**і3. Вплив залізовмісних дефектів на характеристики та параметри фотоелектричного перетворення кремнієвих сонячних елементів**

**3.1 Фактор неідеальності**

Фактор неідеальності ( є важливим діагностичним параметром у фізиці напівпровідників через його взаємозв’язок з домінуючими механізмами рекомбінації та динамікою дефектів. Для сонячних елементів на основі кремнію, де рівень забруднення домішками та дизайн самої структури суттєво впливають на ефективність, розуміння взаємозв'язку між та параметрами КСЕ має важливе значення.

Фактор неідеальності для сонячних елементів можна визначати різними методами: з аналізу темнових та світлових ВАХ; з нахилу залежності (T), вимірюючи напругу розімкнутого кола при різних температурах КСЕ; за допомогою методу двох точок (маючи 2 пари значень напруги та струму в експоненційній області ВАХ); або за допомогою Suns– методу [cuevas2009]. В нашому випадку фактор неідеальності визначався зі змодельованих темнових ВАХ КСЕ, при використанні дводіодної моделі для апроксимації отриманих кривих.

Значення фактору неідеальності у реальних сонячних елементах зазвичай знаходиться в діапазоні від 1 до 2 та залежність від зовнішніх умов (таких як температура й освітленість) і внутрішніх характеристик матеріалу, зокрема параметрів рекомбінаційних центрів, включно з концентрацією пасток [hameiri2013]. Така чутливість робить фактор неідеальності ефективним інструментом для оцінки механізмів втрат у сонячних елементах. Зокрема, відхилення його значення від одиниці може свідчити про домінування некласичних механізмів рекомбінації або наявність структурних дефектів [duan2018]. вперше запропонували проаналізувати залежність фактора неідеальності від умов навколишнього середовища та параметрів центрів рекомбінації в КСЕ

У цьому розділі, зокрема, розглядається залежність фактора неідеальності від умов навколишнього середовища та параметрів центрів рекомбінації в структурі з домішками заліза, при цьому використовувалася перша РМКСЕ. З урахуванням двох конфігурацій дефектів було змодельовано 15048 структур КСЕ. У випадку одиночних неспарених були розраховані наступні величини: - коефіцієнт неідеальності, якщо враховувати тільки рекомбінацію ШРХ; - фактор неідеальності, якщо враховується як рекомбінація ШРХ, так і власна рекомбінація; характеризує вплив власної рекомбінації на значення фактора неідеальності. У випадку співіснування пар та міжвузольного заліза були розраховані аналогічні величини. Додатково було розраховано зміну коефіцієнта неідеальності після об'єднання бору з залізом .

На рис.3.1-3.3 наведені типові змодельовані залежності значення фактора неідеальності в залежності від температури та концентрацій заліза і бору. Зауважимо, що поверхні (поверхня 5) не всюди наведені, бо для випадків рис.3.1б та рис.3.3а вони практично збігаються з поверхнями (поверхня 4).

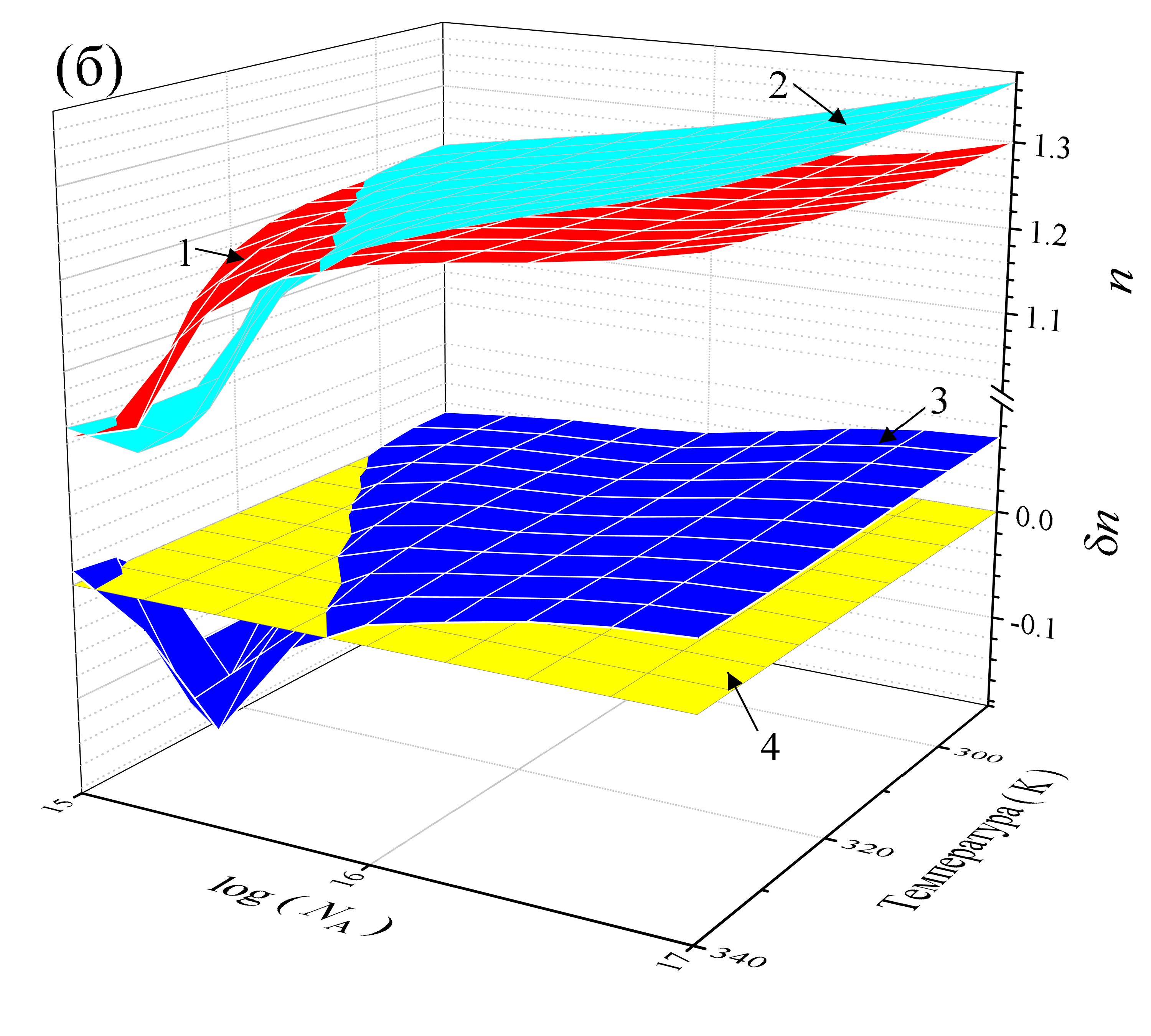
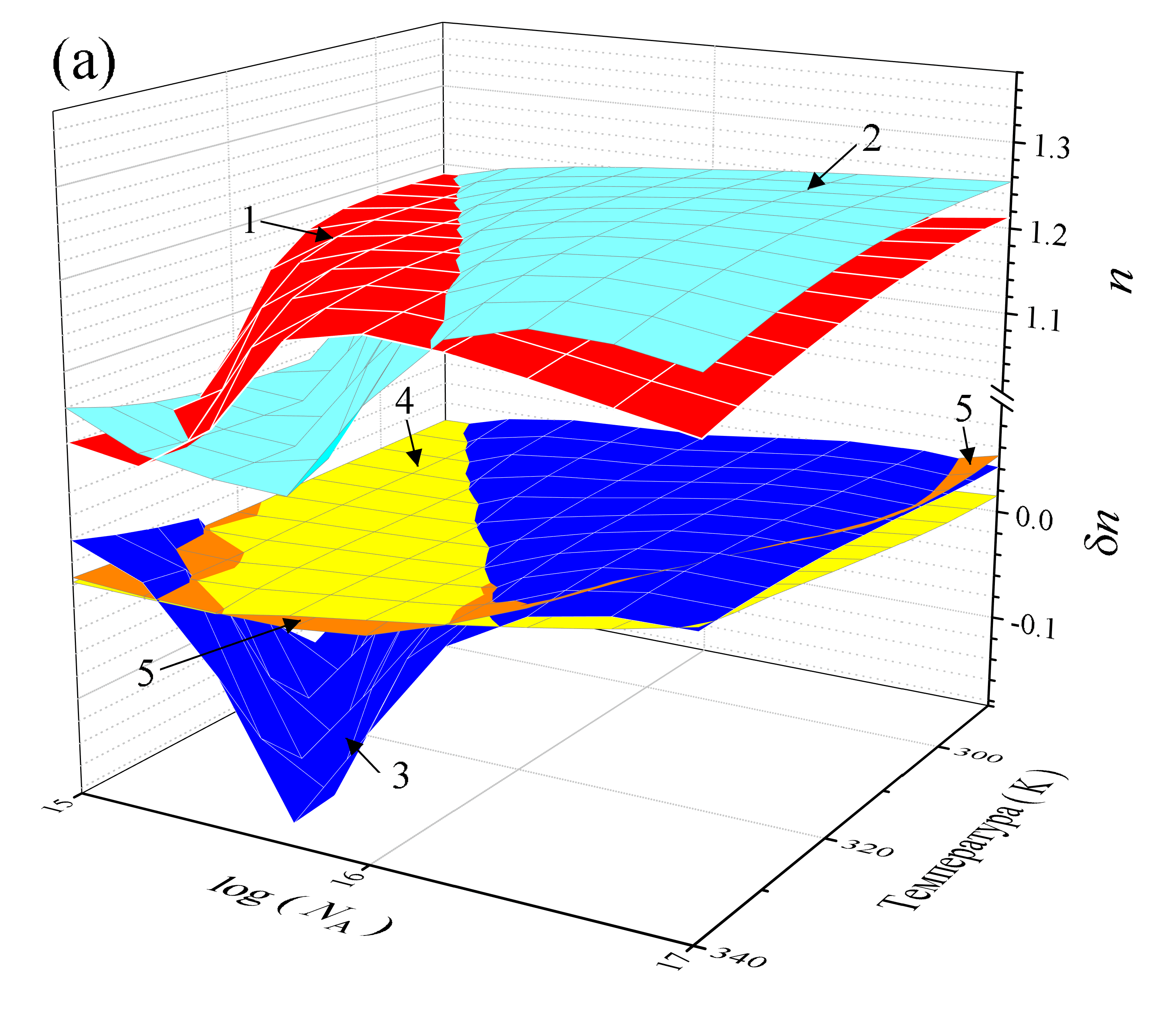


Рис. 3.1 Фактор неідеальності та його зміна в залежності від температури та концентрації бору (. : (а), (б); . Поверхні: 1 - залежність , 2 - , 3 - , 4 - , 5 -

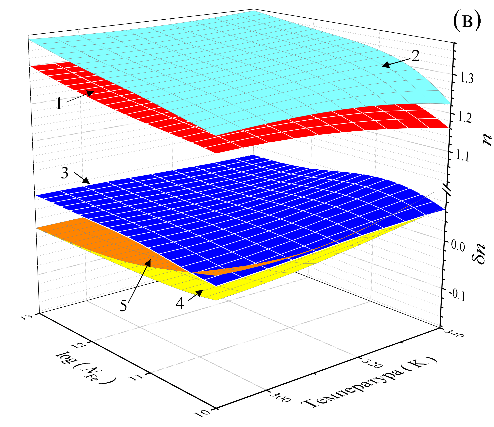
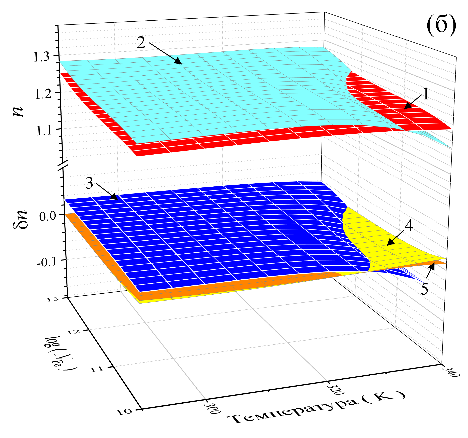
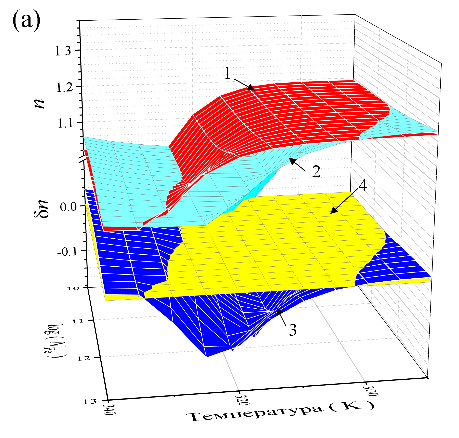


Рис. 3.2 Фактор неідеальності та його зміна в залежності від температури та концентрації заліза. : (а), (б), (в); . Поверхні та їх індекси такі самі як в рис.3.1

