

Computational Modeling of Thin-Film Silicon Solar Cells and Modules

THÈSE N° 5799 (2013)

PRÉSENTÉE LE 13 SEPTEMBRE 2013

À LA FACULTÉ DES SCIENCES ET TECHNIQUES DE L'INGÉNIEUR
LABORATOIRE DE PHOTOVOLTAÏQUE ET COUCHES MINCES ÉLECTRONIQUES
PROGRAMME DOCTORAL EN PHOTONIQUE

ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

POUR L'OBTENTION DU GRADE DE DOCTEUR ÈS SCIENCES

PAR

Thomas Andreas LANZ

acceptée sur proposition du jury:

Prof. P.-A. Farine, président du jury
Prof. C. Ballif, Prof. B. Ruhstaller, directeurs de thèse
Prof. L. C. Andreani, rapporteur
Dr T. Scharf, rapporteur
Dr J. Steinhauser, rapporteur



ÉCOLE POLYTECHNIQUE
FÉDÉRALE DE LAUSANNE

Suisse
2013

To post-fossil generations.

Acknowledgements

I would like to thank Beat Ruhstaller and Christophe Ballif for supervising my thesis and giving me the opportunity to work on interesting projects with industrial relevance. I have learned and profited immensely from the past four years and I'm very grateful that both my supervisors agreed to embark with me on this project.

Several members of ICP have helped me along the way and also assured proper balance of work and play. So my thanks go in particular to Evelyne Knapp, Kai Brossi, Kevin Lapagna, Guido Sartoris, Matthias Schmid, Mathias Bonmarin, Nils Reinke, Christoph Kirsch and Jürgen Schumacher. The interdisciplinary environment at ICP proved to be very stimulating.

For my simulations I needed material parameters and experimental results. And so I am very grateful to have encountered a very collaborative spirit at IMT Neuchâtel and that the exchange eventually bore such nice fruits. In particular I would like to thank Franz-Josef Haug, Corsin Battaglia, Ali Naqavi, Michael Stückelberger, Christian Schlumpf and Mathieu Boccard. In 2011 I was able to spend some time at the Solar Energy Laboratory of KAIST university. I would like to thank Koeng Su Lim, Seung Jae Baik, Liang Fang and the students of SEL for welcoming me in their lab and the collaborative atmosphere. I am very happy that our exchange was fruitful and extends to this day.

I would like to thank Christian Hafner and Nikolay Komarevskiy of ETHZ for interesting discussion on rigorous Maxwell solvers and hybridization techniques.

Finally, I thank my wife Marie-Louise for her constant support and encouragement.

Winterthur, April 5, 2013

Thomas Andreas Lanz

Preface

With the commercial success of thin-film silicon solar cell technology one may be tempted to disregard the many research challenges that we are still facing in this field and which prevent an even wider exploitation and deployment in the market. The challenges are manifold. So are the cell structures and processing conditions which these technologies are based on. Physical models and simulation algorithms are very useful in this context. They enable the scientists to explore the behavior of a solar cell or material on a computer. On the one hand, the numerical models help to understand and interpret measurement data and to further develop refined and reliable physical models. On the other hand the models allow optimizing materials and devices. Progress in this field relies on an interdisciplinary approach that combines experimental, physical and numerical expertise.

The challenge of this thesis was to focus on bridging those competences. It is a great achievement that Thomas consistently performed critical comparisons of the measurement data and his simulation results. Moreover, he resisted the temptation to use the ever increasing computational power of today's PCs. Rather, he successfully managed to strictly develop and implement numerical algorithms that are efficient and lend themselves for parameter variation and optimization studies using standard PCs. The latter is a key requirement if simulation shall have a practical impact in the technological development of solar cells. Moreover, Thomas stayed in close contact with the researchers of the EPFL photovoltaics lab and the Institute of Computational Physics at ZHAW in order to learn from and interact with peers. Thomas laid an excellent basis for future work. Light scattering and electro-thermal modeling are crucial topics of many more thin-film large-area devices. I thus cordially thank him for his hard and fruitful work that will inspire many colleagues in the future. It will eventually lead to ever more reliable physical models which accelerate our research efforts. It was a pleasure to write a preface to this Ph.D. thesis and more importantly, to have coached Thomas Lanz in this crucial period of his professional career.

Enjoy the lecture of this thesis!

Winterthur, April 5, 2013

Beat Ruhstaller

Abstract

Solar photovoltaic energy production relies on the direct conversion of sunlight into electricity. Silicon thin-film solar cells represent a reliable and environmentally friendly technology to make photovoltaics economically viable. As these solar cells do not contain any rare or toxic materials they are an ideal candidate for the large scale deployment of solar energy. At the same time photovoltaic energy production is ideal for off-grid, stand-alone installations.

