

1 МОДЕЛЮВАННЯ ВОЛЬТ-АМПЕРНИХ ХАРАКТЕРИСТИК КРЕМНІЄВИХ $n^+p\text{-}p^+$ СТРУКТУР

1.1 Основні характеристики розрахункової моделі кремнієвої $n^+p\text{-}p^+$ структури

У роботі проведено моделювання вольт-амперних характеристик кремнієвих $n^+p\text{-}p^+$ структур, які є типовими для промислових сонячних елементів. Розглянуто вплив товщини бази, температури, концентрацій легата та неконтрольованої домішки (заліза) на ВАХ. Так як отримані результати планується використати для навчання штучної нейронної мережі, яка дозволить оцінювати концентрацію домішок за результатами виміру ВАХ, то при розрахунках використовувались дані, отримані шляхом аналізу літературних джерел з метою найточнішого врахування особливостей реальних елементів.

Розрахунки проводилися для структури типового сонячного елементу, геометрія якого зображена на рис.1.1. Вважалося, що система складається з емітерного n^+ -шару товщиною d_n , бази з дірковою провідністю товщиною d_p та p^+ -шару для створення поля задньої поверхні (ПЗП) товщиною d_{SBF} . Вважалося, що концентрації легуючих домішок дорівнюють N_D , N_A та N_{SBF} в емітері, базі та ПЗП-шарі, відповідно. Останній призначений для підвищення ефективності сонячного елементу шляхом зменшення втрат, пов'язаних з поверхневою рекомбінацією і подібна структура широко використовується як при створенні реальних сонячних елементів, так і для моделювання [1,2,3].

При проведенні обчислень вважалося, що матеріалом всіх шарів є монокристалічний кремній, донорною домішкою є фосфор, а акцепторною – бор. Також використовувалося наближення повної іонізації домішок (концентрація основних носіїв заряду співпадає з концентрацією легантів),

цілком справедливе для діапазону температур, що розглядався в роботі.

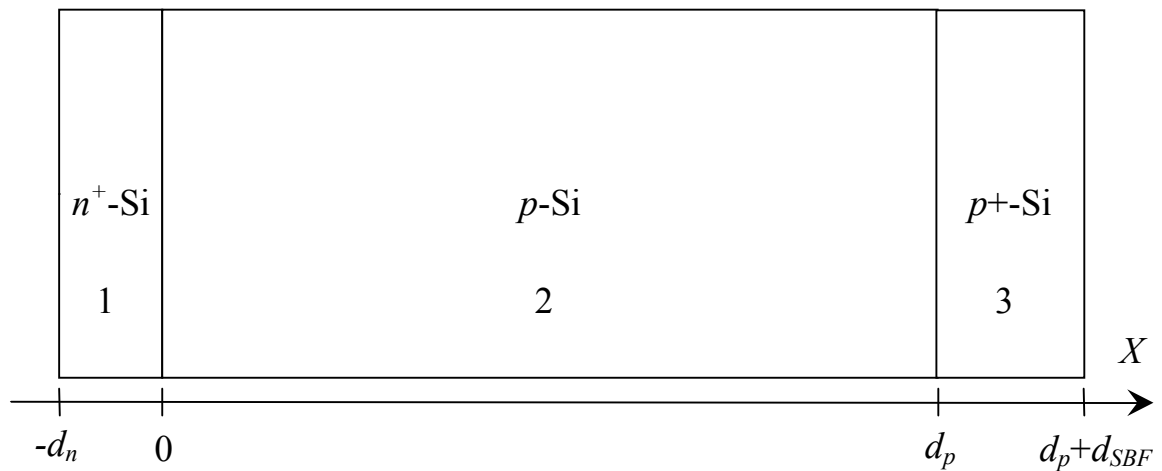


Рисунок 1.1 – Геометрія структури, використаної у розрахунковій моделі. 1 – емітер, 2 – база, 3 – шар ПЗП

Розрахунки проводилися при різних температурах, тому необхідно було враховувати пов'язані з цим зміни величин параметрів монокристалічного кремнію. Нижче наведено температурні залежності та кількісні значення використаних параметрів.