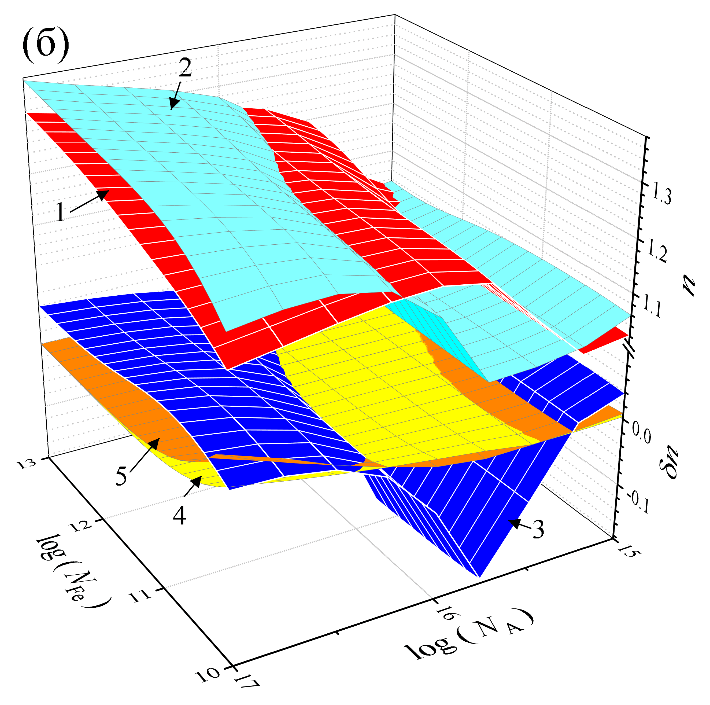
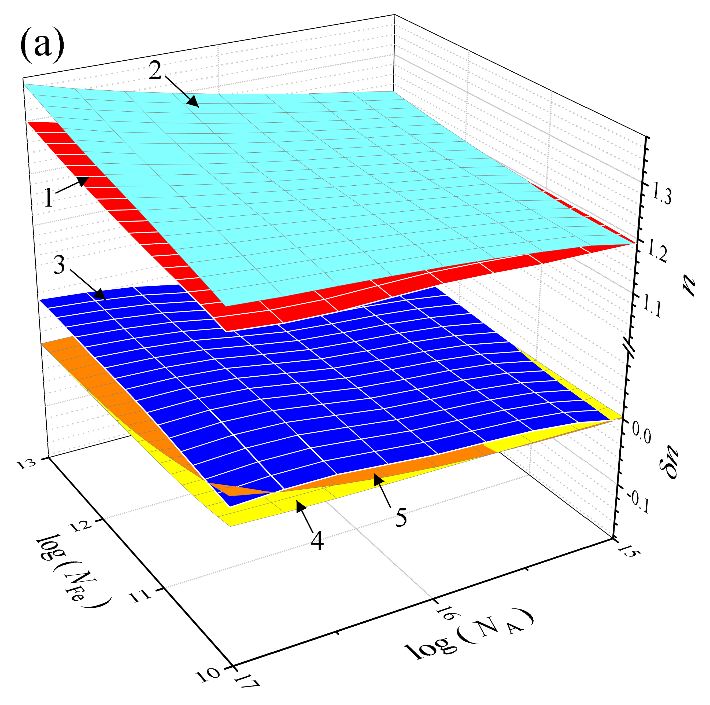


Рис. 3.3 Фактор неідеальності та його зміна в залежності від концентрації заліза та концентрації бора. : 290 (а), 340 (б); . Поверхні та їх індекси такі самі як в рис.3.1

Концентрація неспарених атомів заліза може бути досить великою і у випадку співіснування і , вона зростає з підвищенням температури і при зменшенні рівня легування. Оскільки тільки іонізоване залізо (на відміну від нейтрального заліза ) бере активну участь у рекомбінації в ОПЗ, то ці процеси відбуваються при (де - глибина ОПЗ). Причому область рекомбінації, яка визначає значення фактора неідеальності, зміщується від p-n переходу зі збільшенням рівня легування.

При аналізі залежностей фактора неідеальності від температури та концентрації бору необхідно враховувати кілька факторів:

1) наявність дірки на рівні , яка визначає ефективність рекомбінації. Відповідно до статистики Фермі-Дірака, ймовірність знаходження дірки на рівні в невиродженому напівпровіднику p-типу з повним виснаженням акцепторів може бути виражена як

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.1) |

Якщо близьке до одиниці (високе значення і низька T), ця залежність змінюється повільно, не залежить від температури і повільно зростає зі збільшенням рівня легування (рис.3.2(б),(в); 3.3(а)). При зменшенні або (і) збільшенні T рівень заповнюється електроном у досить вузькому діапазоні значень, рекомбінація ШРХ припиняється, а значення фактора неідеальності різко зменшується (рис. 3.1, 3.2(а); 3.3(б)).

2) баланс рекомбінації, пов'язаної з дефектами, та власної рекомбінації. Рекомбінація ШРХ, як правило, призводить до збільшення значення фактора неідеальності; якщо рекомбінація, пов'язана з дефектами, є домінуючою, то в публікаціях часто пишуть, що n = 2. Випромінювальна міжзонна та оже-рекомбінації посилюються при збільшенні як концентрації вільних носіїв заряду (рівня легування), так і температури [nguyen2014]. У цьому випадку фактор неідеальності зменшується і значення та стають ненульовими. Цей ефект спостерігається в кутах поверхонь на рис.3.1(a); 3.2(б),(в); 3.3.

Зміна концентрації домішкового заліза майже не впливає на характер залежності фактора неідеальності від інших параметрів. Однак зростання очікувано супроводжується збільшенням значення фактора неідеальності (див. рис.3.2, 3.3), яке майже лінійно залежить від . Виняток спостерігається лише тоді, коли рівень заповнений електронами (). У той же час, при низькій концентрації заліза та однакових інших параметрах КСЕ більший внесок у фактор неідеальності дає власна рекомбінація, а при низькій концентрації домішки спостерігається різке зменшення значення фактора неідеальності (рис.3.2(б), (в))

На рис.3.4 наведені залежності довжини дифузії електронів () у базі КСЕ від концентрації одиночних неспарених , які були розраховані за допомогою SCAPS. Очевидно, що вплив товщини бази спостерігається лише для випадку коли і це є причиною того, чому при .

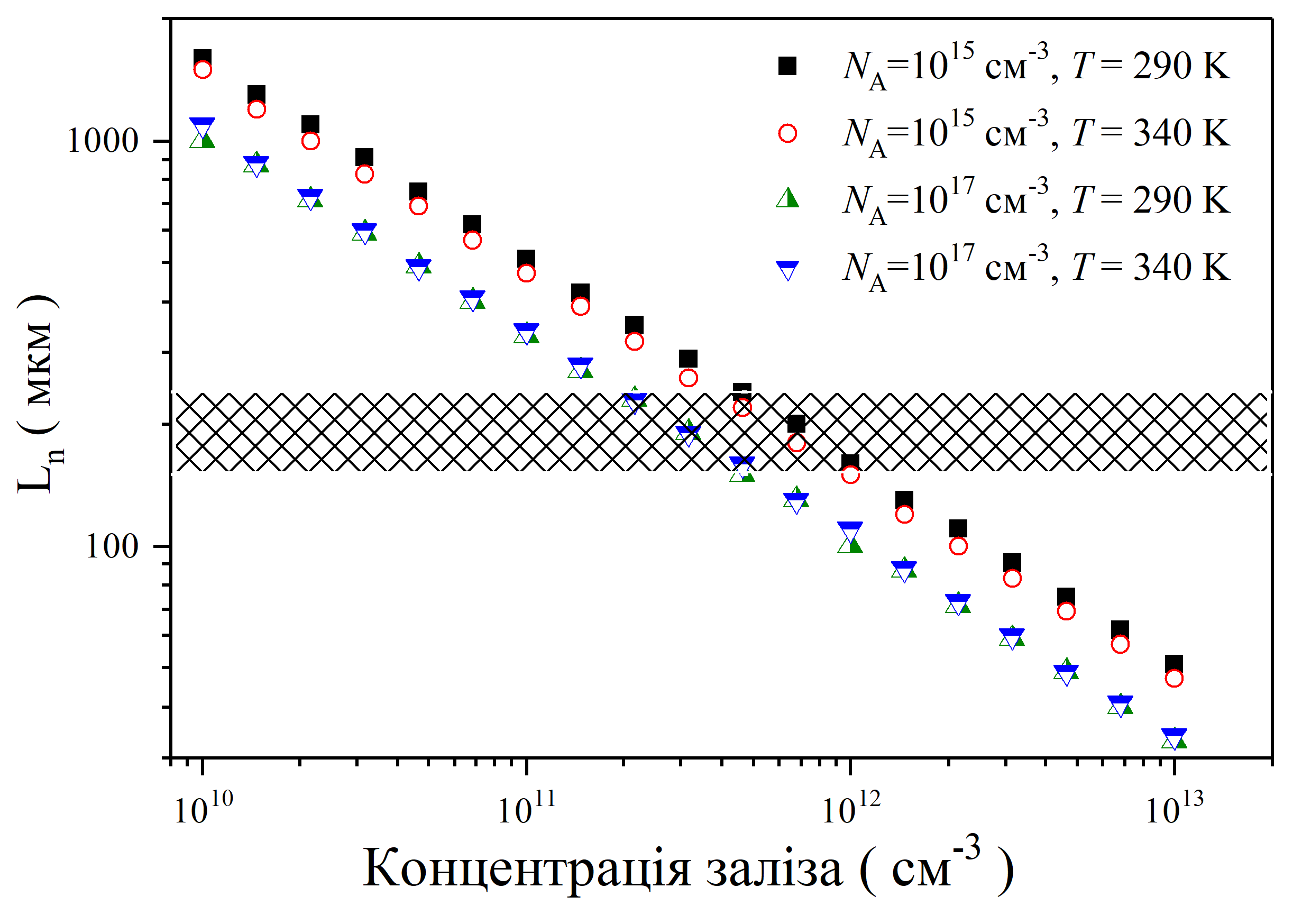


Рис. 3.4 Розраховані залежності довжини дифузії електронів в базі КСЕ у випадку наявності тільки міжвузольного . Заштрихована область - значення товщини бази, що використовувались при моделюванні.

Оскільки реакція асоціації призводить до зменшення впливу рекомбінації ШРХ, очікувалося, що і при всіх значеннях параметрів. Приклади таких очікуваних залежностей наведені на рис.3.2(б),(в) і рис.3.3(а). При цьому зростає зі збільшенням концентрації бору і практично не залежить від температури та концентрації заліза. Винятки спостерігаються лише тоді, коли збільшується внесок власної рекомбінації та зменшується (див. рис.3.2(б), (в) або рис.3.3(a)).

Однак випадок також можливий, див. рис.3.1, 3.2(а), 3.3(б). Області від'ємного значення спостерігаються в околі зменшення фактора неідеальності, яке викликане зайняттям рівня . Причиною того, що може бути різниця в положеннях рівнів Фермі у випадках співіснування неспареного та пар з . Однак розрахунки показали, що така різниця не перевищує , тому не може бути причиною виявленого ефекту. На рис.3.5 представлений просторовий розподіл рекомбінаційно активних міжвузольних атомів заліза до і після утворення пар та переходу в стан рівноваги. Ступінь зменшення концентрації залежить від відстані до p-n переходу.

На нашу думку, зміна профілю i є причиною зростання стійкості фактора неідеальності до змін температури та рівня легування у випадку співіснування і . Зауважимо, що цей ефект залежить від загальної концентрації заліза: збільшення значення призводить до зменшення при вищій температурі (рис.3.2(a)), а також при меншій концентрації бору (рис.3.3(б)).

Беручи до уваги рівняння (2.12), можна відзначити, що фактор неідеальності з'являється в частині, пов'язаній з рекомбінацією в ОПЗ, тому не повинен залежати від товщини бази нашого КСЕ. Однак така залежність спостерігається (див. рис.3.6(а)) і фактор неідеальності зменшується зі збільшенням товщини.

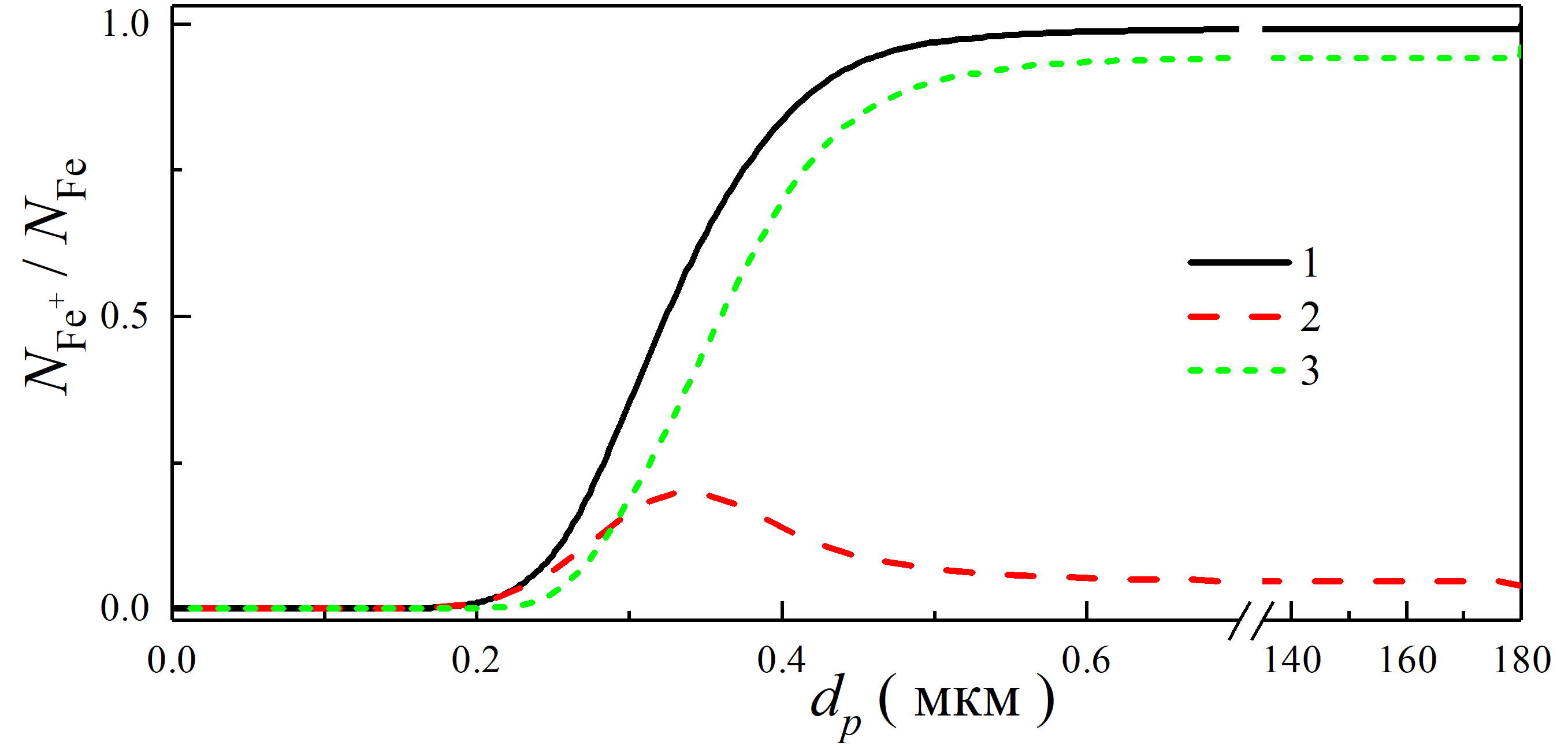


Рис. 3.5 Розподіл частки позитивно зарядженого міжвузольного заліза до загального числа домішок в базі КСЕ. Криві 1 і 2 відповідають випадкам неспареного та співіснування і . Крива 3 є різницею між кривими 1 і 2. T = 330 K, ,

