



SIMULACIÓN NUMÉRICA DE CELDAS SOLARES DE Ge

M. Barrera^{1,2}, I. Rey Stolle³, F. Rubinelli⁴, J. Plá^{1,2}

¹ Grupo Energía Solar - Centro Atómico Constituyentes,
Comisión Nacional de Energía Atómica (CNEA)

Av. General Paz 1499, 1650 San Martín, Provincia de Buenos Aires, Argentina.

² Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET)

³ Instituto de Energía Solar – Universidad Politécnica de Madrid, Avda. Complutense 30; 28040 Madrid, España

⁴ INTEC-CONICET, Universidad Nacional del Litoral, Güemes 3450, 3000 Santa Fe

e-mail: barrera@tandar.cnea.gov.ar

RESUMEN: Actualmente las celdas solares de Ge han cobrado relevancia debido a que pueden ser utilizadas tanto en homojunturas como en multijunturas, siendo ejemplo de la primera situación el caso de los dispositivos para aplicaciones TPV (*Thermophotovoltaics*), y del segundo caso las celdas InGaP-GaAs-Ge para aplicaciones espaciales o terrestres. Para este trabajo se simuló homojunturas con estructura InGaP-Ge n-p, con características similares a la celda *bottom* de una celda de triple juntura. Los resultados fueron comparados con dispositivos de idéntica estructura y para usos con concentración elaborados en el Instituto de Energía Solar de la Universidad Politécnica de Madrid. Dado que el emisor de una homojuntura de Ge puede ser elaborado por dos métodos, difusión o crecimiento epitaxial, se realizó la comparación de los parámetros eléctricos obtenidos mediante la simulación numérica de una homojuntura n-p con emisor con perfil gaussiano y con juntura abrupta. Los parámetros eléctricos obtenidos no muestran diferencias si se toma, en el caso abrupto una concentración media de portadores en el emisor y resultan acordes a los medidos experimentalmente. Se estudió también la eficiencia cuántica externa y la influencia de la capa de InGaP en el dispositivo.

Palabras clave: celdas solares, germanio, simulación numérica

INTRODUCCIÓN

En la actualidad el Ge se está utilizando, en cuanto a aplicaciones fotovoltaicas, como parte integrante de multijunturas. Se puede citar como ejemplo el caso de las celdas de triple juntura InGaP-GaAs-Ge, donde la celda de Ge se utiliza como celda *bottom*. En este caso, además de contribuir a la generación de energía del dispositivo, el Ge aporta un apropiado soporte mecánico.

La homojuntura de Ge está siendo estudiada por varios grupos de investigación, y en este sentido se pueden citar como ejemplo los trabajos de Nagashima et al. (2003), Prieto et al. (2009), van der Heide et al. (2009) y Posthuma et al. (2007). Un ejemplo de aplicación de dichas homojunturas es en usos termofotovoltaicos (TPV), debido a que su *band gap* es apropiado para absorber la radiación de fuentes de calor de alrededor de 1400 °C, temperatura típica en un arreglo TPV (Galiana et al., 2007).

Este trabajo surgió como resultado de la colaboración entre el Grupo Energía Solar (GES) de la Comisión Nacional de Energía Atómica (Argentina) y el Instituto de Energía Solar (IES) de la Universidad Politécnica de Madrid (España), a través de un Proyecto Semilla, en el marco del programa Ayuda para la realización de actividades con Latinoamérica, financiado por la Universidad Politécnica de Madrid.

Para la simulación de homojunturas de Ge se utilizó el código no comercial D-AMPS-1D (*New Developments - Analysis of Microelectronic and Photonic Devices – One Dimensional*) (Plá et al. 2007a; Rubinelli et al., 2001; Vukadinovic et al., 2007). El código es una versión actualizada del programa AMPS que fue desarrollado inicialmente en *The Pennsylvania State University*, EE.UU. durante los años 1988-1993. En AMPS se utiliza la técnica de diferencias finitas y la iteración de Newton-Raphson para resolver las ecuaciones de Poisson y de continuidad en una dimensión con condiciones de contorno apropiadas. La letra “D” en D-AMPS se refiere al agregado de subrutinas que constituyen nuevos desarrollos introducidos a AMPS para permitir una mejor caracterización y diseño de celdas de silicio amorfo, cristalino o microcristalino. A modo de ejemplo se pueden mencionar la inclusión de: estados amfotéricos, el modelo de *Pool-Frenkel*, el *Defect Pool Model*, *Tunnelling* directo a energía constante, *Recombination Tunneling*, variación espacial continua de parámetros eléctricos y ópticos (E_g , dopaje, movilidades, secciones eficaces, etc.) *scattering* de la luz en superficies rugosas, interferencia, etc.. En su versión más reciente, se introdujo la posibilidad de simular celdas solares basadas en materiales III-V incluyendo la posibilidad de contar con los mecanismos de recombinación banda-banda (directa) y Auger (Barrera et al. 2007; Plá et al., 2007b; Barrera et al., 2008).