При розрахунках ширина забороненої зони обчислювалась за формулою Пасслера [4]

$$E_G(T) = E(0) - \alpha\theta \left\{ \frac{(1 - 3\Delta^2)}{\exp(\theta/T) - 1} + \right. \\ \left. + \frac{3\Delta^2}{2} \left(\sqrt[6]{1 + \frac{\pi^2}{3(1 + \Delta^2)} \left(\frac{2T}{\theta} \right)^2} + \frac{3\Delta^2 - 1}{4} \left(\frac{2T}{\theta} \right)^3 + \frac{8}{3} \left(\frac{2T}{\theta} \right)^4 + \left(\frac{2T}{\theta} \right)^6 - 1 \right) \right\} \quad (1.1)$$

де

де $E(0) = 1,1701$ еВ ширина забороненої зони при нульовій температурі,

T – температура, К,

$\alpha = 3,23 \cdot 10^{-4}$ еВ/К,

$\Theta = 446$ К,

$\Delta = 0,51$.

При цьому враховувалось звуження забороненої зони ΔE_G внаслідок легування, яке відповідно до даних роботи [5] для n - та p -областей має описуватися виразами (1.2) та (1.3) відповідно:

$$\Delta E_G(T) = 4.2 \cdot 10^{-5} \left[\ln \left(\frac{N_D}{10^{20}} \right) \right]^3, \quad (1.2)$$

$$\Delta E_G(T) = 4.72 \cdot 10^{-5} \left[\ln \left(\frac{N_A}{10^{20}} \right) \right]^3, \quad (1.3)$$

де значення концентрацій легантів очікуються у м^{-3} , а звуження забороненої зони - в еВ.

При обчисленні теплових швидкостей електронів $v_{th,n}$ та дірок $v_{th,p}$ використовувались вирази з роботи [6]:

$$v_{th,n} = \sqrt{\frac{8kT}{0.28\pi m_0}}; \quad v_{th,p} = \sqrt{\frac{8kT}{0.41\pi m_0}}, \quad (1.4)$$

де

m_0 – маса вільного електрона.

Розрахунок ефективних густин станів поблизу границь дозволених зон відбувався з використанням виразів

$$N_C(T) = 4.83 \cdot 10^{21} \left(\frac{m_{dC}^*}{m_0} \right)^{1,5} T^{1,5}; \quad N_V(T) = 4.83 \cdot 10^{21} \left(\frac{m_{dV}^*}{m_0} \right)^{1,5} T^{1,5}, \quad (1.5)$$

де

N_C – густина станів поблизу дна зони провідності, м^{-3} ,

N_V – густина станів поблизу валентної зони, м^{-3} ,

причому для оцінки температурних залежностей ефективних мас густин станів m_{dC}^* та m_{dV}^* застосовувались вирази, запропоновані в роботі [7]:

$$\left(\frac{m_{dC}^*}{m_0} \right)^{1,5} = 1,094 - 1,312 \cdot 10^{-5} T + 6,753 \cdot 10^{-7} T^2 - 4,609 \cdot 10^{-10} T^3, \quad (1.6)$$

$$\left(\frac{m_{dV}^*}{m_0}\right)^{1,5} = 0,3426 + 3,376 \cdot 10^{-3} T - 4,689 \cdot 10^{-6} T^2 + 2,525 \cdot 10^{-9} T^3. \quad (1.7)$$

Вираз, запропонований в останній роботі також використовувався при оцінці власної концентрації носіїв заряду n_i

$$n_i(T) = 1,541 \cdot 10^{21} T^{1,712} \exp\left(-\frac{E_G}{2kT}\right). \quad (1.8)$$

Рухливості електронів та дірок обчислювалися за теорією Классена [8], яка враховує як граткове, так і електрон-діркове розсіяння носіїв заряду.

Температурні залежності ефективних мас вільних носіїв заряду описувалися за допомогою поліномів 6-го ступеня відповідно до [9].