Це свідчить про те, що на значення впливають процеси, які відбуваються і в квазінейтральній області. Фактор неідеальності змінюється подібним чином як у випадку поодиноких , так і у випадку співіснування та і добре описується лінійною залежністю

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.2) |

де – коефіцієнт залежності . Максимальний вплив товщини бази спостерігається при 1.05 < < 1.25. На рис.3.6(б)-(г) наведені залежності від інших параметрів моделювання. Вплив на загалом посилюється зі збільшенням температури, а також зі зменшенням концентрацій як бору, так і заліза. Зменшення внеску рекомбінації ШРХ за рахунок заповнення електронами рівня , а також за рахунок посилення власної рекомбінації призводить до зменшення . В дослідженні було виявлено, що величина залежить від концентрації заліза в околі . Як наслідок, , разом з і , можна використовувати для оцінки концентрації домішок в КСЕ.

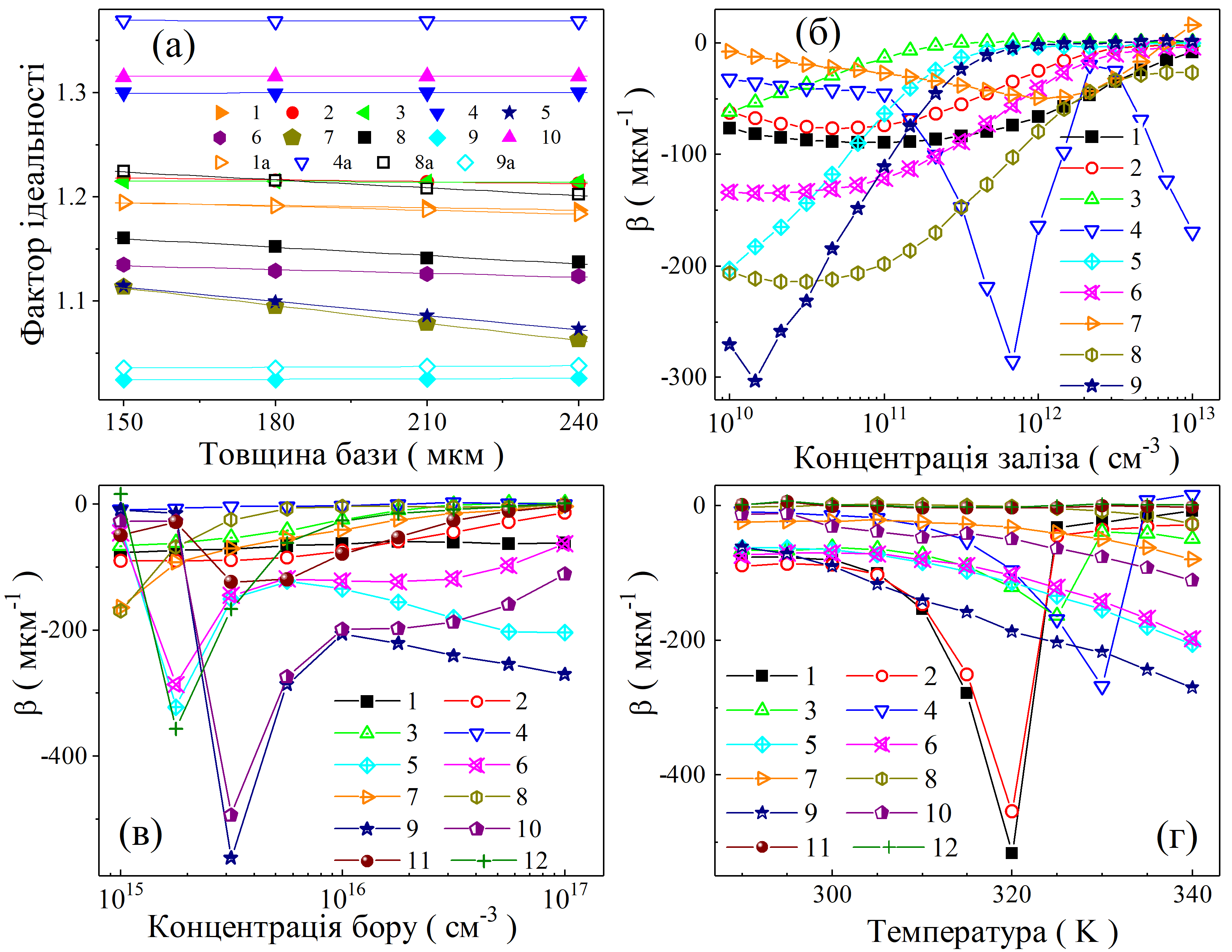


Рис. 3.6. (а) - Типові залежності фактора неідеальності від товщини бази. Сценарії: співіснування та (криві 1-6), неспарене міжвузольне (2a, 5a, 6a). T, K: 290 (1, 2, 2a), 320 (3), 340 (4-6, 5a, 6a); , : (4, 5, 5a), (3), (1, 2, 2a, 6, 6a); , : (1, 3, 6, 6a), 3.162 (4), (2, 2a, 5, 5a). Позначки - результати моделювання, лінії - криві, розраховані за рівнянням (3.2). (б) – коефіцієнт залежності від концентрації заліза. T, K: 290 (1, 2), 325 (3), 340 (4-6); , : (4), (1, 5), (2, 3, 6). (в) - коефіцієнт залежності від концентрації бору. T, K: 290 (1, 2), 325 (2-5), 340 (6); , : (3, 6), (1, 4), (5), (2). (г) - коефіцієнт залежності від температури. , : (1, 2), (3, 4), (5, 6). , : (3, 5), (2, 4, 6). На рисунках (б)-(г) представлені результати для випадку співіснування і

**3.2 Фотоелектричні параметри**

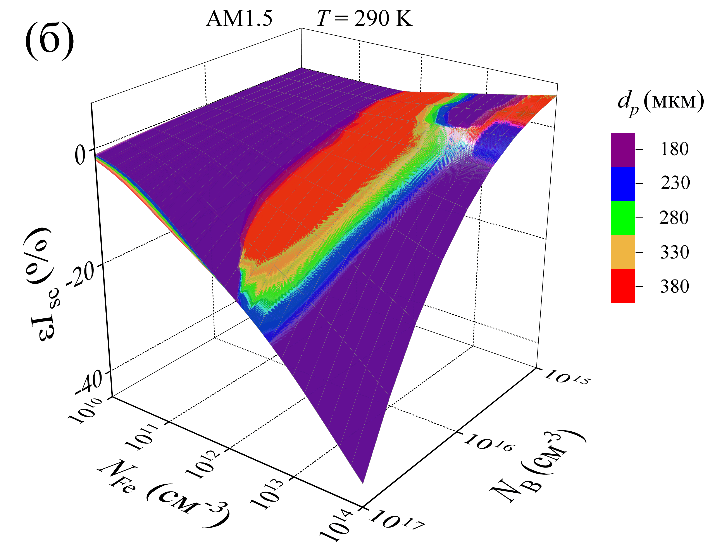
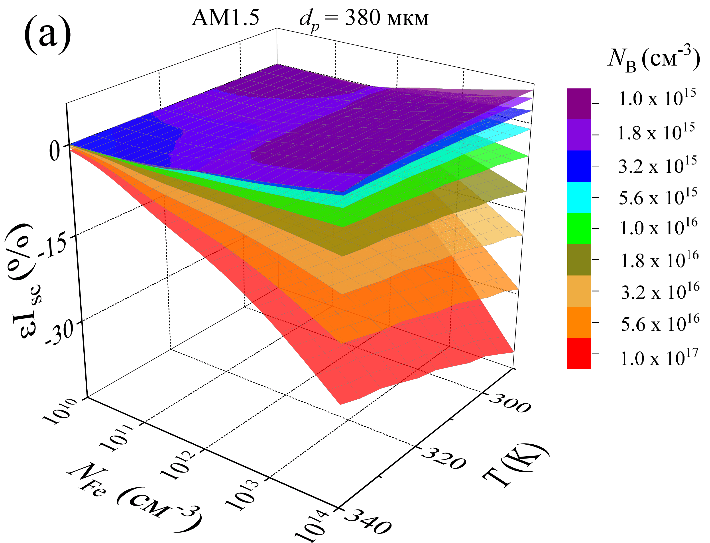
Попередній аналіз моделювання фактору неідеальності дозволив встановити кореляційні залежності між різними станами заліза та рекомбінаційними процесами у КСЕ. Водночас, для розробки ефективних методів неруйнівної діагностики необхідно розширити набір досліджуваних характеристик та проаналізувати доцільність використання струму короткого замикання , напруги розімкнутого кола , фактора форми та ефективності для оцінки концентрації заліза в КСЕ за допомогою ММН. Саме ці параметри безпосередньо визначають продуктивність сонячних елементів та широко застосовуються у промисловій діагностиці. Для цього дослідження використовувалася друга РМКСЕ.

**3.2.1** **Струм короткого замикання**

На рис.3.7 зображені характерні залежності змін струму короткого замикання, що виникають в результаті перебудови залізовмісних дефектів, та були отримані в результаті моделювання.

Важливо зазначити, що характер зміни струму короткого замикання залишається практично ідентичним як при сонячному, так і при монохроматичному освітленні, при цьому значення кількісно відрізняються: при 940 нм абсолютні значення приблизно в 3–4 рази більші, ніж ті, що спостерігаються при AM1.5, припускаючи, що інші параметри є постійними. Серед інших особливостей змін можна виділити наступні:

1) модуль монотонно зростає із збільшенням концентрації заліза, але знак залежить від рівня легування. При низьких концентраціях бору () , тоді як при високих концентраціях () — див. рис.3.7а, в;



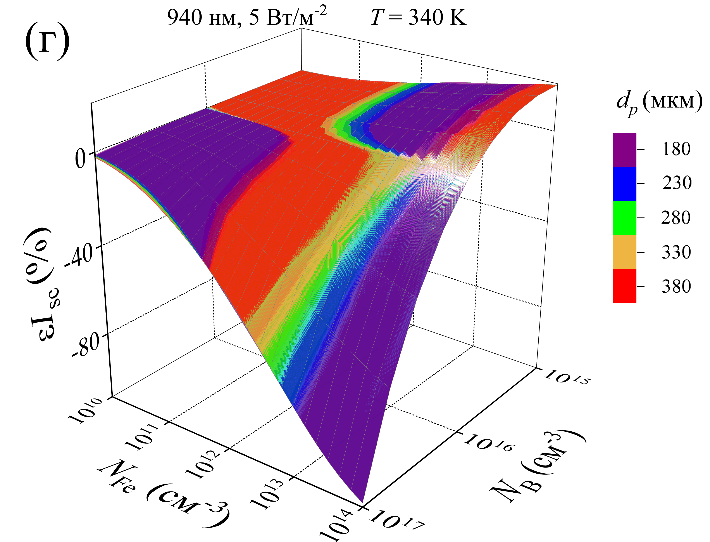
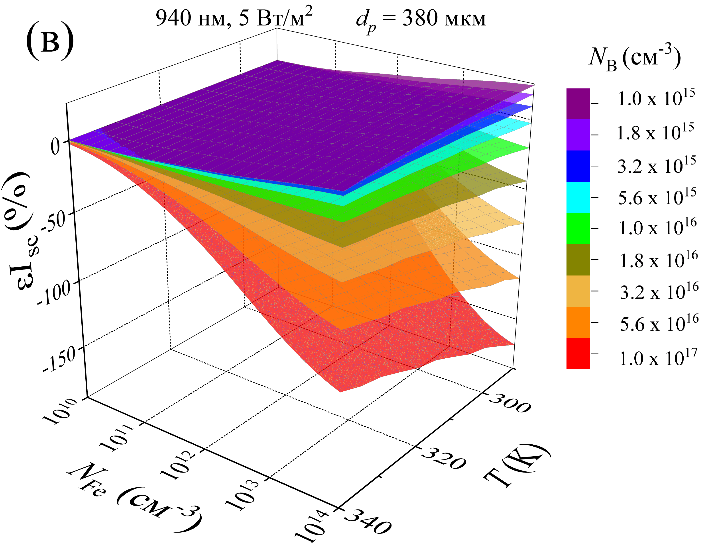


Рис. 3.7 Відносні зміни струму короткого замикання, спричинені повним розпадом пар , як функція концентрації заліза та температури (а та в) або рівня легування (б, г). Освітлення: AM1.5 (а, б), 940 нм [5 ] (в, г). 𝑇 , K: 290 (б), 340 (г). Різні поверхні відповідають різним рівням легування (а, в) та товщинам бази (б, г).