El código permite simular homojunturas, heterojunturas, multijunturas, etc., apilando capas de diferentes materiales mediante la selección de parámetros característicos tales como la energía del *band gap* E_g , la movilidad de los portadores, los

coeficientes de absorción y la concentración de dopantes entre otros. También se pueden evaluar curvas características de dispositivos como la curva corriente-tensión ($J-V$) en condiciones de oscuridad e iluminación, la eficiencia cuántica externa (EQE), la reflectividad, etc., así como magnitudes internas como el campo eléctrico, las concentraciones de portadores libres y atrapados, las corrientes de electrones y de huecos, las tasas de recombinación y de generación, etc. También permite la incorporación de capas definidas sólo por sus características ópticas que pueden añadirse al contacto frontal, por ejemplo como capas antirreflectantes (AR) y sustratos o contactos en la cara posterior del dispositivo.

SIMULACIÓN NUMÉRICA DE HOMOJUNTURAS DE Ge

La unión n-p (o p-n) en celdas de Ge puede elaborarse tanto por difusión (Posthuma et al., 2007; Tobin et al. 1988) como por crecimiento epitaxial (Friedman y Olson, 2001; Bosi et al. 2008). Se simularon celdas solares de Ge diseñadas para su uso con concentración de la radiación incidente, de 1.53 mm^2 de área, para aplicaciones terrestres elaboradas en el IES. Los dispositivos simulados consisten en una unión n-p obtenida mediante difusión de una oblea tipo p con orientación (100) de $180 \mu\text{m}$ de espesor. El dopaje del emisor fue realizado mediante difusión de fósforo con perfil gaussiano y concentración en la superficie de alrededor de $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Los dispositivos poseen una capa *buffer* de InGaP que posee similares características a la que está presente sobre la celda *bottom* de una celda de triple juntura InGaP-GaAs-Ge. La grilla metálica frontal es de AuGe/Ni, mientras que el contacto posterior es de Au.

Para las simulaciones se consideraron, además de los datos proporcionados por el IES, los datos experimentales presentados en las referencias Espinet et al. (2007), Friedman y Olson (2001), Gaubas y Vanhellefont (2006), Posthuma et al. (2003), Posthuma et al. (2004), Posthuma et al. (2005) y Tobin et al. (1988). Las movilidades de los portadores del Ge fueron extraídas de Sze (1981). Un modelo de la celda de Ge simulada puede verse en la Figura 1, donde se especifican las regiones definidas en el D-AMPS-1D para su simulación.

El dispositivo se simuló primeramente como si fuera una juntura abrupta, considerándose los espesores y demás parámetros mostrados en la Tabla 1. Para simular una celda de Ge cuya juntura fue elaborada por difusión se utilizó una opción de D-AMPS-1D que permite modelar estructuras donde alguno de los parámetros varía en forma gradual, como por ejemplo la concentración de dopante, para lo que se utilizó un perfil gaussiano. La profundidad de juntura utilizada es la misma que el espesor del emisor en el caso de considerar la juntura abrupta.

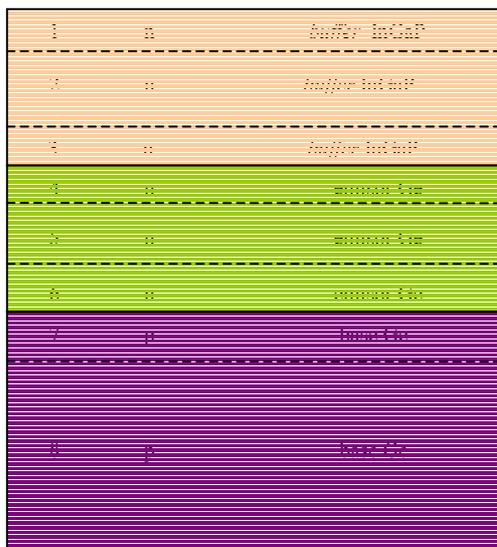


Figura 1: Esquema de la celda de Ge estudiada donde se especifican las regiones definidas en el D-AMPS-1D para su simulación.