Враховувалися ряд рекомбінаційних процесів. Зокрема власна рекомбінації, пов'язана з Оже-процесами, темп якої описується виразом:

$$U_{Auger} = (C_{p0}p + C_{n0}n)(np - n_i^2), \quad (1.9)$$

де

p та n – концентрації дірок та електронів, відповідно, м^{-3} ;

C_{p0} та C_{n0} – коефіцієнти Оже-рекомбінації дірок та електронів, які, в свою чергу розраховувалися з використанням виразів, наведених в [10]:

$$C_{p0}(T) = (7,91 \cdot 10^{-44} - 4,13 \cdot 10^{-47} T + 3,59 \cdot 10^{-49} T^2) \times \\ \times \left(1 + (564812 \cdot T^{-1,6545} - 1) \left(1 - \tanh\left[\left\{\frac{p}{5 \cdot 10^{22}}\right\}^{0,29}\right]\right)\right), \quad (1.10)$$

$$C_{n0}(T) = 2,8 \cdot 10^{-43} \times \left(1 + (235548 \cdot T^{-1,5013} - 1) \left(1 - \tanh\left[\left\{\frac{n}{5 \cdot 10^{22}}\right\}^{0,34}\right]\right)\right). \quad (1.11)$$

Також враховувалася рекомбінація, пов'язана з випромінювальними міжзонними переходами, для якої темп описується виразом:

$$U_{BB} = B(np - n_i^2), \quad (1.12)$$

де

B – рекомбінаційний коефіцієнт, який обчислювався шляхом апроксимації табличних даних роботи [11] для діапазону 90-363 К за допомогою поліному 5-го ступеня.

Враховувалась також рекомбінація на дефектах відповідно до моделі Шоклі-Ріда-Хола (ШРХ), темп якої

$$U_{SRH} = \frac{np - n_i^2}{\tau_{p0}(n + n_1) + \tau_{n0}(p + p_1)}, \quad (1.13)$$

де

$$\tau_{n0} = \frac{1}{N_d \sigma_n v_{th,n}}, \text{ с},$$

$$\tau_{p0} = \frac{1}{N_{def} \sigma_p v_{th,p}}, \text{ с},$$

N_{def} – концентрація дефектів, м^{-3} ,

σ_n та σ_p – поперечні перерізи захоплення дефектом електронів та дірок, відповідно, м^2 ;

$$n_1 = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_{def}}{kT}\right), \quad p_1 = N_V \exp\left(-\frac{E_{def} - E_V}{kT}\right), \quad (1.14)$$

E_C та E_V – енергетичні положення дна зони провідності та вершини валентної зони, відповідно, еВ;

E_{def} – енергетичне положення рівня, пов'язаного з дефектом, еВ.

При розрахунках вважалося, що поверхнева швидкість рекомбінації однакова на обох поверхнях і дорівнює 10^3 см/с.

В моделі вважалося, що дефекти в базі та в шарі ПЗП пов'язані з домішковими атомами заліза, причому в обох шарах передбачалась однакова концентрація N_{Fe} ($N_{def} = N_{Fe}$) і вважалося, що домішки рівномірно розподілені по об'єму напівпровідника. Дефекти в емітері не розглядалися.

Моделювання проводилося для двох випадків. У першому вважалося, що всі атоми заліза не утворюють комплекси і перебувають у міжвузольному стані

$N_{Fe} = N_{Fe,i}$. На практиці подібний стан реалізується під час інтенсивного освітлення сонячного елемента чи безпосередньо після його. При цьому використовувалися наступні параметри дефектів.

Вважалося, що енергетичне положення донорного рівня (0/+) практично не залежить від температури і дорівнює [12,13] $E_{Fe} = E_V + 0,394$ еВ. Міжвузольні атоми заліза можуть бути як в нейтральному стані Fe_i^0 , так і однократно додатно зарядженому Fe_i^+ . У стані термодинамічної рівноваги співвідношення між концентраціями різних станів описується виразом

$$\frac{N_{Fe+}}{N_{Fe0}} = \exp\left(-\frac{E_F - E_{Fe}}{kT}\right), \quad (1.15)$$

де

E_F – положення рівня Фермі.