2) збільшення концентрації бору спричиняє монотонне зменшення (рис.3.7б, г); значення , при якому змінюється знак , залежить від температури (зменшується зі зменшенням 𝑇) та типу освітлення (як правило, є вищим у випадку монохроматичного освітлення);

3) у випадку, коли , підвищення температури призводить до зменшення абсолютної величини , причому залежність є майже лінійною, а нахил збільшується із підвищенням рівня легування та концентрації заліза (рис.3.7а, в). У випадку, коли , зміна 𝑇 призводить до незначних немонотонних коливань струму короткого замикання після дисоціації пар FeB;

4) вплив товщини бази ( на збільшується із збільшенням і зменшенням , але в цілому він є мінімальним. Як показали розрахунки, збільшення більш ніж вдвічі спричиняє зміни в , які не перевищують 0,5%;

5) зміна інтенсивності монохроматичного освітлення (від 5 до 10 ) практично не змінює значення ;

6) абсолютні значення можуть досягати відносно високих значень (більше 100 % для освітлення 940 нм); проте у випадках, коли і близько , зміни струму короткого замикання не перевищують декількох відсотків.

Виявлені особливості змін можна пояснити, розглянувши основні причини впливу факторів, що змінювалися під час моделювання, на фотоелектричне перетворення. Відомо [yang2019], що основний вплив металевих домішок на ефективність роботи сонячного елемента зумовлений їхнім впливом на ефективність збору носіїв (ЕЗ, частка надлишкових носіїв, які досягають області виснаження 𝑝–𝑛 переходу). Нехтуючи впливом послідовного та шунтуючого опорів, наш струм короткого замикання буде збігатися з фотострумом 𝐼ph, який дорівнює ЕЗ, помноженій на кількість надлишкових носіїв, збуджених світлом. У свою чергу, ЕЗ можна обчислити як згортку функції генерації, що пропорційна (де 𝛼 — коефіцієнт поглинання, а 𝑧 — координата вздовж осі, спрямованої перпендикулярно до 𝑝-𝑛 переходу від емітера), та ймовірності збору, яку можна отримати як розв'язок рівняння дифузії для гомогенного середовища. Фотострум для КСЕ тоді можна визначити як [A. McEvoy, T. Markvart, L. Castaner (Eds.), Solar Cells. Materials, Manufacture and Operation, second ed., Academic Press, Oxford, 2013]:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.3) |

де та фотоструми для емітера та бази, відповідно. Проте, враховуючи стани домішкового заліза, можна вважати, що під час перебудови перший доданок у правій частині рівняння 3.3 залишається незмінними і тому, враховуючи рівняння 2.16:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.4) |

В свою чергу, фотострум бази при монохроматичному освітленні може бути записаний у вигляді [Goetzberger1998]:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.5) |

де - потік фотонів; - коефіцієнт відбиття; - швидкість поверхневої рекомбінації; - довжина дифузії неосновних носіїв (електронів); - коефіцієнт дифузії електронів; - товщина бази квазінейтральної області, оскільки для модельованих структур область просторового заряду не перевищувала 1 мкм, то .

На рис.3.8 зображені зміни струму короткого замикання, як спостережувані в експериментальних дослідженнях, так і розраховані для структур з однаковими параметрами бази. Слід зазначити, що на рисунку наведені результати моделювання, отримані при різних рівнях освітлення, що підтверджує незалежність від .

Можна побачити, що теоретичні залежності від концентрації заліза та температури узгоджуються з експериментальними результатами. Для досягнення кількісної збіжності застосовувався поправочний коефіцієнт = 1,4: експериментально отримане значення слід замінити на — як показано на рис. 3.8. Ця методологія часто згадується в літературі [schubert2015] і пов'язана з виправленням систематичних помилок у моделюванні.

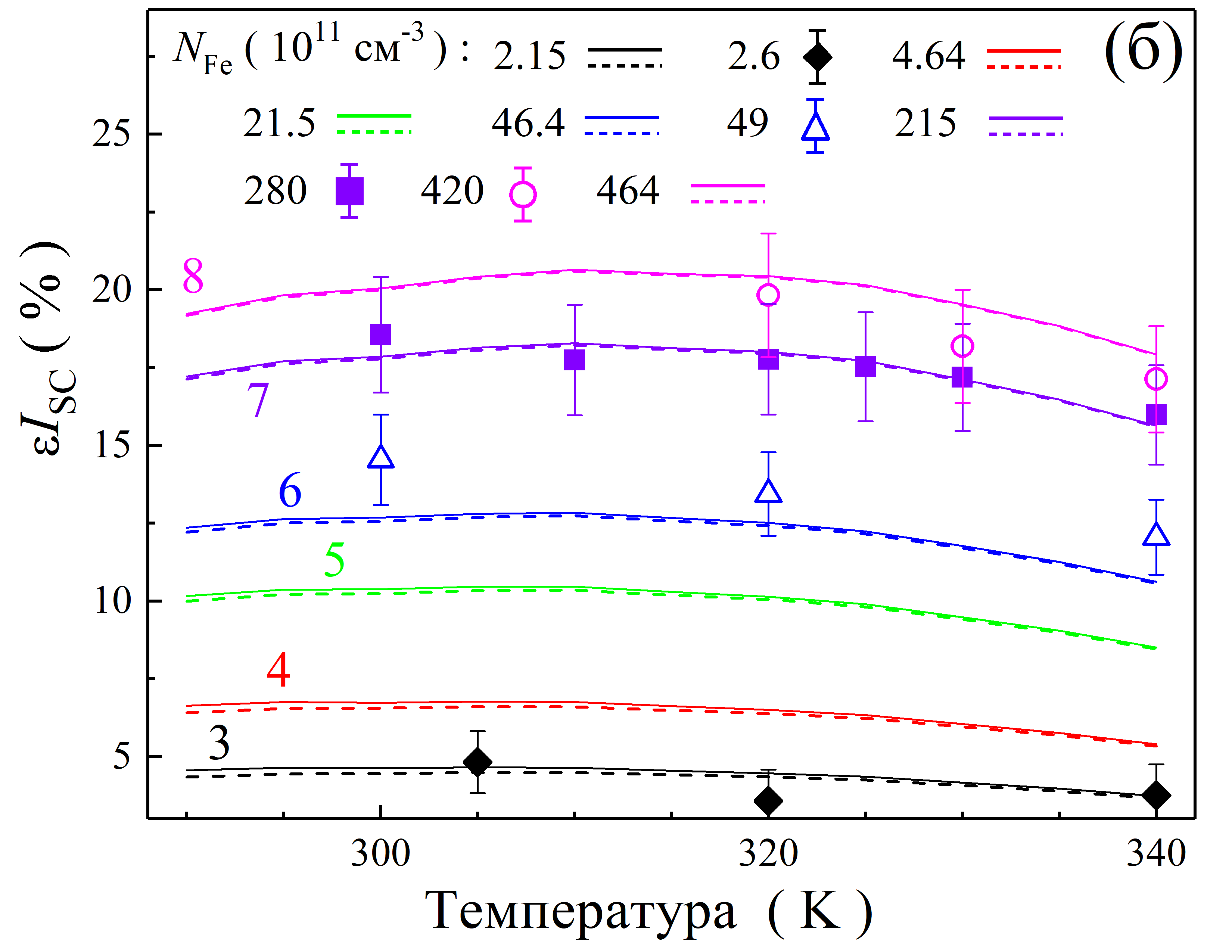
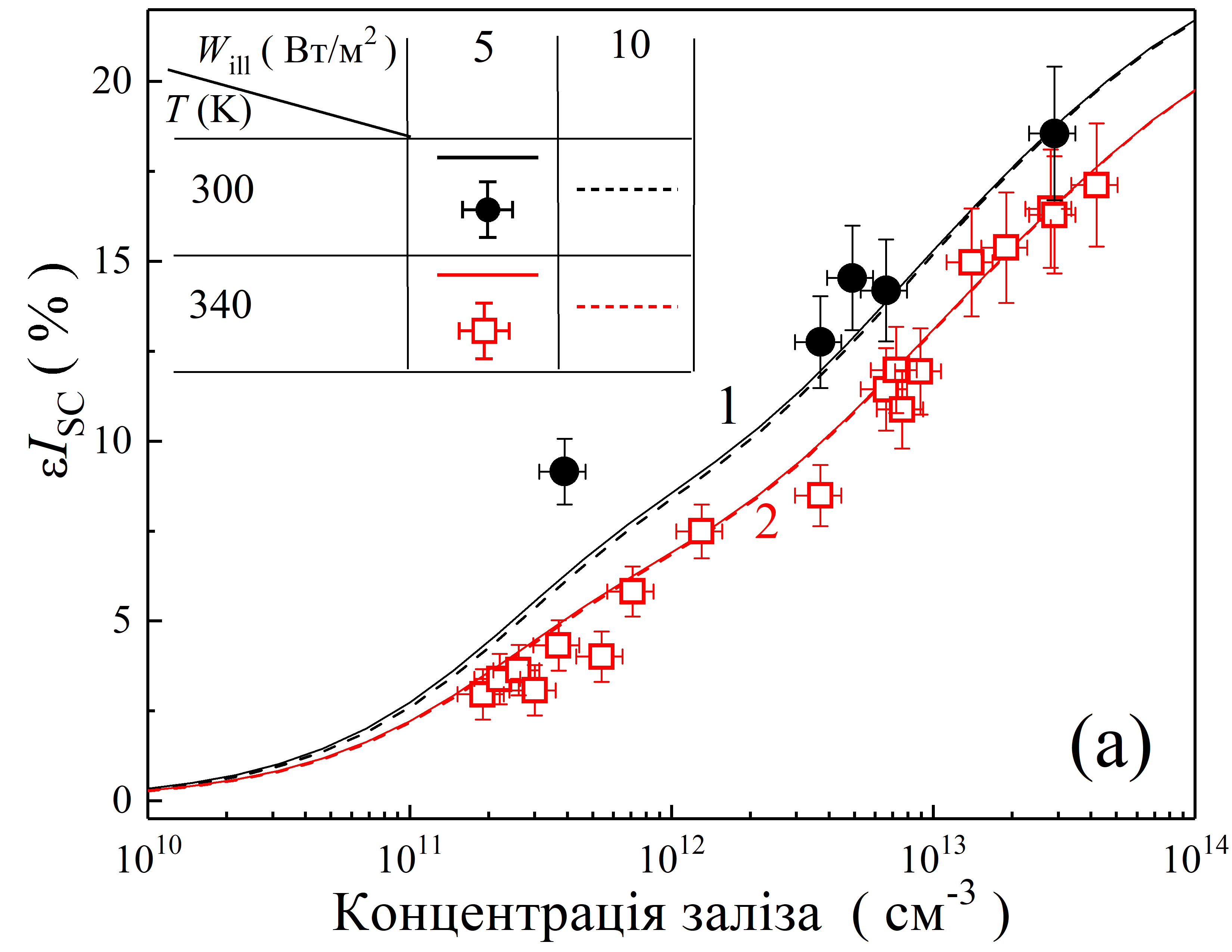
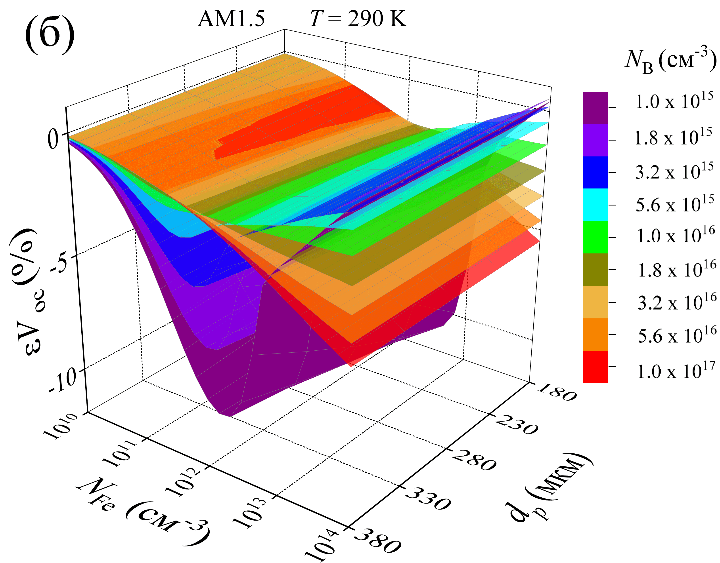


Рис. 3.8 Відносні зміни струму короткого замикання, спричинені повним розпадом пар , як функція концентрації заліза (а) і температури (б) для КСЕ з = 380 мкм і у випадку монохроматичного (940 нм) освітлення. Позначки — експериментальні результати (поділені на коефіцієнт 𝐶𝑐𝑜𝑟 = 1,4), лінії — результати моделювання. : 5 (суцільні лінії), 10 (пунктирні лінії). 𝑇 , К (а): 300 (1), 340 (2).

Загалом, результати показують, що відносні зміни струму короткого замикання після повного розпаду пар FeB можуть бути використані для оцінки концентрації заліза: монотонно залежить від , та може набувати великих значень. У цьому контексті оцінку концентрації заліза краще проводити за допомогою фотоелектричних параметрів, отриманих під монохроматичним освітленням, оскільки цей метод забезпечує більшу чутливість. Однак слід зазначити, що для низьких концентрацій заліза () і для сонячних елементів з концентрацією бору в базі цей підхід є неефективним.

**3.2.2** **Напруга розімкнутого кола**

На рис.3.9 представлені результати моделювання змін напруги розімкнутого кола внаслідок дисоціації пар FeB. Варто зазначити, що зміни значення майже на порядок менші за значення, спостережувані для .