	<i>buffer</i>	emisor	base
Material	InGaP	Ge	Ge
E_g (eV)	1.82	0.664	0.664
espesor (nm)	980	180	180000
N_D (cm^{-3})	3×10^{18}	8.5×10^{18}	-
N_A (cm^{-3})	-	-	1.5×10^{17}
movilidad de electrones ($\text{cm}^2/\text{V.s}$)	803	1000	2600
movilidad de huecos ($\text{cm}^2/\text{V.s}$)	40	200	700
coeficiente de recombinación directa (cm^3/s)	1×10^{-10}	-	-

Tabla 1: Principales parámetros utilizados para la simulación.

RESULTADOS

Los dispositivos de Ge fueron caracterizados eléctricamente en el GES. Se realizaron dos conjuntos de mediciones de la corriente de cortocircuito al sol de las celdas solares en dos días diferentes. Las mediciones, tres por cada celda en cada conjunto, fueron realizadas mediante la medición de la caída de tensión en la celda con una resistencia de carga apropiada (del orden de los 150 Ω), de modo que el punto de trabajo estuviera razonablemente cerca de la corriente de cortocircuito.

Por otra parte, se realizaron mediciones de la característica corriente tensión (I-V) de las celdas solares con un simulador solar de origen canadiense marca Sciencetech, que utiliza una lámpara de Xe de 1kW de potencia, con un filtro óptico provisto por el fabricante para una mejor reproducción del espectro AM1.5. Se utilizó un sistema de adquisición de datos marca Keithley comandado por un programa en Labview ejecutado en una PC. La irradiancia fue ajustada aproximadamente con una celda de referencia de Si cristalino previamente calibrada.

Con posterioridad, la corriente de las celdas medida fue corregida por irradiancia de acuerdo a las mediciones de la corriente de cortocircuito de cada celda realizadas al sol. La irradiancia fue monitoreada utilizando un solarímetro marca Kipp&Zonen. Finalmente, de las curvas corregidas se extrajeron los parámetros eléctricos correspondientes a todas las celdas estudiadas. Cabe destacar que las diferencias encontradas entre todas las mediciones de corriente de cortocircuito de una misma celda están dentro del 1%.

Los parámetros eléctricos medidos y simulados se muestran en la Tabla 2:

733-BC	V_{cc} [mV]	I_{cc} [mA]	FF	η [%]
experimental	230	25.00	0.644	5.7
simulación (juntura difundida)	220	25.74	0.653	5.6
simulación (juntura abrupta)	220	25.73	0.652	5.6

Tabla 2: Parámetros eléctricos resultantes de las simulaciones (AM1.5).

En la Figura 2 se muestra la eficiencia cuántica externa (EQE) medida en el IES y la curva simulada.