В літературі [14] показано, що температурна залежність поперечних перерізів захоплення носіїв міжвузольних атомом заліза описується виразами

$$\sigma_{n,Fe} = 3,47 \cdot 10^{-15} T^{-1,48}; \quad \sigma_{p,Fe} = 4,54 \cdot 10^{-20} \exp\left(-\frac{0,05}{kT}\right). \quad (1.16)$$

У другому випадку, який відповідав рівноважному стану неосвітленого сонячного елемента, вважалося, що у кристалі присутні як неспарені міжвузлові атоми заліза, так і пари заміщуючий атом бору – міжвузольних атом заліза Fe_iB_s : $N_{Fe} = N_{Fe,i} + N_{FeB}$. Загалом, у кремнії з дірковою провідністю переважна більшість додатньо заряджених атомів заліза утворюють пари з легуючою домішкою, зокрема в Si:B утворюються пари Fe_iB_s . Цей дефект є амфотерним і утворює як донорний рівень (0/+), так і акцепторний (-/0). Загалом, пара залізо-акцептор є бістабільним дефектом і може перебувати в двох конфігураціях: з тригональною симетрією, коли атом заліза перебуває в найближчому до заміщуючого атому бору тетраедричному міжвузлі та орторомбічною, у якій Fe знаходиться в другому за віддаленістю тетраедричному міжвузлі. Водночас зауважимо, що орторомбічна пара

спостерігається лише при достатньо низьких (<150 K) температурах при освітленні зразків або інжекції носіїв [15,16] і тому при розрахунках вважалося, що всі пари знаходяться у стані з тригональною симетрією. В цьому випадку енергетичне розташування акцепторного та донорного рівнів [12, 17] $E_{FeB,A} = E_C - 0,26$ eV та $E_{FeB,D} = E_V + 0,10$ eV, відповідно. Залежність поперечних перерізів захоплення носіїв для акцепторного рівня від температури описується виразами [14]

$$\sigma_{n,FeB,A} = 5,1 \cdot 10^{-13} T^{-2,5}; \quad \sigma_{p,FeB,A} = 3,32 \cdot 10^{-14} \exp\left(-\frac{0,262}{kT}\right). \quad (1.17)$$

В цьому другому випадку під час розрахунків враховувався той факт, що частина атомів заліза все-таки залишається у неспареному стані, що викликає неоднорідний розподіл дефектів різного типу по товщині бази та ПЗП шару. Дійсно, з літератури [18,19] відомо, в рівноважному стані концентрація неспарених позитивно заряджених атомів заліза описується виразом

$$N_{Fe+} = \frac{N_{Fe}}{\left[1 + N_A 10^{-23} \exp\left(\frac{E_b}{kT}\right)\right] \left[1 + \exp\left(\frac{E_F - E_{Fe}}{kT}\right)\right]}, \quad (1.18)$$

де

$E_b = 0,582$ eV – енергія зв'язку пари.

Співвідношення (1.15) для випадку існування пар необхідно замінити на наступне [19]:

$$\frac{N_{Fe+} + N_{FeB}}{N_{Fe0}} = \exp\left(-\frac{E_F - E_{Fe}}{kT}\right), \quad (1.19)$$

а отже співвідношення між загальною концентрацією домішкових атомів заліза та рівноважною концентрацією пар може бути записане у вигляді

$$N_{FeB} = N_{Fe} \frac{N_A 10^{-23} \exp\left(\frac{E_b}{kT}\right)}{\left[1 + N_A 10^{-23} \exp\left(\frac{E_b}{kT}\right)\right] \left[1 + \exp\left(\frac{E_F - E_{Fe}}{kT}\right)\right]}. \quad (1.20)$$

Як видно з наведеного виразу, концентрація пар залежить від положення рівня Фермі. У сонячному елементі в області просторового заряду значення E_F не залишається постійним і залежить як від температури, так і від концентрації легуючої домішки. А отже, навіть при рівномірному розподілі домішкового заліза концентрація пар Fe_iB_s (як і неспарених міжвузлових атомів) буде залежати від відстані до p - n -переходу.

1.2 Отримання масиву вольт-амперних характеристик кремнієвих n^+p - p^+ структур з різними товщинами, ступенем легування та концентрацією домішки

Вольт-амперні характеристики структури, описаної в підрозділі 1.1, розраховувалися за допомогою програмного пакету одномірного моделювання SCAPS 3.3.08 [20]. Параметрами, які варіювалися під час моделювання були концентрації бору в базі, її товщина, концентрація домішкового заліза в шарах з дірковою провідністю та температура.

