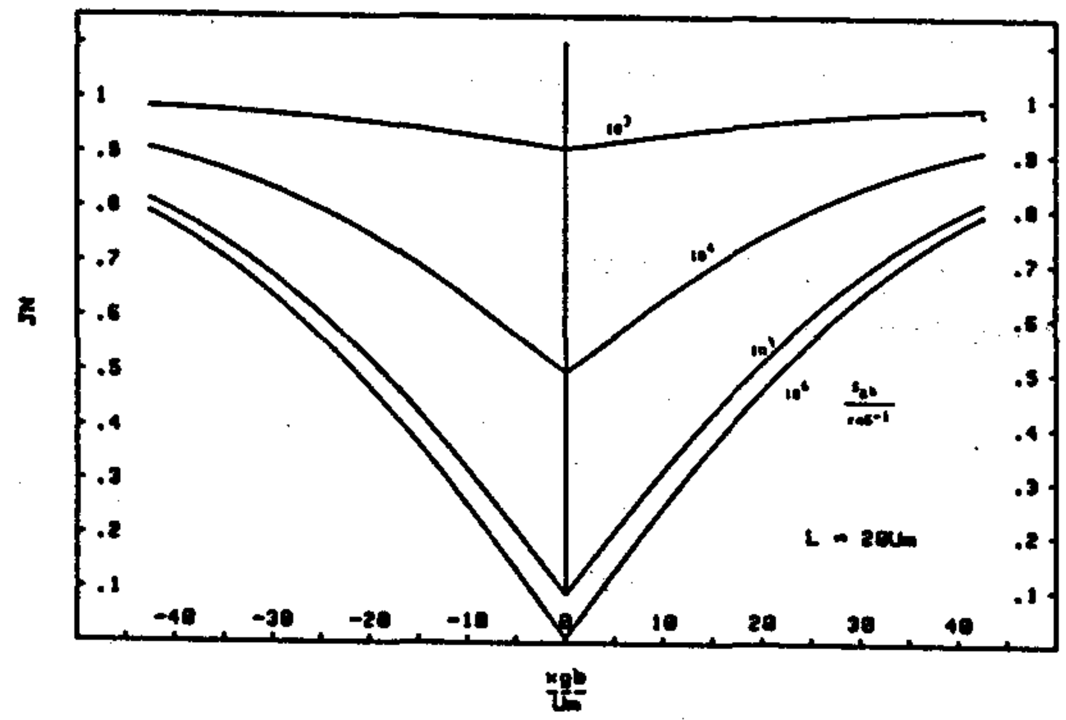
이 된다. 즉 S_{gb}와 L_g값은 粒界面에서의 電流密度 $j^N(X_{gb}=0)$와 기울기 $\left.\frac{\delta j^N}{\delta X_{gb}}\right|_{X_{gb}=0}$으로 表現된다.

이제 j^N그래프를 그려 粒界面에서의 절편과 기울기값을 測定하면 S_{gb}와 L_g값은 理論的으로 計算된다. j^N그래프를 얻기 위해서 컴퓨터를 사용하였다. 硅素의 경우 $D \approx 20\,cm^2, S^{-1}$로 주어지며 S_{gb}와 L_g를 變數로 하여 j^N을 그린 것이 〔그림 3〕이며, 주어진 L_g과 S_{gb}에서 S_{gb}값과 L_g값이 증가할 수록 電流密度의 減少率이 더욱 심해지는 것을 보여준다.