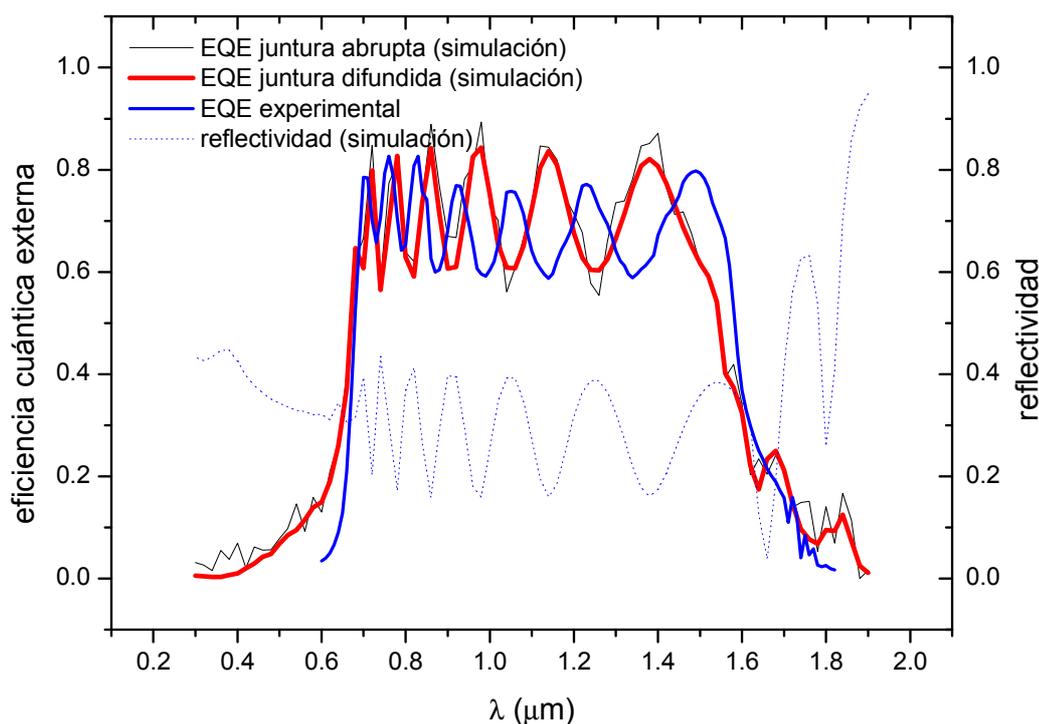


Figura 2: Eficiencia cuántica externa simulada, experimental y reflectividad de la celda de Ge.

El patrón de interferencia se debe a las propiedades ópticas de la capa de InGaP sobre el Ge pudiéndose observar, además, la correlación de la curva de reflectividad con la EQE correspondiente a las simulaciones. Cabe señalar que en el caso de considerar una alta densidad de defectos en el *buffer* ($N_d=1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$), se logra un mejor ajuste para la EQE para bajas longitudes de onda, logrando un corte más cercano a 600 nm, mientras que la corriente para este caso es de $J_{cc}=25.03 \text{ mA/cm}^2$. Esto llevaría a considerar que podría existir una alta densidad de defectos en el material o en la interfaz InGaP-Ge responsables de que llegue una menor cantidad de pares electrón-hueco generados en el InGaP a la juntura.

Por otra parte, se trataron de ajustar las posiciones de los picos entre la EQE simulada y la EQE experimental variando el espesor del InGaP. Un mejor ajuste se logra para un espesor de InGaP de 840 nm, pero no explican totalmente las posiciones

de todos los picos por lo que podría pensarse que existen diferencias en la estructura considerada en la Figura 1 con respecto a la situación real del dispositivo.

A fin de evaluar la influencia de la capa *buffer* en las características ópticas de la celda, se calculó la reflectividad de la celda para distintos espesores de InGaP, cálculo que se muestra en la Figura 3. Se puede observar que el caso más desfavorable corresponde a no tener la capa de InGaP, ya que el dispositivo es más reflectante. Para este caso la J_{cc} disminuye a 20.11 mA/cm^2 .

Por otra parte, se realizó un estudio sobre la influencia de la capa de InGaP sobre las características eléctricas del dispositivo. En la Figura 4 se presenta la J_{cc} vs. el espesor de InGaP. Existe un espesor para el cual la corriente es máxima, que está alrededor de los 40 nm. Existen varios factores que podrían explicar este hecho: uno es que a medida que el espesor de InGaP aumenta, este material absorbe más y llegan menos fotones a la unión n-p de Ge, con la consecuente baja en la J_{cc} . Si bien la capa de InGaP juega en alguna medida el rol de capa antirreflectante, es importante mencionar que también tiene un rol pasivante debido a su alto *band gap* con respecto al Ge. Una situación similar fue estudiada para el caso de una celda de GaAs con ventana de InGaP (Plá et al., 2007a).

Así, la baja corriente para espesores del orden de los 10 nm puede ser explicada en términos de una peor capa antirreflectante debido a un alejamiento del espesor óptimo y también como una degradación en la pasivación de la cara frontal del dispositivo.