SCAPS широко використовується для моделювання різноманітних сонячних елементів [2,3,21,22,23], у тому числі і на основі кремнію [2,3,23]. Проте цей пакет моделювання має певні недоліки, пов'язані, зокрема, з врахування ним під час розрахунків лише температурних залежностей ефективних густин енергетичних рівнів у дозволених зонах та теплових швидкостей носіїв відповідно до класичних співвідношень. Реальні залежності параметрів як кремнію, так і рекомбінаційних центрів, пов'язаних з домішковими атомами заліза, мають складніший характер і тому виникла необхідність створення окремих файлів даних для роботи SCAPS (надалі – будемо використовувати скорочення SCAPS-файли) при обчисленні параметрів кремнієвої n^+p - p^+ структури для кожного зі значень температури, рівня легування та концентрації домішок. Для автоматизації цього процесу була розроблена програма, з наступним функціоналом:

- можливість задавати товщину та рівень легування для кожного з шарів

$n^+p\text{-}p^+$ структури;

- можливість створення набору SCAPS-файлів, які відповідають всім значенням температури із заданого діапазону з визначеним користувачем кроком;
- створення SCAPS-файлів, які передбачають проведення розрахунків для діапазону значень концентрацій домішкового заліза в базі та ПЗП-шарі;
- врахування при створенні SCAPS-файлів ефективних мас електронів та дірок залежно від температури відповідно до даних, наведених у роботі [9];
- врахування при створенні SCAPS-файлів теплових швидкостей електронів та дірок відповідно до формули (1.4);
- розрахунок при створенні SCAPS-файлів ширини забороненої зони кожного з шарів $n^+p\text{-}p^+$ структури залежно від температури відповідно до формули (1.1) з врахуванням звуження, що залежить від концентрації легуючих домішок відповідно до виразів (1.2) та (1.3);
- розрахунок при створенні SCAPS-файлів ефективних густин станів поблизу дна зони провідності та вершини валентної зони відповідно до формул (1.5), (1.6) та (1.7);
- врахування при створенні SCAPS-файлів рухливостей електронів та дірок у кожному з шарів з врахуванням температури та рівня легування відповідно до теорії Клаассена [8];
- розрахунок коефіцієнта випромінювальної міжзонної рекомбінації залежно від температури відповідно до даних [11];
- розрахунок коефіцієнтів Оже-рекомбінації для кожного з шарів $n^+p\text{-}p^+$ структури залежно від температури та рівня легування відповідно до виразів (1.10) та (1.11);
- розрахунок поперечних перерізів захоплення носіїв електронів та дірок міжвузольними атомами заліза та парами залізо-бор залежно від температури відповідно до формул (1.16) та (1.17);
- врахування при створенні SCAPS-файлів власної концентрації носіїв

заряду залежно від температури відповідно до (1.8).

SCAPS-файли для розрахунків мають текстовий формат, необхідні для моделювання створювалися на основі шаблонів.