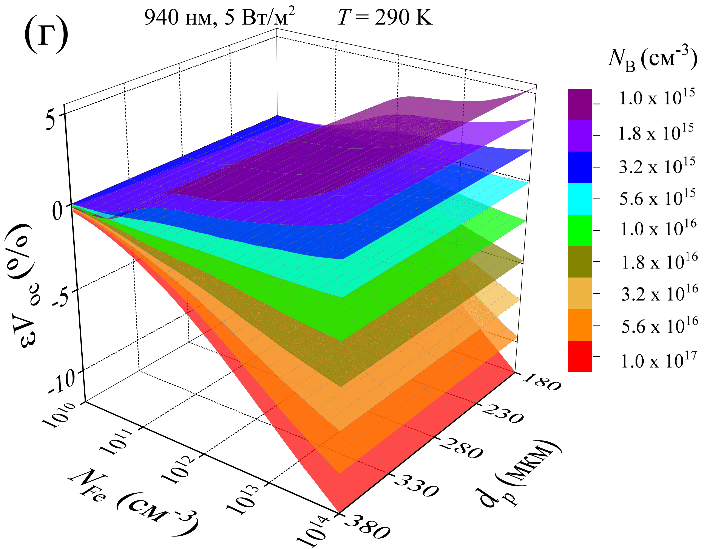


Рис 3.9 Відносні зміни напруги розімкнутого кола, спричинені повним розпадом пар , як функція концентрації заліза та рівня легування (а та в) або товщини бази (б, г). Освітлення: AM1.5 (а, б), 940 нм 10 (в), 940 нм 5 (г). 𝑇 , K: 290 (б, г). Різні поверхні відповідають різним температурам (а, в) та рівням легування (б, г).

Крім того, слід звернути увагу на відмінності в поведінці в залежності від концентрації заліза при низьких () рівнях легування бази у випадках монохроматичного та AM1.5 освітлень. Під сонячним освітленням значення є від'ємними, а залежність () є немонотонною (рис.3.9a,б). Крім того, товщина бази сильно впливає на концентрацію заліза, що корелює з мінімальним значенням (рис.3.9a). При монохроматичному освітленні значення є додатними і монотонно зростають із концентрацією заліза. Зі збільшенням концентрації бору поведінка () стає схожою, незалежно від типу освітлення: відносні зміни напруги розімкнутого кола під час відновлення дефектів, що містять залізо, є від'ємними і монотонно зростають в абсолютному значенні зі збільшенням як , так і . Крім того, зміни є більш значними при монохроматичному освітленні, подібно до випадку з .

Вплив температури на також залежить від рівня легування бази: зі збільшенням температурний коефіцієнт поступово змінюється з позитивного на негативний. Ця тенденція спостерігається як для освітлення AM1.5, так і для освітлення 940 нм, як показано на рис. 3.9a,б. Вплив на є більш значним, ніж для . Однак товщина бази не є визначальним фактором для ; вона впливає головним чином на низькі рівні легування та температури. Іншою відмінністю між поведінкою та є залежність від інтенсивності монохроматичного освітлення. При зміни є менш значними, причому різниця збільшується із зменшенням концентрації заліза та має слабку залежність від температури.

Для розуміння особливостей відносної зміни необхідно згадати, що напруга розімкнутого кола залежить не лише від фотоструму, але й від струму насичення та фактора неідеальності, які, в свою чергу, також визначаються як станом дефектної підсистеми, так і іншими параметрами, які варіювалися під час моделювання [Olikh2019SM, YangHandbookPVSi].

У випадку спрощеної однодіодної моделі визначається як:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.6) |

Подібно до фотоструму, можна представити як суму струмів для емітера і для бази [Markvart]:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.7) |

причому другий доданок може бути представлених у вигляді [Goetzberger1998]:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.8) |

де — власна концентрація носіїв. Рівняння 3.8 також пояснює спостережувану залежність від товщини бази.

Дані, представлені на рис. 3.10, порівнюють результати експерименту та моделювання. Загалом, результати в обох випадках є якісно узгодженими. Однак, щоб забезпечити узгодженість абсолютних значень, необхідно використовувати поправочний коефіцієнт, що залежить від концентрації заліза. Згідно з даними, для низьких значень і для високих значень .

Підсумовуючи, використання відносних змін напруги розімкнутого кола, спричинених дисоціацією пар FeB, є менш зручним для оцінки концентрації заліза порівняно з . Це пов'язано з меншими абсолютними значеннями , немонотонною залежністю від за певних умов та необхідністю точного контролю інтенсивності монохроматичного освітлення. Однак використання як додаткового параметра поряд з може значно підвищити точність оцінки концентрації заліза для і при освітленні AM1.5.

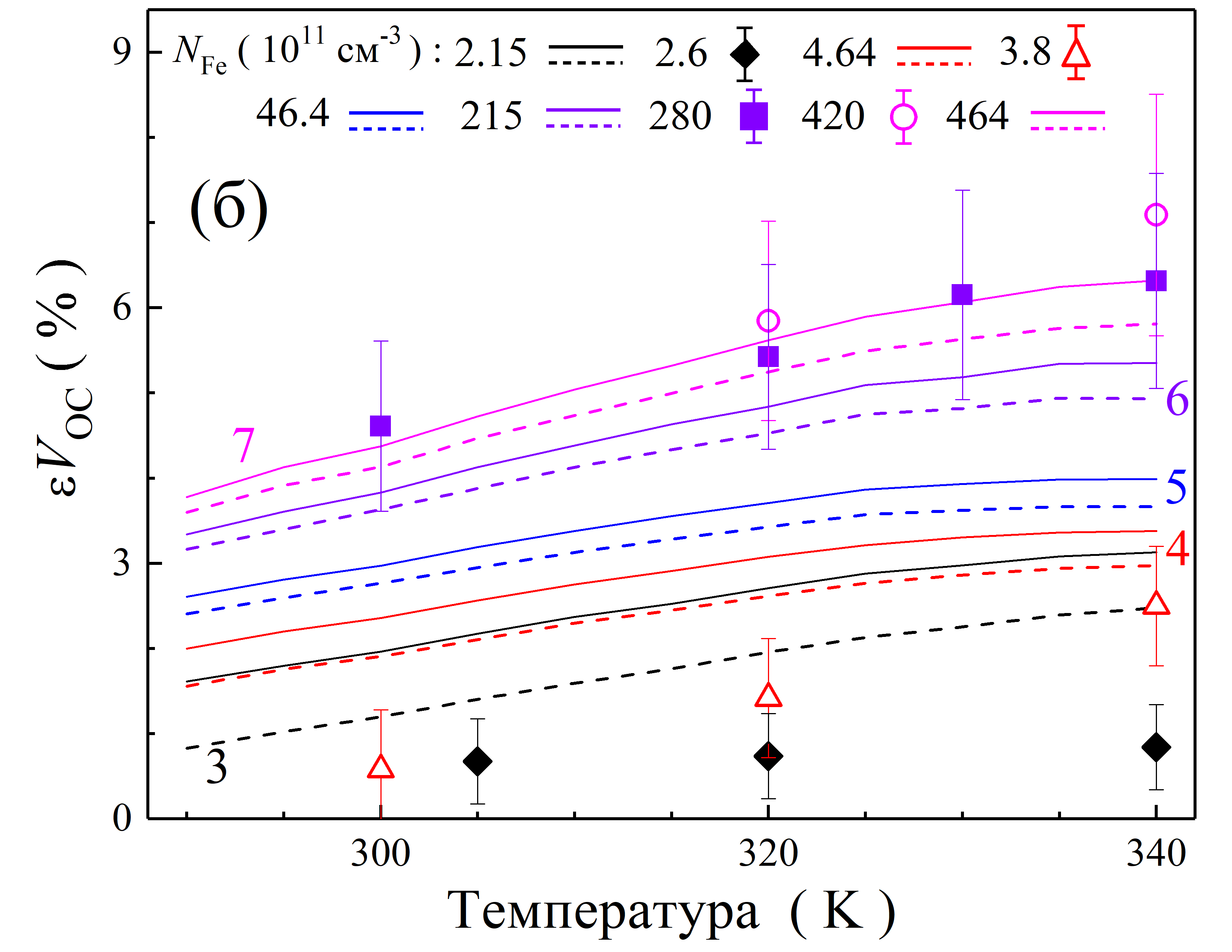
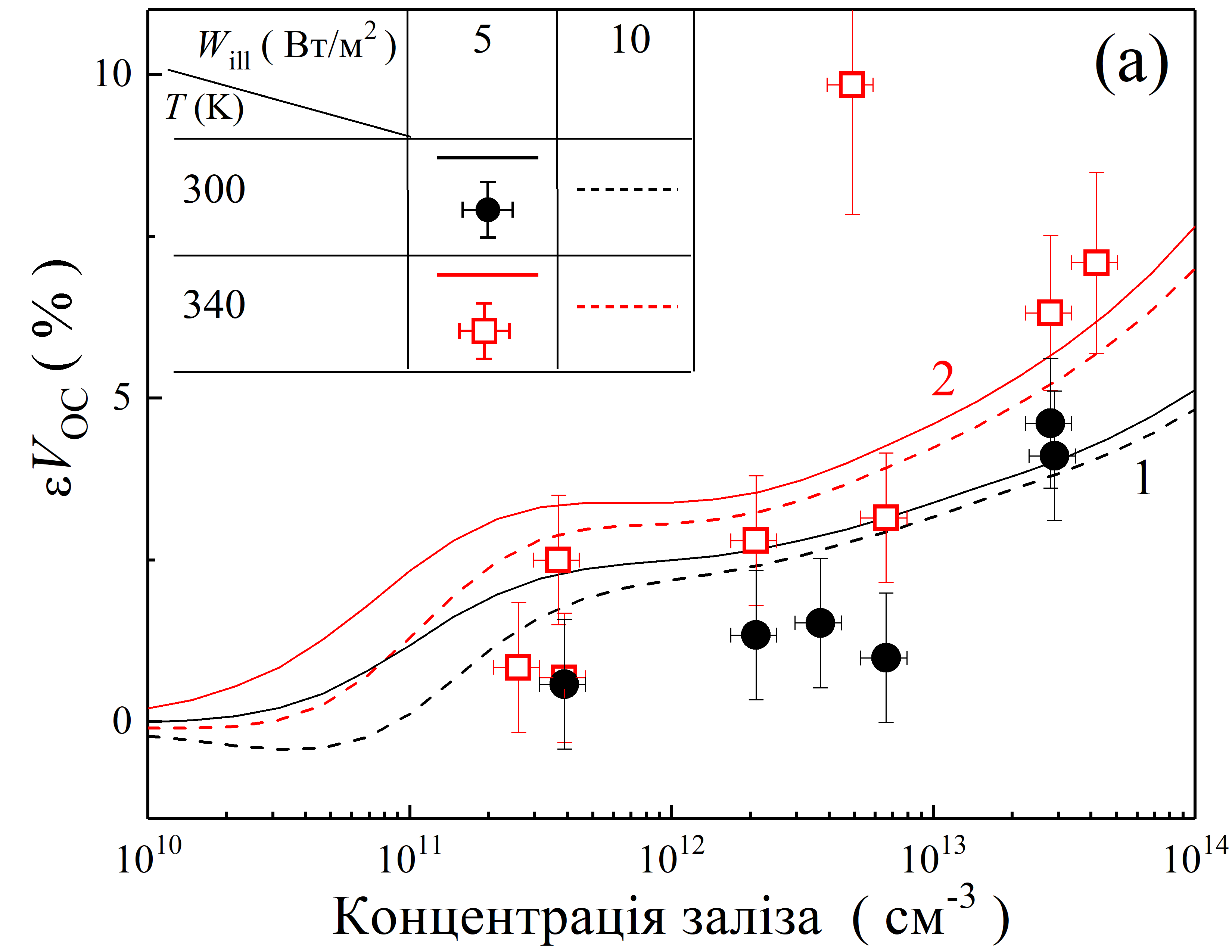
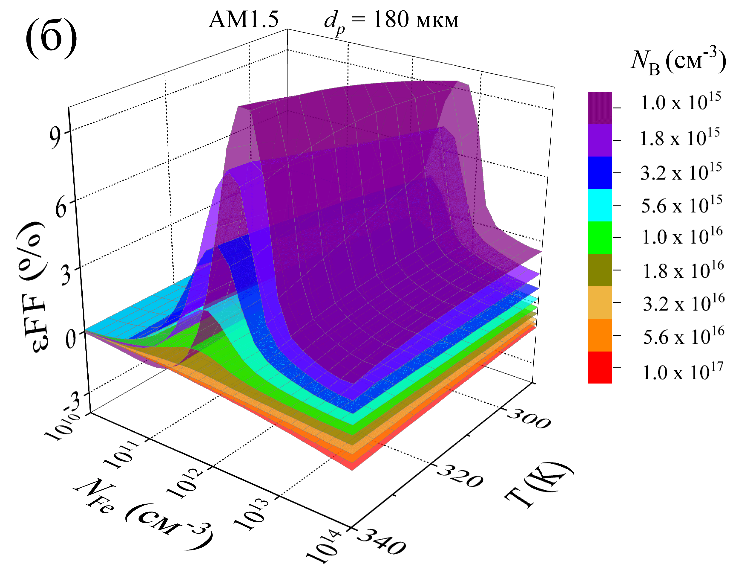
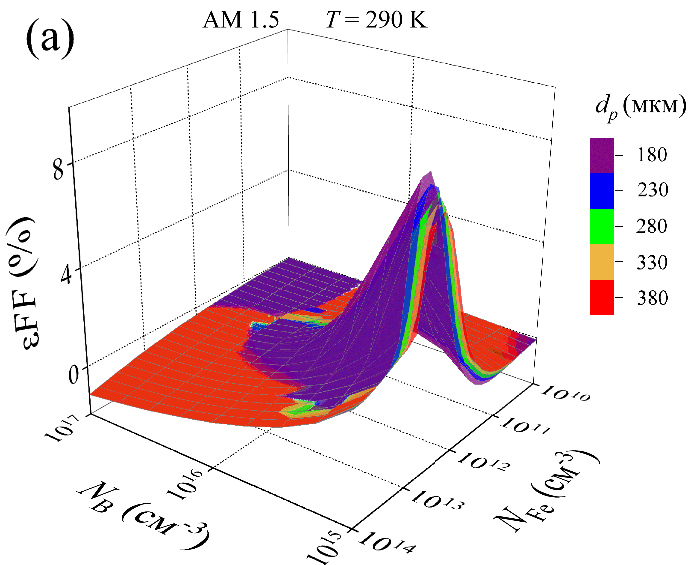
****

Рис. 3.10 Відносні зміни напруги розімкнутого кола, спричинені повним розпадом пар , як функція концентрації заліза (а) і температури (б) для КСЕ з = 380 мкм і у випадку монохроматичного (940 нм) освітлення. Позначки – експериментальні результати, лінії – результати моделювання. : 5 (суцільні лінії), 10 (пунктирні лінії). 𝑇 , К (а): 300 (1), 340 (2).

