

Modellstudien zum Ladungsträgertransport
über Korngrenzen
in photovoltaischen Materialien

Dissertation
zur
Erlangung der Doktorwürde

eingereicht am
Fachbereich Physik
der
Freien Universität Berlin

von
Thomas Weis
aus Wien

Mai 1999

1. Gutachter: Prof. Dr. R. Lipperheide

2. Gutachter: Prof. Dr. H. Gabriel

Tag der Disputation: 23. Juni 1999

Zusammenfassung

Der Transport von Ladungsträgern über Korngrenzen in poly- und mikrokristallinen Halbleitermaterialien wird im Rahmen verschiedener eindimensionaler Modelle theoretisch untersucht.

Es wird das physikalische Bild zugrunde gelegt, daß Ladungsträger in lokalisierten Korngrenzenzuständen zur Bildung eines ortsabhängigen Bandkantenpotentials im Korn Anlaß geben. Im thermischen Gleichgewicht wird dieses als Lösung der nichtlinearen Poisson-Gleichung bestimmt. Im stationären Nichtgleichgewicht wird es durch simultane Lösung von nichtlinearer Poisson-Gleichung und Drift-Diffusions-Gleichungen für Elektronen und Löcher berechnet. Aus den Lösungen werden Strom-Spannungs-Charakteristiken und Leitfähigkeiten gewonnen.

Die Arbeit hat zwei Schwerpunkte. Der eine liegt auf der vergleichenden Untersuchung verschiedener Annahmen und Näherungen zum ballistischen und zum diffusiven Transport im Prototypmaterial Silizium unter Bedingungen und in Parameterbereichen, die für photovoltaische Anwendungen von Interesse sind. Der Einfluß von optischer Anregung wird im Rahmen des stationären Gleichgewichts von Ladungsträgererzeugung im Volumen und Shockley-Read-Hall-Rekombination in den Korngrenzen beschrieben. Die Abhängigkeit der Dunkel- und Photoleitfähigkeit von Dotierkonzentration, Korngröße sowie energetischer Verteilung und Dichte der Korngrenzenzustände wird berechnet und an Hand von vereinfachten Formeln analysiert. Insbesondere wird der Einfluß unterschiedlicher Korngröße in Mehrkorn-Systemen untersucht.

Im zweiten Schwerpunkt der Arbeit wird ein Modell zur einheitlichen Beschreibung von ballistischem und diffusivem Transport in nichtentarteten Systemen für beliebige mittlere freie Weglängen und beliebige Bandkantenprofile formuliert. Hierbei wird angenommen, daß die Ladungsträger innerhalb zufällig verteilter Intervalle mit einer mittleren Länge gleich einer universellen mittleren freien Weglänge sich ballistisch bewegen; an den Endpunkten der Intervalle herrscht lokales thermisches Gleichgewicht. Die Strom-Spannungs-Charakteristik wird bestimmt durch die mittlere freie Weglänge im Wechselspiel mit effektiven Längen, die die Struktur des Bandkantenprofils kennzeichnen. Als eine wesentliche Anwendung des einheitlichen Modells wird die Leitfähigkeit von polykristallinem Material für den Fall berechnet, daß Korndimension und mittlere freie Weglänge vergleichbare Größe haben.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Korngrenzen und deren Einfluß in der Photovoltaik	5
2.1	Allgemeine Beschreibung der Korngrenze	5
2.1.1	Klassifizierung von Materialien nach kristallinem Charakter	5
2.1.2	Korngrenzen: Entstehung und mikroskopische Beschreibung	6
2.2	Elektronische Eigenschaften der Korngrenze in Halbleitern . . .	8
2.2.1	Elektronische Struktur des Korns	9
2.2.2	Elektronische Struktur der Korngrenze	11
2.2.3	Das System Korn–Korngrenze	12
2.3	Korngrenzen in photovoltaischen Materialien	14
2.3.1	Lichtabsorption	14
2.3.2	Solarzellen aus polykristallinem Material	16
3	Theoretische Beschreibung des Ladungsträgertransports über Korngrenzen	19
3.1	Trapping-Modell für Mehrkorn-Systeme	19
3.1.1	Volumeneigenschaften der Körner	20
3.1.2	Korngrenzen	21
3.1.3	Thermisches Gleichgewicht: elektrostatisches Potential .	23
3.1.4	Nichtgleichgewicht: stationärer Zustand	25
3.2	Ladungsträger-Transport: ballistischer Mechanismus	27
3.2.1	Klassischer Transport: thermionische Emission	28
3.2.2	Quantenmechanische Effekte	29
3.3	Ladungsträgertransport: Drift-Diffusions-Mechanismus	31
3.3.1	Drift-Diffusions-Ströme und Kontinuitätsgleichungen . .	32
3.3.2	Die gekoppelten Differentialgleichungen	33
3.3.3	Rand- und Anschlußbedingungen	34
3.3.4	Numerische Lösung	35
4	Modellstudien zum Einfluß von Korngrenzen auf den Ladungsträgertransport	37
4.1	Bandkantenprofile im Gleichgewicht	38
4.1.1	Depletion-Näherung	38