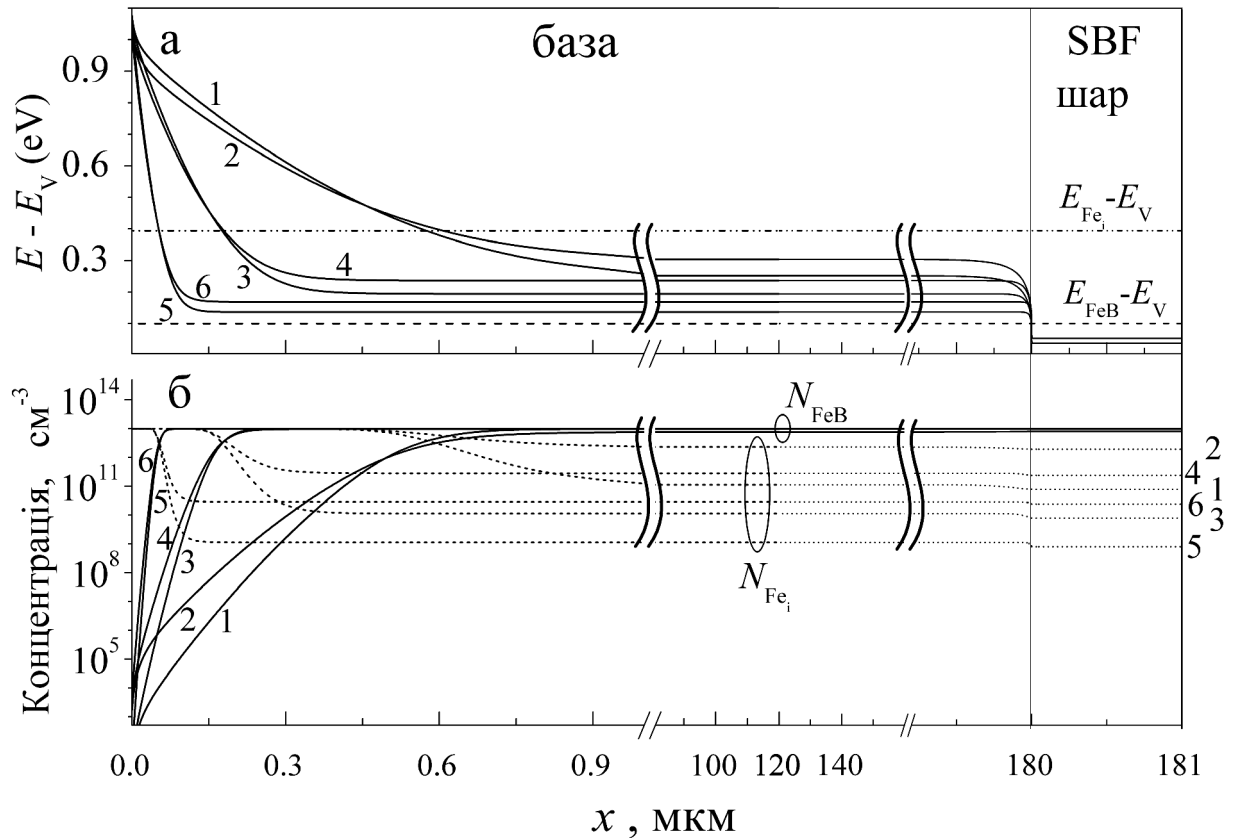
Як видно з формули (1.20), у випадку співіснування міжвузольних атомів заліза та пар Fe_iB_s , співвідношення їхніх концентрацій залежить від положення рівня Фермі. Тому для такого випадку спочатку за допомогою програмного пакету SCAPS розраховувалося положення рівня Фермі у структурі без дефектів (масиви базових файлів також створювалися за допомогою розробленого програмного забезпечення), а потім отримані результати застосовувалися для оцінки просторового розподілу дефектів різного типу. Отримані дані використовувалися для побудови файлів особливого формату, які може використовувати SCAPS під час роботи. Приклади розрахунку представлені на рис.1.2.

Зауважимо, що результати роботи пакету SCAPS по розрахунку положення рівня Фермі та вольт-амперних характеристик мають вигляд текстових файлів особливого формату, які містять значну кількість як службової, так і розрахункової інформації. Наприклад в результаті моделювання ВАХ, результати роботи пакету містять інформацію про компоненти струму, пов'язані з різними рекомбінаційними процесами тощо. Так як план дослідження передбачає використання отриманих даних для подальшої інтерполяції відповідно до дво-діодної моделі, то окремими функціями розробленого програмного забезпечення є парсинг вихідних для SCAPS файлів. Зокрема, проводилося вичлення в окремі файли csv-формату вольт-амперних характеристик як для загального струму, так і для струму, пов'язаного лише з рекомбінацією Шоклі-Ріда-Хола.

Програму (як от відкомпільований варіант, так і вихідні файли Delphi-проєкту) можна знайти за посиланням <https://github.com/olegolikh/SCAPSConversion.git>.

В роботі проводилося моделювання прямої гілки вольт-амперної

характеристики в діапазоні напруг 0-0,45 В з кроком 0,01 В. На рис.1.3 приведено типові приклади отриманих результатів.