**3.2.3** **Фактор форми**

Фактор форми є ще одним визначальним параметром загальної ефективності сонячного елемента. Зміни фактору форми є найменшими серед розглянутих параметрів фотоелектричного перетворення, при цьому максимальні значення 𝜀𝐹𝐹 не перевищують 10% (рис.3.11).

При низьких концентраціях бору () залежність 𝜀𝐹𝐹 від є нелінійною. У межах діапазону концентрацій заліза спостерігаються дві області зменшення і дві області збільшення 𝜀𝐹𝐹.



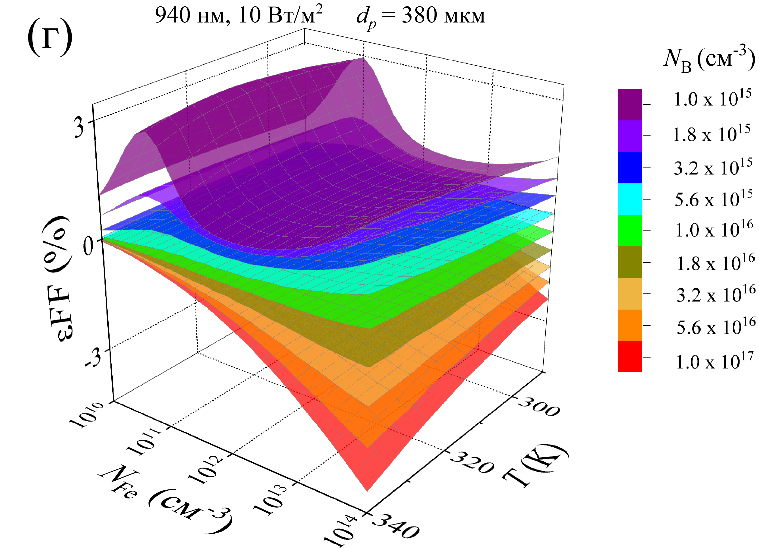
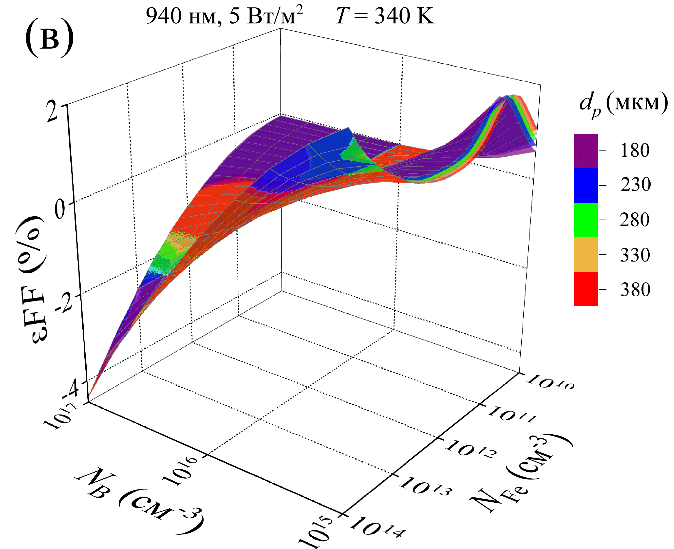


Рис. 3.11 Відносні зміни фактора форми, спричинені повним розпадом пар , як функція концентрації заліза та рівня легування (а та в) або температури (б, г). Освітлення: AM1.5 (а, б), 940 нм 5 (в), 940 нм 10 (г). 𝑇 , K: 290 (а), 340 (в). , мкм: 180 (б), 380 (г). Різні поверхні відповідають різній товщині бази (а, в) та рівням легування (б, г).

При низьких концентраціях бору 𝜀𝐹𝐹 > 0 і, на відміну від та , при освітленні AM1.5 спостерігаються більш значні зміни в 𝜀𝐹𝐹, ніж при монохроматичному освітленні. При високих концентраціях бору 𝜀𝐹𝐹 < 0 і не перевищує 4%. Абсолютне значення 𝜀𝐹𝐹 збільшується, незалежно від знаку, з підвищенням температури. Збільшення товщини бази призводить до зменшення 𝜀𝐹𝐹. Крім того, це призводить до зміщення залежності 𝜀𝐹𝐹() у бік менших концентрацій заліза. Вплив є більш помітним при низьких концентраціях бору та у випадку освітлення AM1.5. У випадку монохроматичного освітлення інтенсивність світла сильно впливає на 𝜀𝐹𝐹 (𝜀𝐹𝐹 може змінюватися в 2 рази, коли змінюється від 5 до 10 ).

На рис.3.12 зображена чудова узгодженість експериментальних залежностей 𝜀𝐹𝐹() та 𝜀𝐹𝐹(𝑇) з розрахунковими значеннями.

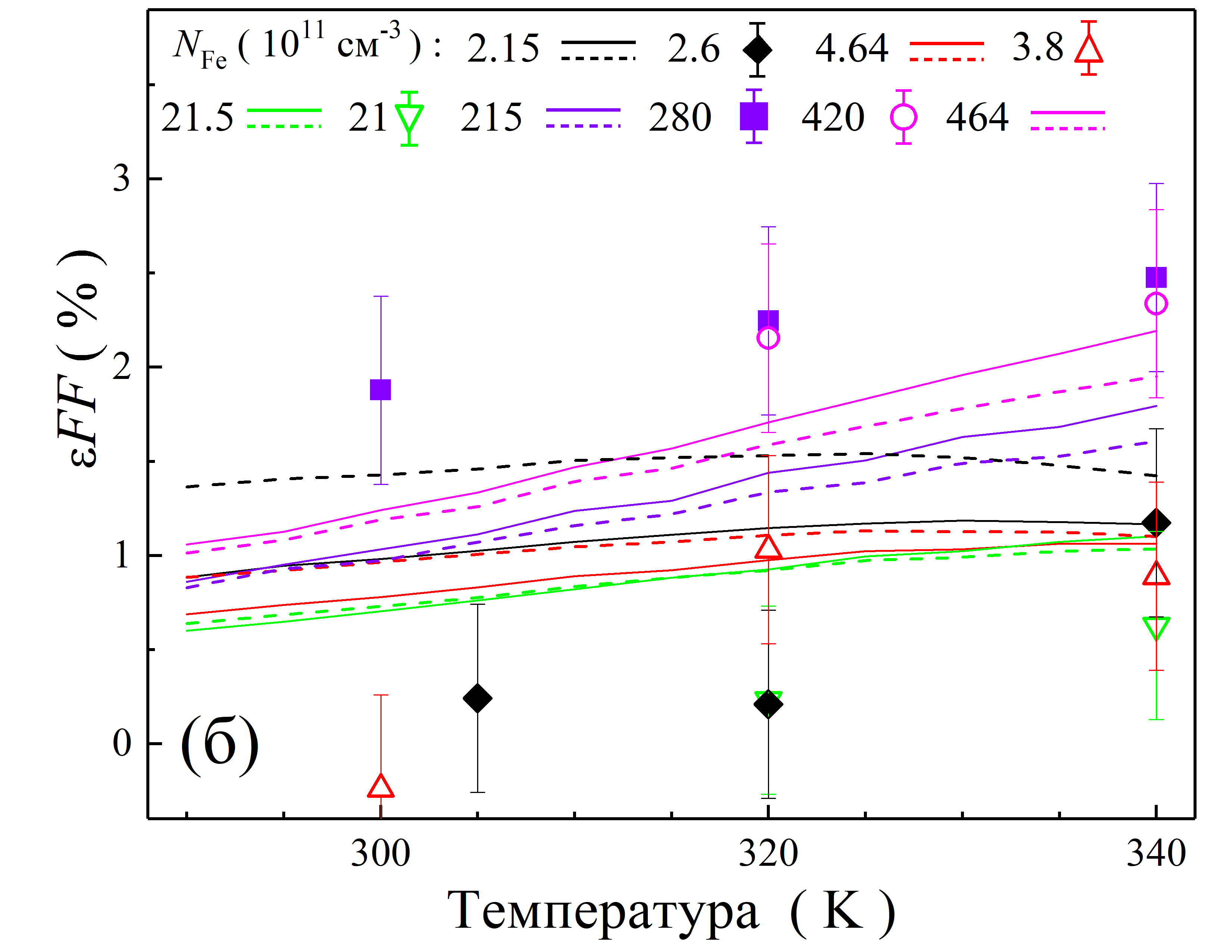
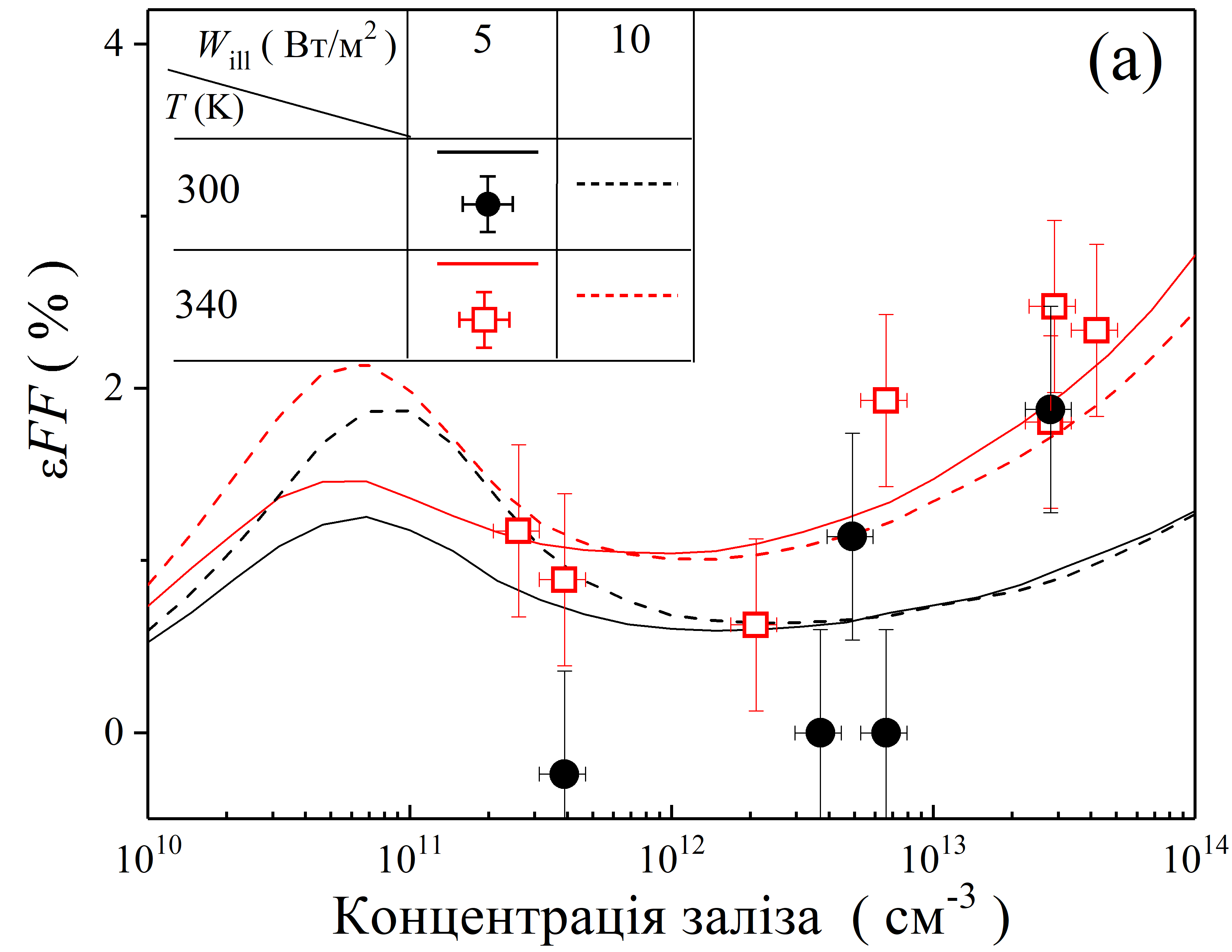
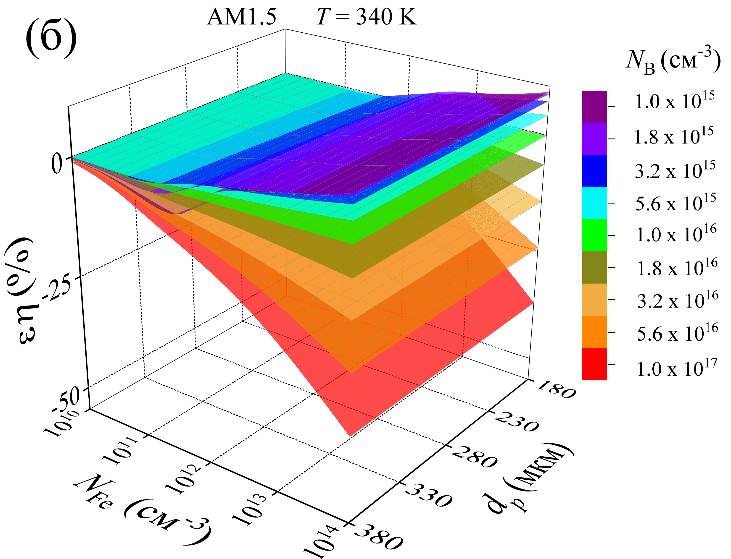
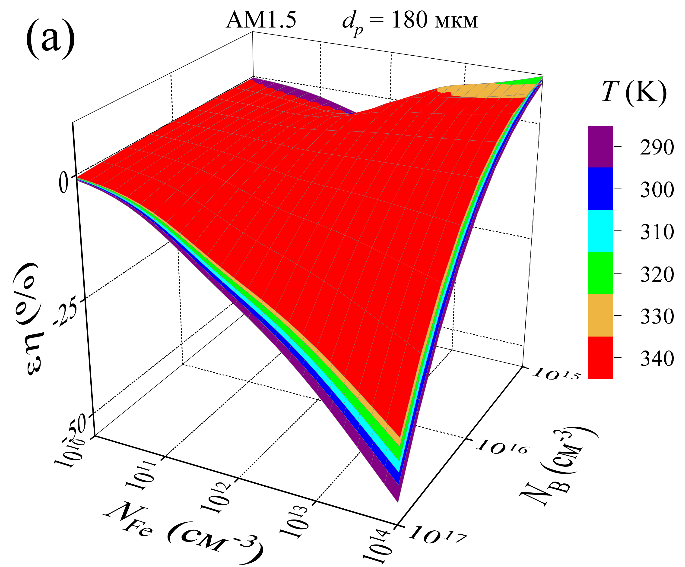
****

Рис. 3.12 Відносні зміни фактора форми, спричинені повним розпадом пар , як функція концентрації заліза (а) і температури (б) для КСЕ з = 380 мкм і у випадку монохроматичного (940 нм) освітлення. Позначки — експериментальні результати, лінії — результати моделювання. : 5 (суцільні лінії), 10 (пунктирні лінії).