This thesis presents new methods and results on computational engineering of thin-film silicon solar cells and modules. Computational engineering employs numerical methods and simulation techniques to address engineering challenges. Predictive numerical simulations allow for device optimizations that otherwise require substantial experimental effort and they may lead to new insights into the device physics which is the basis for further improvements in terms of cell efficiency and lifetime. We discuss the development of two new simulation methods and present several case studies that illustrate their use in solar cell characterization and optimization.

The first presented method addresses optical simulations, i.e. the interaction of the solar cell with sunlight. Our optical model is based on the net-radiation method that considers incoherent, ray-like propagation of light. We extend the net-radiation method with thin-film optics to allow for arbitrary sequences of thick and thin layers. Experimentally, advanced techniques such as optimized surface textures have been developed to increase the absorption in the solar cell and thereby to increase the produced current. We illustrate how our optical model takes into account these textures by means of azimuth integrated light scattering properties to formulate a computationally efficient model of light propagation within the solar cell. Our optical model thus integrates coherent and incoherent propagation of light as well as a non-iterative treatment of light scattering. It bridges the gap between wave and ray optics that alternative approaches are most often facing. We first apply the method to study a recently proposed rear electrode architecture based on lithium fluoride and aluminum in amorphous silicon solar cells. Our model-based optical analysis identifies the increased reflectivity of this back electrode as its main advantage. Secondly, we then explore the potential performance gains in microcrystalline silicon solar cells that can be reached by eliminating absorption in layers that do not contribute to the photogeneration of solar cell current. Finally, our optical model is also suited for other solar cell technologies and we illustrate its extension and application to light extraction calculations in light emitting diodes (LEDs). Our optical model has been incorporated into the software package *setfos*, commercialized by Fluxim Inc. It is thus available to the research community.

Preface

We then turn to address large area solar modules. A new method based on the finite element method (FEM) is presented to calculate the electrical charge and heat transport in these devices and how it is influenced by defects as well as partial shading. We identify such defects with surface temperature measurements by means of lock-in thermography and demonstrate how our model accounts for the thermal signature of localized defects. Taking into account the large aspect ratio of thin-film solar modules we show how geometrical projections can be used to reduce the model complexity, leading to a numerically efficient approach based on the finite element method. We demonstrate this by presenting full current-voltage curves of solar modules under partial shading.

Keywords: numerical simulation, thin-film devices, silicon, solar cells, amorphous silicon, microcrystalline silicon, light trapping, textured electrodes, surface morphology, crystallinity, parasitic absorption, light emitting diodes, finite element method, multi-physics, lock-in thermography, lithium fluoride

Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der Entwicklung und Anwendung von Simulationen für Dünnschicht Silizium Solarzellen und -module. Es werden Methoden aus der computergestützten Physik verwendet um Entwicklungsaufgaben in der Solarzellenforschung zu unterstützen und neue Einsichten in die Physik dieser Bauteile zu gewinnen. Numerische Simulationen, die eine korrekte Beschreibung der Funktionsweise der Solarzellen erlauben, können für Optimierungsaufgaben eingesetzt werden, welche andernfalls mit erheblichem experimentellen Aufwand verbunden wären. Wir stellen zwei neu entwickelte Simulationen vor und illustrieren anhand mehrerer Fallbeispiele deren Einsatz und Nutzen in der Entwicklung von Solarzellen.

Die solare Energieerzeugung mit Photovoltaik beruht auf der direkten Umwandlung von Sonnenlicht in Elektrizität. Silizium-basierte Dünnschicht Solarzellen ermöglichen diese Umwandlung technisch zu realisieren und sind dabei sowohl ökonomisch als auch ökologisch. Dies, da sie keinerlei rare oder giftige Materialien enthalten, was sie zu idealen Kandidaten macht für den Einsatz von Solarenergie auf grossen Skalen. Gleichzeitig eignet sich die Photovoltaik für netzunabhängige Inselanlagen.

Die erste Simulationsmethode, die wir detailliert vorstellen, berechnet die Interaktion der Solarzelle mit Sonnenlicht. Um die Lichtabsorption von Dünnschicht Solarzellen zu erhöhen, hat man Oberflächentexturen entwickelt welche einerseits zu erhöhter Absorption führen und andererseits gute elektrische Kontakte ermöglichen. Wir stellen dar, wie unser Modell solche Texturen anhand integrierter Streueigenschaften berücksichtigt um eine numerisch effiziente Beschreibung der Lichtausbreitung zu erhalten. Wir wenden die Methode an um die Vorteile von Lithiumfluorid-basierten Rückelektroden in Solarzellen aus amorphem Silizium zu eruieren. Wir können die erhöhte Reflektivität dieser Rückelektroden als deren Hauptvorteil bestimmen. In mikrokristallinen Silizium Solarzellen untersuchen wir die potentiellen Gewinne welche durch Unterdrückung der parasitären Absorption erreicht werden können. Das optische Modell eignet sich auch für andere Solarzellentechnologien und wir demonstrieren, dass es auch für Emissionsberechnungen in Leuchtdioden verwendet werden kann.