Рисинок 1.2 - Розраховані залежності для бази та ПЗП шару положення рівня Фермі (а, суцільні лінії), концентрації міжвузольних атомів заліза (б, суцільні лінії) та пар Fe_iB_s (б, пунктир) при нульовому зміщенні. N_A , cm^{-3} : 10^{15} (криві 1 та 2), 10^{16} (3 та 4), 10^{17} (5 та 6). T , К: 290 (1, 3, 5), 340 (2, 4, 6). $N_{Fe} = 10^{13}$ cm^{-3} . $d_p = 180$ μm . В частині (а) також показані положення донорних рівнів, пов'язаних з міжвузольним залізом (штрих-пунктирна лінія) та парою Fe_iB_s (пунктир)

Зауважимо, що основною метою даного моделювання є створення бази розмічених даних, які в подальшому мають бути використані для навчання штучної нейронної мережі, орієнтованої на оцінку концентрації домішок за характеристикою (фактором неідеальності) ВАХ реального сонячного елементу. У зв'язку з цим отримані в результаті моделювання ВАХ можна

розділити на декілька наборів.

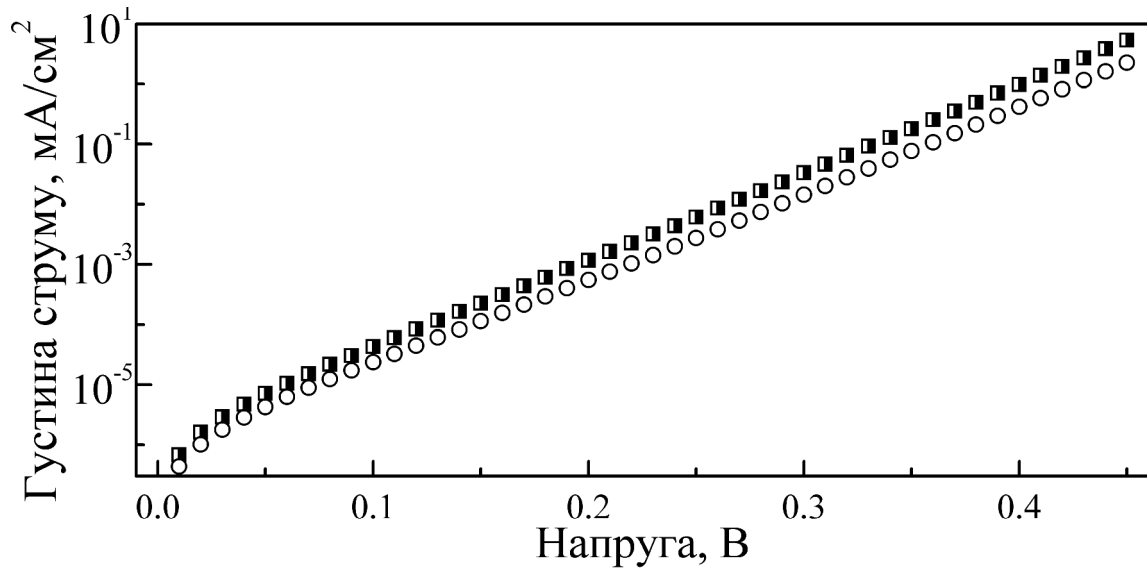


Рисунок 1.3 – Модельовані вольт-амперні характеристики кремнієвої n^+p-p^+ структури за наявності лише неспарених міжвузольних атомів заліза (кола) та одночасної присутності пар Fe_iB_s та Fe_i (квадрати). $N_A = 10^{17} \text{ см}^{-3}$, $N_{Fe} = 10^{13} \text{ см}^{-3}$, $T = 340 \text{ К}$, $d_p = 180 \text{ мкм}$

Перший з них планується використати для налаштування та тренування нейронної мережі. Параметри структур, що використовувалися при отриманні цього набору вибиралися з умови максимального наближення до реальних елементів. А саме, температурний діапазон $290 \div 340 \text{ К}$ відображає той факт, що фотоперетворювачі в некосмічних умовах використовуються поблизу кімнатних температур, або підвищених, викликаних їхнім перебуванням під прямим сонячним світлом. Для стандартних комерційних кремнієвих сонячних елементів товщина база складає 180 мкм [24] і тому моделювання проводилося для товщин $150 \div 240 \text{ мкм}$. Так само діапазон ступеня легування $10^{15} \div 10^{17} \text{ см}^{-3}$ відповідає стандартним фотоперетворювачам. Нарешті, розгляд значень концентрацій домішкового заліза з інтервалу $10^{10} \div 10^{13} \text{ см}^{-3}$ зумовлений тим, що, з одного боку, при менших рівнях забруднення залізо практично не впливає на параметри кремнієвих сонячних елементів [25], а з другого, сучасна