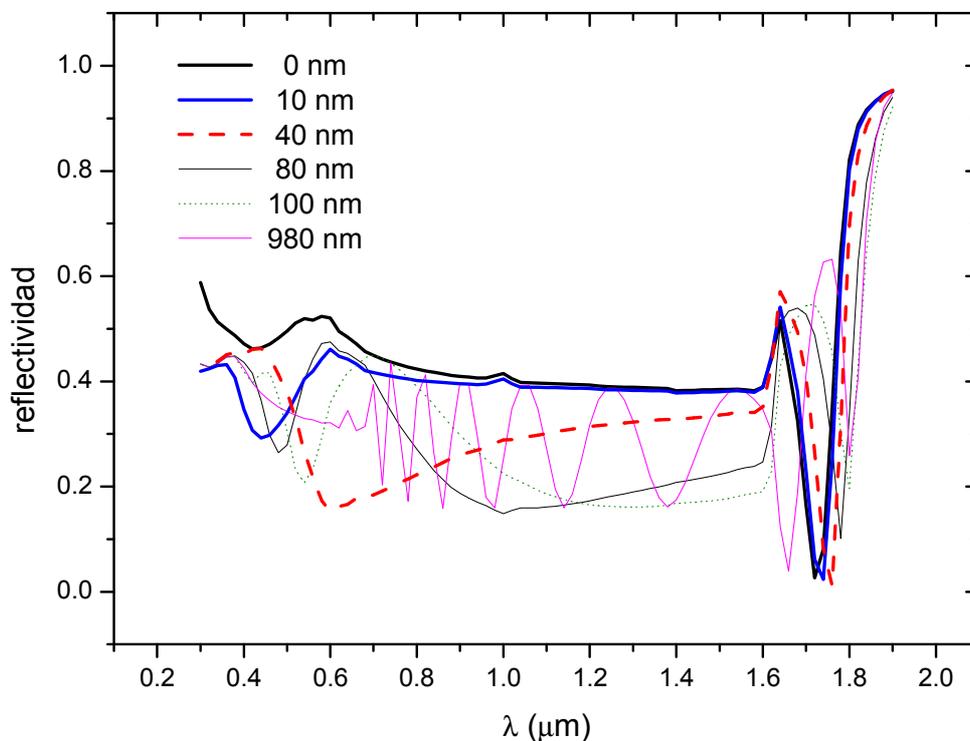


Figura 3: Reflectividad de la celda de la superficie de la celda de Ge.

En la Figura 5 se muestran las tasas de generación (G) y recombinación (R) dentro de las diferentes capas del dispositivo. La región del sustrato donde $R=G$, la que se encuentra a una distancia de alrededor de $67 \mu\text{m}$ desde la superficie del dispositivo, es una zona muerta en términos de colección de portadores foto-generados y no contribuye a la corriente J_{cc} , jugando sólo el rol de soporte mecánico.

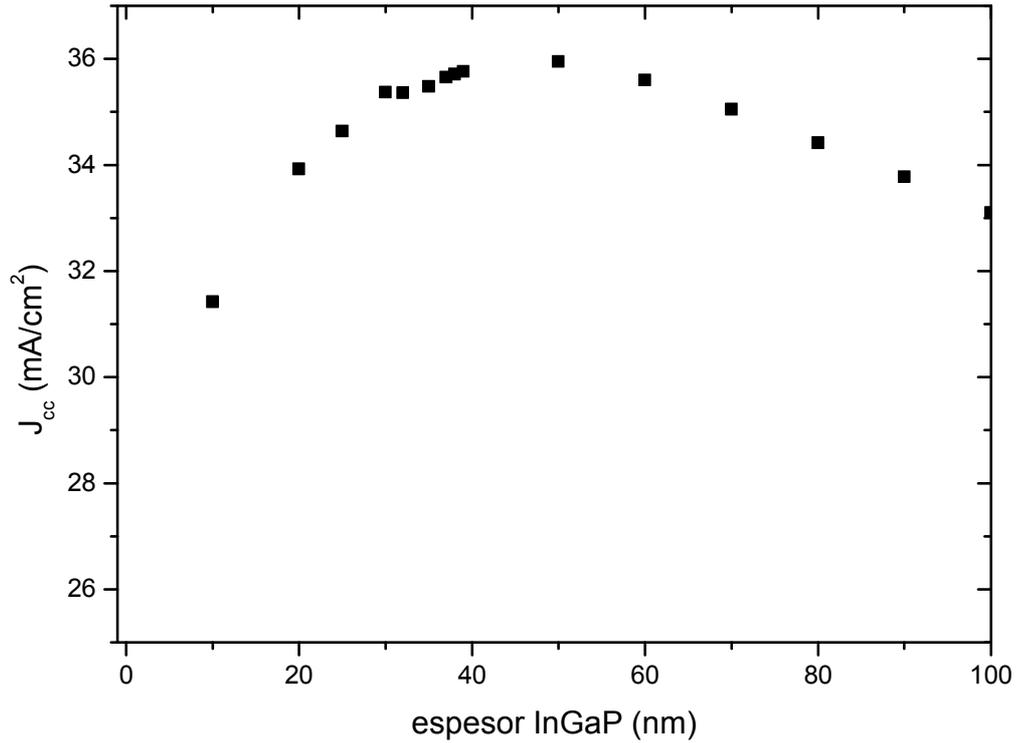


Figura 4: Corriente de cortocircuito en función del espesor del buffer de InGaP.