На нашу думку, кількісна збіжність обмежена відносно низькою точністю вимірювань 𝜀𝐹𝐹 та залежністю фактора форми від послідовних та шунтуючих опорів, які не були враховані в моделюванні. Спостережувані характеристики 𝜀𝐹𝐹 свідчать про те, що фактор форми значно менш придатний для оцінки концентрації заліза, ніж та . 𝜀𝐹𝐹 може бути лише допоміжним параметром для оцінки .

**3.2.4** **Ефективність**

На рис.3.13 зображені результати моделювання ефективності сонячних елементів. Дані свідчать про те, що основні особливості залежності 𝜀𝜂 від параметрів сонячних елементів і температури збігаються з тими, що спостерігаються для .



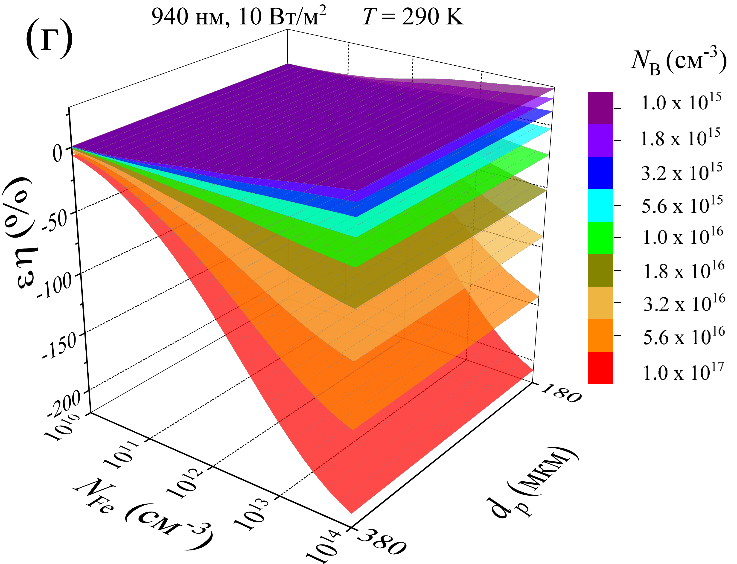
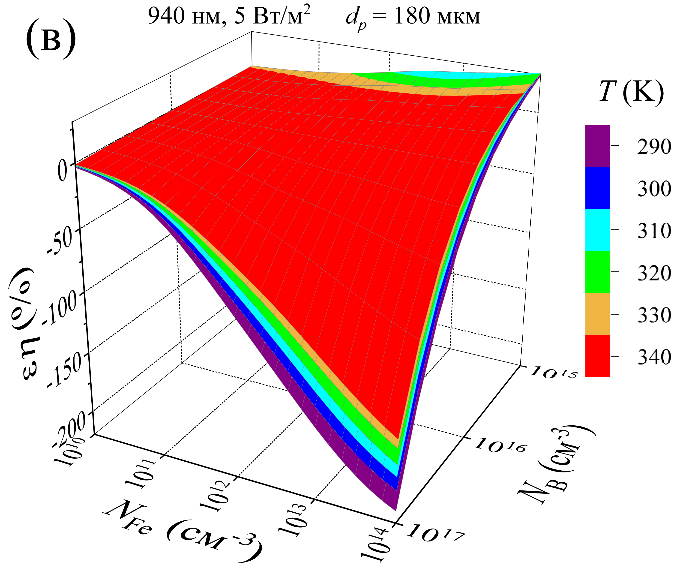


Рис. 3.13 Відносні зміни ефективності КСЕ, спричинені повним розпадом пар , як функція концентрації заліза та рівня легування (а та в) або товщини бази (б, г). Освітлення: AM1.5 (а, б), 940 нм 5 (в), 940 нм 10 (г). 𝑇 , K: 290 (г), 340 (б). , мкм: 180 (а, в). Різні поверхні відповідають різним температурам (а, в) та рівням легування (б, г).

Однак є і відмінності між ними: 1) амплітуда 𝜀𝜂 збільшується, досягаючи 50% для AM1.5 і 200% для 940 нм; ці результати роблять ефективність КСЕ корисним параметром для оцінки концентрації заліза; 2) для AM1.5, в області , спостерігається немонотонна залежність 𝜀𝜂(), що унеможливлює використання 𝜀𝜂 як єдиного параметра для ; 3) існуюча залежність 𝜀𝜂 від інтенсивності монохроматичного освітлення є слабкою, що не заважає використовувати 𝜀𝜂 для визначення , навіть при не дуже точних вимірюваннях ; 4) температурна залежність 𝜀𝜂 є слабшою, ніж температурна залежність .

На рис.3.14 представлені експериментальні та змодельовані значення 𝜀𝜂 КСЕ. При цьому було застосовано той самий коефіцієнт корекції, = 1,4, що і в випадку . Результати узгоджуються, що вказує на те, що типові для і 𝐹𝐹 неточності не мають істотного впливу. Виявлені характеристики 𝜀𝜂 вказують на те, що цей фотоелектричний параметр повністю підходить для оцінки .

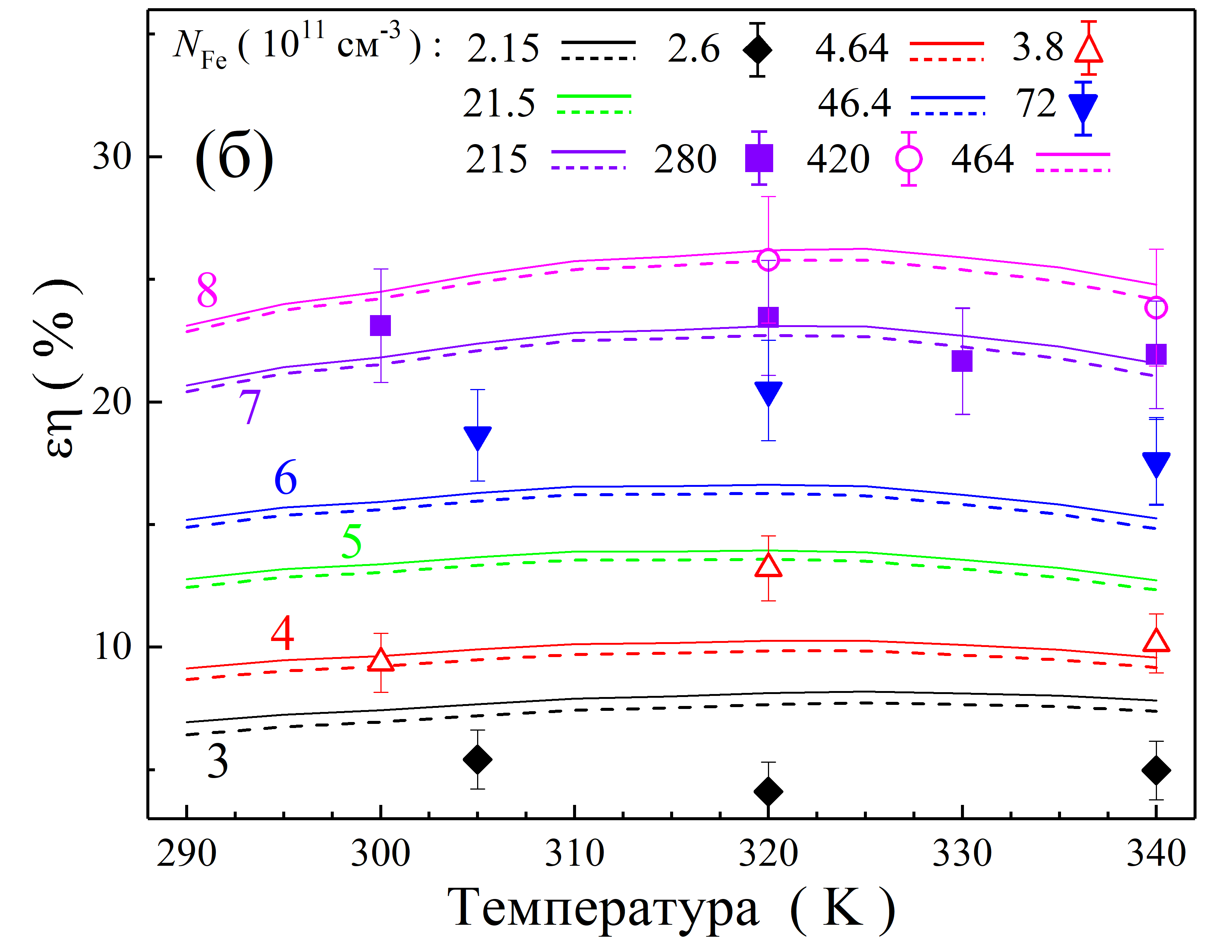
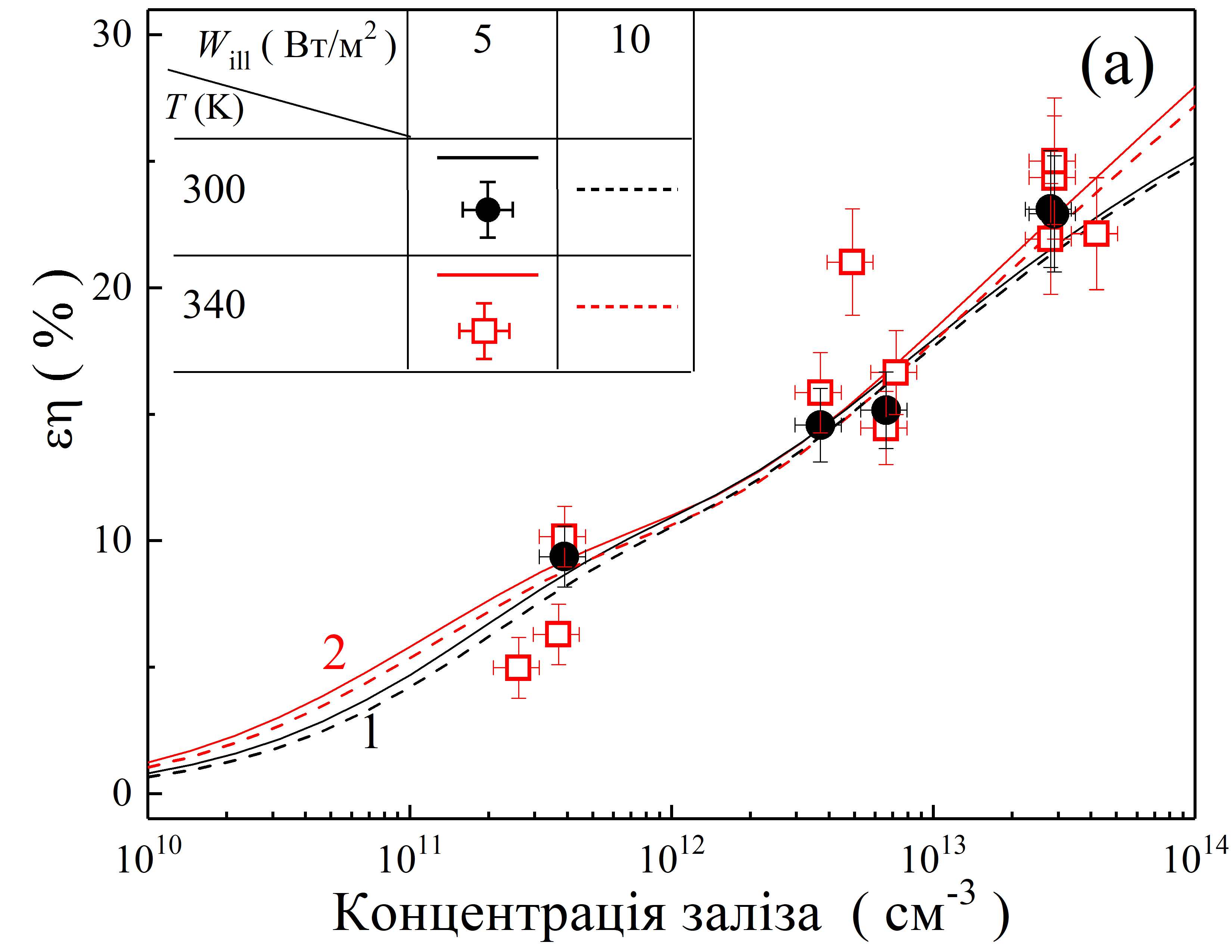


Рис. 3.14 Відносні зміни ефективності КСЕ, спричинені повним розпадом пар , як функція концентрації заліза (а) і температури (б) для КСЕ з = 380 мкм і у випадку монохроматичного (940 нм) освітлення. Позначки — експериментальні результати (поділені на коефіцієнт = 1.4), лінії — результати моделювання. : 5 (позначки та суцільні лінії), 10 (пунктирні лінії). 𝑇 , K (панель a): 300 (1), 340 (2).