4.1.2	Bandkante an Korngrenze und in Kornmitte: Drei-Bereichs-Bild	41
4.2	Einfluß der Materialparameter auf die Barrierenhöhe	45
4.2.1	Einfluß der Kornparameter	45
4.2.2	Einfluß der Korngrenzenparameter	46
4.3	Photogeneration von Ladungsträgern	48
4.3.1	Quasi-Gleichgewicht	49
4.3.2	Nichtgleichgewicht im stationären Zustand	57
4.4	Leitfähigkeit	58
4.4.1	Grenzfall kleiner Spannung	59
4.4.2	Endliche Spannung	62
4.5	Mehrkorn-Systeme	64
4.5.1	Bandkantenprofil	64
4.5.2	Nullspannungs-Leitfähigkeit	66
5	Einheitliches Modell für ballistischen und diffusiven Transport	67
5.1	Thermionische Emission und Diffusion über eine Barriere	68
5.2	Schema des einheitlichen Modells	70
5.3	Mittelung über die ballistischen Konfigurationen	73
5.3.1	Monotones Bandkantenprofil	73
5.3.2	Einzelne Kuppe im Bandkantenprofil	74
5.3.3	Einzelne Senke im Bandkantenprofil	75
5.3.4	Benachbarte Senken und Kuppen im Bandkantenprofil	78
5.4	Strom-Spannungs-Charakteristik	79
5.4.1	Die universelle Formel	79
5.4.2	Berechnung des Bandkantenprofils	81
5.5	Anwendungen	82
5.5.1	Einzelne Barriere	82
5.5.2	Nullspannungs-Leitwert einer Kette identischer Körner	83
5.6	Diskussion	86
6	Abschließende Bemerkungen	89
A	Die Methode der finiten Differenzen	91
A.1	Approximation der Differentialquotienten	91
A.2	Diskretisierung der Poisson-Gleichung	92
A.3	Diskretisierung der Drift-Diffusions-Gleichungen	93
A.4	Randbedingungen	94

An dieser Stelle möchte ich all jenen danken, die mit zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Zuallererst meinen beiden Betreuern am Hahn-Meitner-Institut, Herrn Prof. Dr. R. Lipperheide und Herrn Dr. U. Wille. Ihnen möchte ich für ihr großes Engagement und für viele anregende Diskussionen danken, die zudem durch ihre nette und ruhige Art geprägt waren.

Mein Dank gilt ferner Herrn P. Kanschäp vom Bereich AP (HMI Adlershof) für die vielen informativen Gespräche.

Schließlich allen anderen Mitarbeitern des Bereiches Theorie, die mir mit vielen Hinweisen und Anregungen zur Seite standen.

Bedanken möchte ich mich auch bei meiner Freundin für deren Unterstützung und Geduld, und meiner Tochter, die beide besonders in den letzten Wochen vor dem Abgabetermin oft auf mich verzichten mußten.

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name: Thomas Weis
Geburtsdaten: Wien, 05.Juli.1967
Staatsbürgerschaft: Österreich
Familienstand: ledig

Ausbildung

1973 – 1977 Volksschule in Wien
1977 – 1981 Gymnasium in Wien
1981 – 1986 Höhere Technische Lehranstalt, Abteilung für elektronische Nachrichtentechnik und Elektronik, TGM, Wien
Abschluß: Matura mit ausgezeichnetem Erfolg

1986 – 1987 Wehrdienst

1987 – 1995 Studium der Technischen Physik, TU Wien
1994 – 1995 Diplomarbeit am Institut für Allgemeine Physik, TU Wien, mit dem Titel:
Experimentelle und theoretische Untersuchung der Segregation an einem Fe-6at.%Si Bikristall

Nov. 1995 2. Diplomprüfung in Technischer Physik
1996 – 1999 Doktorarbeit am Hahn-Meitner-Institut, Berlin

Sonstige Tätigkeiten

1990 – 1991 Entwicklung eines elektronischen Schichtdickenmeßgerätes, Institut für Angewandte Physik, TU Wien
1992 – 1995 Universitätsinstructor in der Arbeitsgemeinschaft Laborübungen für Technische Physiker, TU Wien.