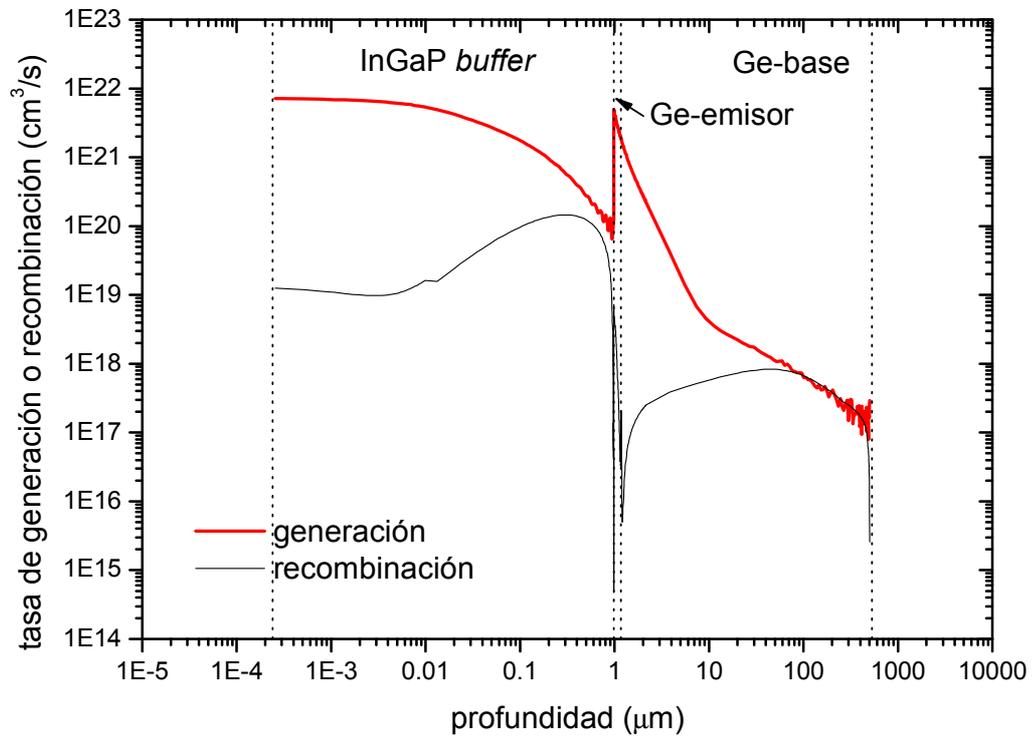


Figura 5: Tasas de generación y recombinación.

Para tratar de acercar la V_{ca} al valor experimental de la Tabla 2, se varió el dopaje de la base hasta lograr un mejor ajuste, el cual se consigue para una concentración $N_a \sim 2.2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, concentración que se aparta del valor consignado correspondiente a la oblea de Ge aunque se mantiene en el mismo orden de magnitud. A esta V_{ca} le corresponde $I_{cc} \sim 25.71 \text{ mA/cm}^2$.