**3.2.5 Кореляція між відносними змінами фотоелектричних параметрів та характеристиками сонячних елементів**

До цього моменту аналізувалося як від вмісту заліза залежить той чи інший параметр КСЕ, але тепер спробуємо розв’язати обернену задачу: оцінити величину за параметрами фотоелектричного перетворення та характеристиками самого КСЕ. Така оцінка може здійснюватися із застосуванням алгоритмів машинного навчання. Для навчання таких алгоритмів, виходячи з пункту 3.2.1 можемо використовувати набір параметрів (𝑇, , , ). Очевидно, що включення додаткової інформації, такої як, наприклад, 𝜀𝜂, разом з розширеним набором дескрипторів (𝑇 , , , , 𝜀𝜂), збільшує складність розрахунків через зростання кількості вхідних параметрів. Однак водночас це повинно підвищити точність прогнозів . Порівнюючи рис.3.7 і рис.3.13, стає зрозуміло, що і 𝜀𝜂 не є повністю незалежними, оскільки та 𝜂 характеризують один і той самий фізичний процес — дифузію фотоіндукованих носіїв. Таким чином, набір (𝑇 , , , , 𝜀𝜂) містить корисну та надлишкову інформацію порівняно з (𝑇, , , ).

Аналіз їх кореляцій може допомогти оцінити незалежність параметрів. На рис.3.15 представлені коефіцієнти кореляції Пірсона, розраховані для всіх наборів параметрів за формулою:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3.9) |

де та – відповідають значенням двох параметрів з вибірки {} для і-тої конфігурації КСЕ, та – їх середні значення, а – це загальна кількість конфігурацій КСЕ.

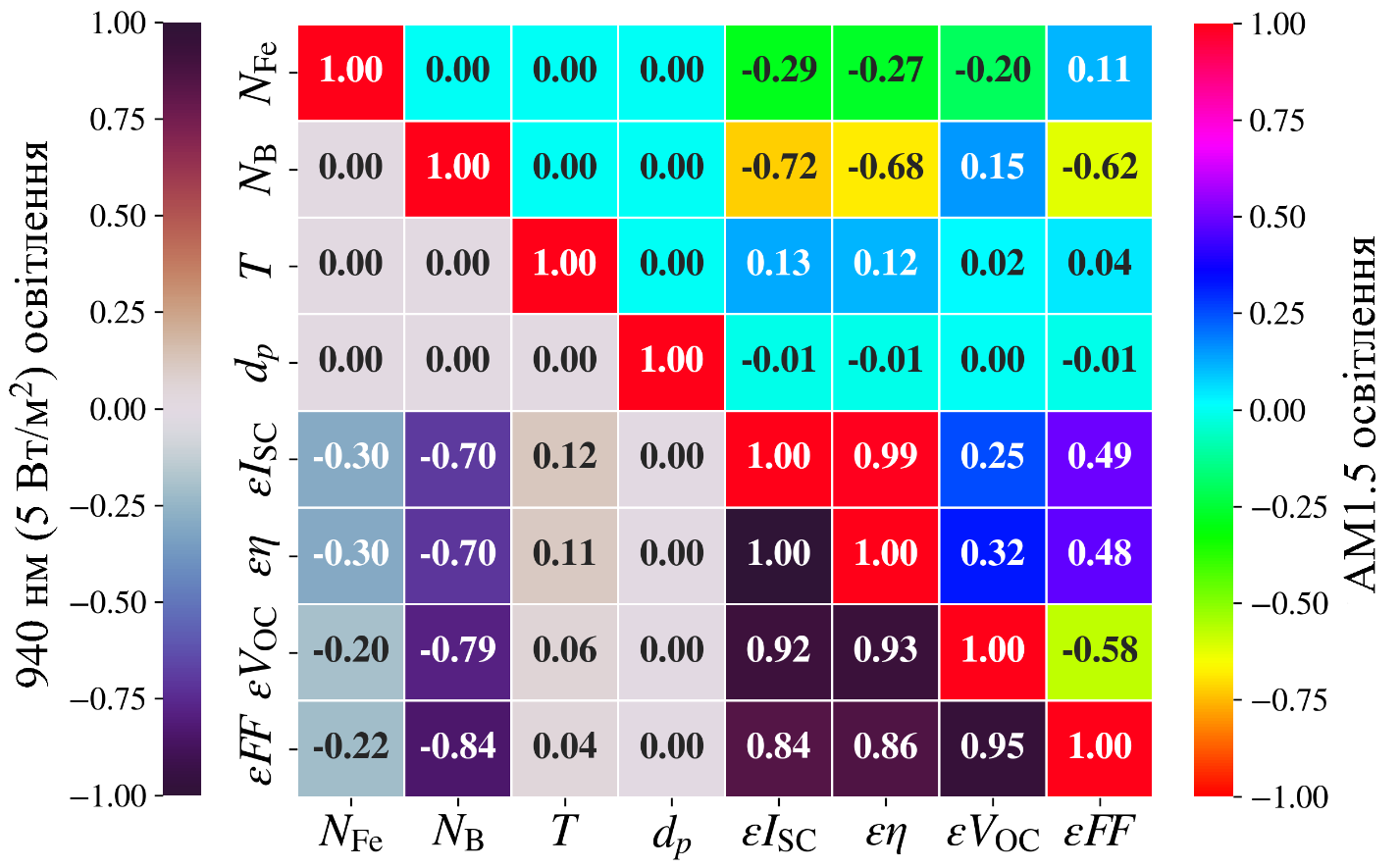


Рис. 3.15 Кореляційний графік параметрів фотоелектричного перетворення та характеристик сонячних елементів

Крім того, на рис.3.15 наведена кореляція між концентрацією заліза та кожним вхідним параметром. В розрахунках використовувалися значення та в логарифмічному масштабі.

По-перше, варто зазначити, що використання будь-якого параметра ізольовано від інших не є доцільним для точної оцінки . Щодо параметрів, пов'язаних з фотоелектричним перетворенням енергії, то всі вони сильно корелюють з рівнем легування бази, за винятком напруги розімкнутого кола при освітленні AM1.5. Крім того, вони суттєво корелюють між собою, що особливо помітно при використанні монохроматичного освітлення, тобто доповнення набору параметрів відносними змінами додаткових фотоелектричних параметрів призводить до значної надлишковості вхідних даних.

Було виявлено, що відносні зміни фотоелектричних параметрів не є повністю незалежними, особливо при монохроматичному освітленні (див. рис. Fig.S1 в додаткових матеріалах). Це не дивно, оскільки кожен з параметрів пов'язаний з дифузією та рекомбінацією фотоіндукованих носіїв заряду. Крім того, , , та демоснтрують сильну кореляцію з концентрацією бору. визначає положення рівня Фермі, що, в свою чергу, суттєво впливає на інтенсивність процесів рекомбінації в рамках наближення ШРХ. Це є фізичною основою для спостережуваної кореляції.

Для оцінки ступеня надлишковості інформації в різних наборах параметрів застосовувався аналіз головних компонент (АГК). АГК використовує лінійну комбінацію вихідних змінних для побудови нових змінних (головних компонент, ГК), зберігаючи при цьому максимальну пояснювальну дисперсію. ГК є некорельованими, і АГК дозволяє оцінити внесок кожної ГК в загальну пояснювальну дисперсію. У випадку, коли певна ГК має частку пояснювальної дисперсії, її можна відкинути з невеликою втратою корисної інформації або взагалі без неї. (𝑇 , , , , 𝜀𝜂)

ГК були побудовані для різних комбінацій фотоелектричних параметрів та характеристик сонячних елементів для повного набору змодельованих даних, а результати наведені в таблиці 3.1.

Табл. 3.1 Результати АГК для наборів змінних для оцінки в КСЕ. Числа представляють частку пояснювальної дисперсії, пов'язаної з кожним ГК, при використанні освітлення AM1.5 / 940 нм

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Набір дескрипторів | частка поясненої дисперсії (%) | | | | | | |
| ГК0 | ГК1 | ГК2 | ГК3 | ГК4 | ГК5 | ГК6 |
| (𝑇 , , , ) | 43.23/  42.80 | 25.00/  25.00 | 25.00/  25.00 | 6.7/  7.2 | - | - | - |
| (𝑇 , , , , 𝜀𝜂) | 52.39/  52.46 | 20.00/  20.00 | 20.00/  20.00 | 7.48/  7.51 | 0.13/  0.03 | - | - |
| (𝑇 , , , , 𝜀𝜂, ) | 44.40/  59.02 | 18.78/  16.73 | 16.67/  16.67 | 16.46/  6.28 | 3.61/  1.29 | 0.08/  0.01 | - |
| (𝑇 , , , , 𝜀𝜂, , 𝜀𝐹𝐹) | 43.29/  63.24 | 22.59/  14.41 | 14.29/  14.29 | 14.19/  5.65 | 4.29/  1.95 | 1.35/  0.46 | 0.002/  0.01 |

Як можна бачити, коли розглядається лише набір (𝑇 , , , ) надлишкова інформація відсутня (всі чотири ГК демонструють високий відсоток пояснювальної дисперсії). І навпаки, при оцінці за повним набором (𝑇 , , , , 𝜀𝜂, , 𝜀𝐹𝐹), що був отриманий при при монохроматичному освітленні, на п'ять ГК припадає понад 99.5% дисперсії вхідних даних. Таким чином, застосування АГК для перетворення 7 вхідних змінних і використання лише 5 є цілком виправданим, оскільки це значно спрощує розрахунки з мінімальним впливом на точність оцінки . Для того ж набору параметрів, отриманого при освітленні AM1.5, кількість незалежних змінних вже буде становити - 6. Загалом, якщо оцінка концентрації заліза ґрунтується на зміні кількох фотоелектричних параметрів, доцільно застосувати АГК для перетворення вихідних даних. Так, одночасне використання 𝜀𝜂 і практично не змінює кількість незалежних змінних (4) порівняно з початковим набором дескрипторів.

**Висновки до розділу 3**

1. Показано, що фактор неідеальності в структурах із залізовмісними дефектами визначається не лише концентрацією домішки, а й її електричним станом та просторовим розподілом. Основний внесок у рекомбінаційні процеси в ОПЗ вносить іонізоване міжвузольне залізо, а залежності фактора неідеальності від температури та рівня легування зумовлені ймовірністю заповнення рівня дірками. Зі зростанням концентрації заліза спостерігається майже лінійне зростання фактора неідеальності, окрім випадків, коли рівень повністю заповнений електронами — тоді домінує власна рекомбінація, а фактор неідеальності різко зменшується.

2. Товщина бази впливає на значення фактора неідеальності у випадку, коли довжина дифузії електронів . Фактор неідеальності зменшується коли стає більшою за відстань, яку можуть пройти неосновні носії заряду до того, як вони зрекомбінують, тобто на значення впливають процеси, що відбуваються і в квазінейтральній області. У випадку рівноважного стану, коли співіснують пари та неспарені атоми , фактор неідеальності може бути вищим, ніж у випадку, коли є лише окремі , а зміна цього параметра після дисоціації пар може бути використана для оцінки концентрації забруднення залізом в КСЕ.

3. Моделювання та експериментальні дослідження показали, що зміни стану залізовмісних дефектів у КСЕ можуть суттєво впливати на основні фотоелектричні параметри: , , *FF* та . Найбільш чутливим до змін концентрації заліза є , особливо при використанні монохроматичного освітлення. Встановлено, що відносна зміна струму короткого замикання монотонно зростає з підвищенням концентрації заліза, а її знак та величина залежать від рівня легування бором.

4. На основі аналізу встановлено, що та можуть використовуватися як додаткові діагностичні параметри для оцінки забруднення залізом КСЕ, але їхня інформативність обмежується при низьких рівнях легування бором  через немонотонний характер змін при збільшенні . Результати свідчать про те, що потенційна точність оцінки концентрації заліза залежить від рівня легування бази КСЕ: при концентрації бору  точність оцінки є мінімальною, тоді як зменшення або збільшення збільшує вплив на . Вплив товщини бази на фотоелектричні параметри є незначним у порівнянні з впливом концентрації легування та температури.

5. Відносні зміни фотоелектричних параметрів корелюють між собою – це дозволяє використовувати підхід АГК, який зменшує кількість змінних, зберігаючи при цьому максимальну пояснювальну дисперсію та прискорюючи обчислення. Для оцінки за допомогою змін фотоелектричних параметрів доцільно використовувати набір (𝑇, , , ,) або набір (𝑇, , , ,, ).

Основні результати даного розділу представленні в роботах [JournalofPhysicalStudies\_2020\_Q4], [MatScienceandEngineeringB\_2025\_Q2], [eISPCS\_2020\_Lviv], [USCPS\_2023\_Uzhgorod]. Додаткові матеріали до цього розділу, що включають додаткові залежності відносних змін фотоелектричних параметрів можна знайти за посиланням [https://github.com/Zavhorodnii-Oleksii/supplementary\_materials\_for\_thesis/blob/main/Додаткові%20матеріали%20до%20Розділу%203.pdf] .