Darüber hinaus diskutieren wir zudem eine neu entwickelte Simulationsmethode für Dünnschicht Solarmodule. Die Methode löst die Transportgleichungen für elektrische Ladung und Wärme und berücksichtigt dabei den Einfluss von Defekten. Solche Defekte werden in Solarmodulen üblicherweise mit Lock-In Thermographie erkannt und wir zeigen wie unser Modell die thermische Signatur dieser Defekte korrekt wiedergibt. Dünnschicht Solarmodule haben ein grosses Breiten-zu-Dicken Verhältnis und wir demonstrieren, wie dieses ausgenützt

Preface

werden kann um eine numerisch effiziente Modellbeschreibung zu erhalten. Dazu nützen wir Projektionen zur geometrischen Vereinfachung des Simulationsgebietes. Komplette Strom-Spannungs Kennlinien von partiell abgeschatteten Solarmodulen bestätigen diese Systematik und illustrieren den Nutzen unseres Modells.

Schlüsselwörter: Numerische Simulation, Dünnschicht Technologie, Silizium, Solarzellen, Amorphes Silizium, Mikrokristallines Silizium, light trapping, Texturierte Elektroden, Oberflächenbeschaffenheit, Kristallinität, Parasitäre Absorption, LEDs, Finite Elemente Methode, Multi-Physik, Lock-In Thermographie, Lithiumfluorid

Résumé

La production d'énergie solaire photovoltaïque est basée sur la conversion directe de la lumière du soleil en électricité. Les cellules à couche mince en silicium constituent une technologie sûre et respectueuse de l'environnement pour rendre le photovoltaïque économiquement viable. Ces cellules photovoltaïques ne contiennent aucun composant rare ou toxique, et sont des candidats de choix pour le déploiement à grande échelle de l'énergie solaire. En même temps, la production d'énergie photovoltaïque est idéale pour des installations hors-réseaux et autonomes.

Cette thèse présente de nouvelles méthodes et de nouveaux résultats dans le domaine de l'ingénierie computationnelle concernant les cellules et modules solaires à couche mince en silicium. L'ingénierie computationnelle utilise des méthodes numériques ainsi que des techniques de simulation afin de résoudre les défis de l'ingénierie. Les simulations numériques prédictives permettent d'une part une optimisation des composants qui sans cet outil demanderait de lourds efforts expérimentaux, et d'autre part, elles peuvent également permettre un nouvel aperçu concernant la physique qui gouverne ces mêmes composants. Nous examinons dans ce travail, le développement de deux nouvelles méthodes de simulations et présentons plusieurs applications type pour illustrer leur utilisation dans le domaine du développement des cellules solaires.

La première méthode présentée cible les simulations optiques, c'est à dire, l'interaction de la cellule photovoltaïque avec la lumière du soleil. Expérimentalement, des techniques avancées tel que la texture de surface optimisée ont été développées afin d'accroître l'absorption dans la cellule solaire et de ce fait, le courant produit. Nous démontrons comment notre modèle optique prend en compte les différentes textures pour formuler un modèle efficace, en terme de calculs, de la propagation de la lumière dans la cellule. Nous utilisons cette méthode pour étudier une architecture électrode arrière récemment proposée, basée sur le fluorure de lithium. Notre analyse optique, basée sur notre modèle, identifie l'augmentation de la réflectivité de cette électrode arrière comme son principal avantage. Nous explorons ensuite les gains potentiels des cellules en silicium microcristallines obtenus par l'élimination des phénomènes d'absorption dans les couches ne contribuant pas au photo-courant. Notre modèle optique peut également être employé pour d'autres technologies solaires et nous illustrons son utilisation pour le calcul d'extraction de la lumière dans une LED.

Nous nous tournons ensuite vers les modules solaires de large surface. Nous présentons une nouvelle méthode pour calculer le transport de charges électriques et de chaleur dans ces composants ainsi que l'influence de défauts. Ces défauts sont souvent identifiés grâce à des

Preface

mesures de températures de surface, effectuées à l'aide de la thermographie de type lock-in. Nous démontrons comment notre modèle rend compte de la signature thermique de ces défauts localisés. Prenant en compte le large rapport largeur/hauteur des modules à couche mince, nous montrons comment des projections géométriques peuvent être avantageusement utilisées afin de réduire la complexité du modèle et obtenir une simulation efficace numériquement. Nous illustrons cela en présentant des courbes courant-tension complètes de modules solaires sous illumination partielle.

Mots-clés : simulation numérique, composants à couche mince, silicium, cellules solaires, silicium amorphe, silicium monocristallin, light trapping, électrodes texturées, morphologie de surface, taux de cristallinité, diodes électro luminescentes, méthode à éléments finis, multiphysique, absorption parasite, fluorure de lithium, thermographie lock-in