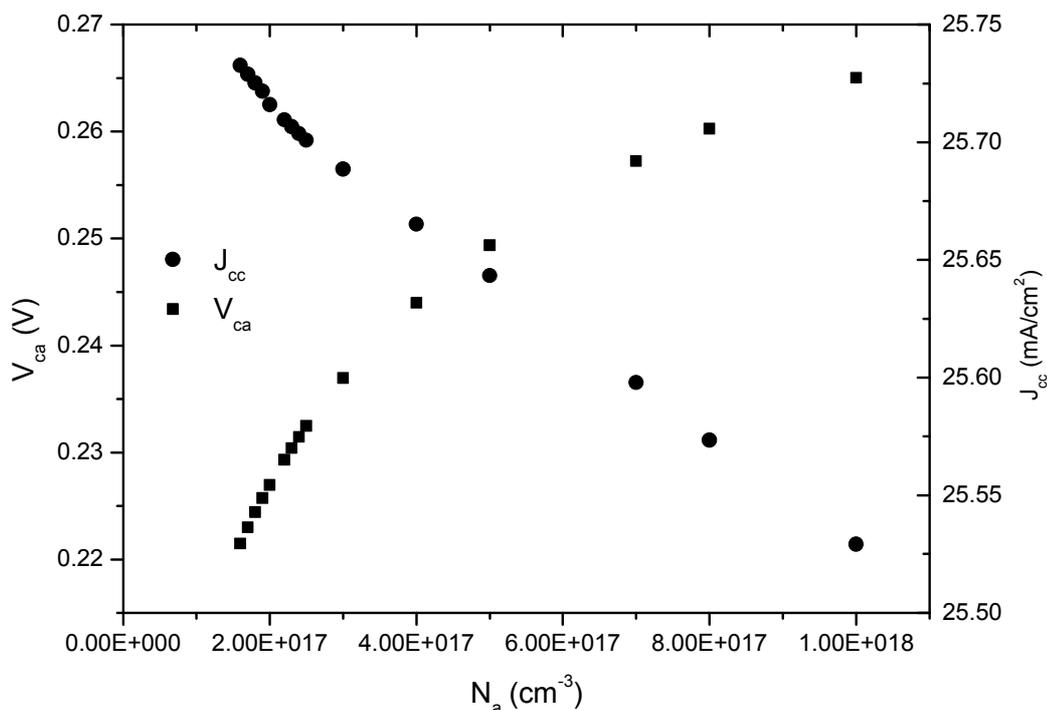


Figura 6: Tensión de circuito abierto y corriente de cortocircuito en función de la concentración de dopante en la base.

CONCLUSIONES

Se presentaron los resultados de la simulación de una celda de Ge para usos terrestres con concentración con *buffer* de InGaP, estructura que a su vez corresponde a la de la celda *bottom* de un dispositivo de triple juntura InGaP-GaAs-Ge. Dicha celda fue elaborada en el Instituto de Energía Solar de la Universidad Politécnica de Madrid y caracterizada en el GES de la CNEA.

Se realizó primeramente la comparación de los parámetros eléctricos obtenidos mediante la simulación numérica de una homojuntura n-p con emisor difundido como con juntura abrupta. Los parámetros eléctricos obtenidos no muestran diferencias si se toma, en el caso abrupto, una concentración media de dopante.

Posteriormente se estudió el papel que cumple el *buffer* de InGaP sobre el dispositivo. La eficiencia cuántica externa muestra el patrón de interferencia producido por la capa de InGaP, acorde a la curva de reflectividad simulada, aunque se encontraron diferencias con el patrón presente en la curva experimental que podría implicar tanto una diferencia entre el espesor de InGaP nominal y el real como la presencia de otros componentes en la estructura del dispositivo. Observando la variación de los parámetros eléctricos con el dopaje de InGaP, se encontró que posiblemente el valor de la concentración de dopante en la base considerado no sea exactamente el real. Finalmente, se observó que el comienzo de la denominada “zona muerta” del dispositivo se encuentra a una distancia aproximada de 67 μm desde la superficie del dispositivo.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a Hernán Socolovsky por su ayuda en la medición de la curva I-V de los dispositivos.

REFERENCIAS

- Barrera M., Plá J., Rubinelli F. (2007). Simulación numérica de celdas solares de GaAs. Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente **11**, 04.93 – 04.99.
- Barrera M., García J., Socolovsky H., Rubinelli F., Godfrin E., Plá J. (2008). Activities on simulation and characterization of multijunction solar cells for space applications in Argentina. Proceedings of the 23rd European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition, 781-784.
- Bosi M., Attolini G., Ferrari C., Frigeri C., Rimada Herrera J.C., Gombia E., Pelosi C., Peng R.W. (2008). MOVPE growth of homoepitaxial germanium. Journal of Crystal Growth **310**, 3282-3286.
- Espinete P., Rey-Stolle I., Galiana B., Baudrit M., Algora C. (2007). Modeling Germanium p-n Junctions for Multi-junction Solar Cell Applications. Spanish Conference on Electron Devices, 96-99.
- Friedman D.J., Olson J.M. (2001). Analysis of Ge junctions for GaInP/GaAs/Ge three-junction solar cells. Progress in Photovoltaics: Research and Applications **9**, 179-189.
- Galiana B., Rey-Stolle I., García I., Datas A., Algora C. (2007). MOVPE growth on Ge Substrates for thermophotovoltaic cell applications. Proceedings of the EW-MOVPE XII, D6.
- Gaubas E., Vanhellefont J. (2006). Dependence of carrier lifetime in germanium on resistivity and carrier injection level. Applied Physics Letters **89**, 142106.