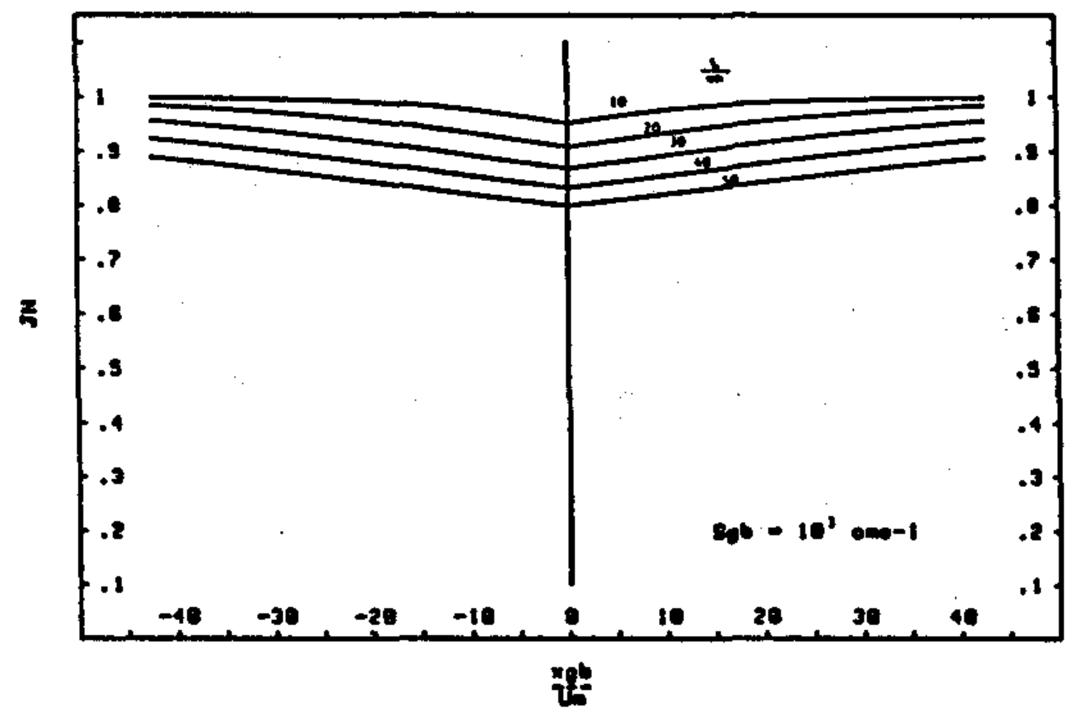
〔그림 3〕 粒界面에서의 j^N그래프變化



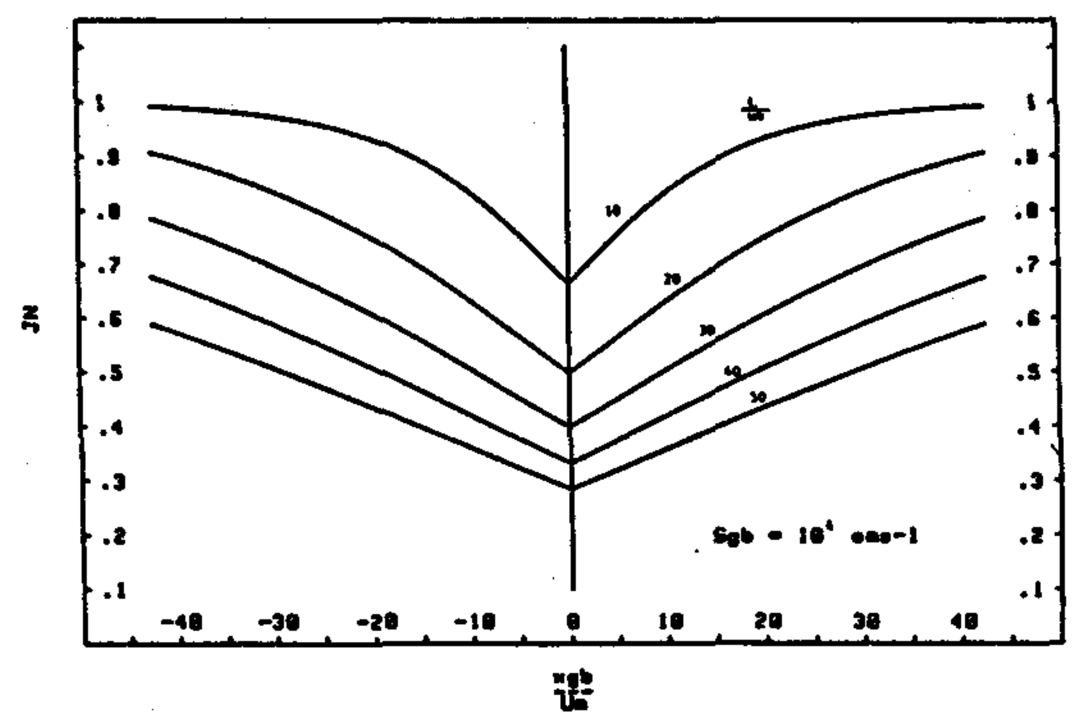
a) 再結合速度에 따른 j^N의 變化($L_g = 5\,\mu_m$)



b) 再結合速度에 따른 j^N의 變化($L_g=20\mu_m$)



c) 擴散距離에 따른 j^N의 變化
($S_{gb}=10^3\ cm S^{-1}$)



d) 擴散距離에 따른 j^N의 變化
($S_{gb}=10^4\ cm S^{-1}$)

Ⅵ. 結　　論

多結晶硅素 粒界面의 電氣的 特性을 分析하기 위해 過剩小數캐리어 濃度分布式 유도하여 粒界面再結合速度를 理論的으로 計算한 結果

$$S_{gb}=2D\frac{\left|\dfrac{\delta j^N}{\delta x_{gb}}\right|_{x_{gb}=0}}{j^N(x_{gb}=0)}$$

의 等式이 成立하며 粒子內 擴散距離는

$$L_g=\frac{1-j^N(x_{gb}=0)}{2\left|\dfrac{\delta j^N}{\delta x_{gb}}\right|_{x_{gb}=0}}$$

가 됨을 알았다.

References

1. Shockley, W., "Electrons and Holes in Semiconductors," Van Nostrand, New Jersey, 1950.
2. J.Y.W. Seto, "The Electrical Properties of Poly crystalline Silicon Films", J. Appl. Phys. Vol. 46, No. 12, 1975, p. 5247.
3. H.C. Card and E.S. Yang, IEEE Transactions on Electron Device, Vol. ED-24, 1977.
4. J.G. Fossum and F.A. Lindholm, IEEE Transactions on Electron Device Vol. ED-27, 1980.
5. J.F. McCann and D. Haneman, J. Electrochem. Soc. Vol. 129, No. 5, 1982.
6. A.L. Fahrenbruch and R.H. Bube, Fundamentals of Solar Cells, Academic Press, New York, 1983.
7. A.S. Grove, Physics and Technology of Semiconductor Devices, John Wiley & Sons, Inc, 1967.
8. H.J. Hovel, Semiconductors and Semimetals, Academic Press, Vol. 11, 1975.