- Nagashima T., Okumura K., Muratal K., M. Yamaguchi M. (2003). A germanium back-contact type cell for thermophotovoltaic applications. 3rd World Conference on Photovoltaic Energy Conversion, 200-203.
- Plá J., Barrera M., Rubinelli F. (2007b). The influence of the InGaP window layer on the optical and electrical performance of GaAs solar cells. *Semiconductor Science and Technology* **22**, 1122-1130.
- Plá J., Barrera M., Rubinelli F., García J., Socolovsky H., Bosi M., G. Attolini, C. Pelosi (2007a). Avances en el estudio de celdas solares basadas en materiales III-V. *Avances en Energías Renovables y Medio Ambiente* **11**, 04.85-04.92.
- Posthuma N.E., van der Heide J., Flamand G., Poortmans J. (2007). Emitter Formation and Contact Realization by Diffusion for Germanium Photovoltaic Devices. *IEEE Transactions on Electron Devices* **54**, 1210-1215.
- Posthuma N.E., Flamand G.; Poortmans J. (2003). Development of stand-alone germanium solar cells for application in space using spin-on diffusants. *Proceedings of the 3rd World Conference on Photovoltaic Energy Conversion*, 777-780.
- Posthuma N.E., Flamand G., Geens W., Poortmans J. (2005). Surface passivation for germanium photovoltaic cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells* **88**, 37-45.
- Posthuma N.E., van der Heide J., Flamand G., Poortmans J. (2004). Development of low cost germanium photovoltaic cells for application in TPV using spin on diffusants. *AIP Conference Proceedings* **738**, 337-344.
- Prieto I., Galiana B., Postigo P. A., Algora C., Martínez L.J., Rey-Stolle I. (2009). Enhanced quantum efficiency of Ge solar cells by a two-dimensional photonic crystal nanostructured surface. *Applied Physics Letters* **94**, 191102-1 - 191102-3.
- Rubinelli F.A., Rath J.K., Schropp R.E.I. (2001). Microcrystalline n-i-p tunnel junction in a-Si:H/a-SiH tandem cells. *Journal of Applied Physics* **89**, 4010-4018.
- Sze S.M. (1981). *Physics of semiconductor devices*. John Wiley & Sons, 2^a edición, pp.29. Wiley Interscience, New York.
- Tobin S.P.; Vernon S.M., Bajgar C.; Haven V.E.; Geoffroy L.M.; Sanfacon M.M.; Lillington D.R.; Hart R.E. Jr.; Emery K.A.; Matson R.J. (1988). High efficiency GaAs/Ge monolithic tandem solar cells. *Proceedings of the 20th IEEE Photovoltaic Specialist Conference*, 405-410.
- van der Heide J., Posthuma N.E., Flamand G., Geens W., Poortmans J. (2009). Cost-efficient thermophotovoltaic cells based on germanium substrates. *Solar Energy Materials & SolarCells* **93**, 1810–1816.
- Vukadinovic M., Smole F., Topic M., Schropp R.E.I., Rubinelli F.A. (2004). Transport in tunnelling recombination junctions, a combined computer simulation study. *Journal of Applied Physics* **96**, 7289 (2004).

ABSTRACT

Nowadays, Ge solar cells has become important because they can be used both in homojunction as in multijunction devices. An example of the first situation is the case of devices for TPV (*Thermophotovoltaics*) applications and an example of the second are triple junction InGaP-GaAs-Ge cells for space or terrestrial applications.

For this work, numerical simulation of single junction n-p InGaP-Ge solar cells with a similar structure to the bottom cell of a triple junction solar cell was studied. The results were compared with devices developed at the Instituto de Energia Solar of the Universidad Politecnica de Madrid for terrestrial concentrator systems.

Given that the emitter of the Ge homojunction can be prepared by two methods, diffusion or epitaxial growth, the comparison of the electrical parameters of each case was performed. The results show no differences when both cases are considered using a gaussian or an abrupt change in the concentration of the emitter doping. Subsequently, the external quantum efficiency and the role of the InGaP buffer on the device were studied.

Keywords: solar cells, germanium, numerical simulation