технологія виробництва запобігає потраплянню у кремнієві кристали перехідних металів у більшій кількості. При моделюванні були використані значення параметрів, рівномірно розподілені (в лінійному чи логарифмічному масштабах) у вказаних діапазонах, наведені в таблиці 1.1. Враховуючи, що розглядалися дві можливі конфігурації дефектної підсистеми та бралися до уваги загальні рекомбінаційні струми чи лише та їх складова, яка пов'язана з рекомбінацією на дефектах, всього було отримано трохи більше 30 тис. ВАХ.

Таблиця 1.1 – Параметри структур n^+p-p^+ , що використовувалися при моделюванні ВАХ основного набору

Параметр	Значення
d_n , мкм	0,5
d_p , мкм	150, 180, 210, 240
d_{SBF} , мкм	1
N_D , см^{-3}	10^{19}
N_A , см^{-3}	10^{15} , $1,778 \cdot 10^{15}$, $3,162 \cdot 10^{15}$, $5,623 \cdot 10^{15}$, 10^{16} , $1,778 \cdot 10^{16}$, $3,162 \cdot 10^{16}$, $5,623 \cdot 10^{16}$, 10^{17}
N_{SBF} , см^{-3}	$5 \cdot 10^{18}$
N_{Fe} , см^{-3}	10^{10} , $1,468 \cdot 10^{10}$, $2,154 \cdot 10^{10}$, $3,162 \cdot 10^{10}$, $4,642 \cdot 10^{10}$, $6,813 \cdot 10^{10}$, 10^{11} , $1,468 \cdot 10^{11}$, $2,154 \cdot 10^{11}$, $3,162 \cdot 10^{11}$, $4,642 \cdot 10^{11}$, $6,813 \cdot 10^{11}$, 10^{12} , $1,468 \cdot 10^{12}$, $2,154 \cdot 10^{12}$, $3,162 \cdot 10^{12}$, $4,642 \cdot 10^{12}$, $6,813 \cdot 10^{12}$, 10^{13}
T , K	290, 295, 300, 305, 310, 315, 320, 325, 330, 335, 340

За результатами аналізу залежності вигляду ВАХ від параметрів структури підготовлена стаття (О.Ya. Olikh, O.V. Zavhorodnii, «Modeling of ideality factor value in n^+p-p^+ -Si structure», Journal of Physical Studies, v. 24, No. 4 (2020) 4701(8 p.)).

Інші набори ВАХ призначені для перевірки ефективності роботи

нейронної мережі і містять характеристики, розраховані для випадків, коли параметри структури відрізняються від тих, які використовувалися при навчанні мережі. А саме було створено 5 різних наборів: коли відрізняється концентрація бору (дані наведені у таблиці 1.2), концентрація заліза (таблиця 1.3), товщина бази (таблиця 1.4), температура (таблиця 1.5), чи всі з перерахованих параметрів одночасно (таблиця 1.5).

Таблиця 1.2 – Параметри структур n^+p-p^+ , що використовувалися при моделюванні з відмінними від основного набору значеннями концентрації бору

$N_A, \text{см}^{-3}$	$N_{Fe}, \text{см}^{-3}$	$d_p, \text{мкм}$	$T, \text{К}$	Кількість ВАХ
$1,4 \cdot 10^{15}$	$10^{10}, 1,468 \cdot 10^{10},$ $2,154 \cdot 10^{10}, 3,162 \cdot 10^{10},$ $4,642 \cdot 10^{10}, 6,813 \cdot 10^{10},$ $10^{11}, 1,468 \cdot 10^{11},$ $2,154 \cdot 10^{11}, 3,162 \cdot 10^{11},$ $4,642 \cdot 10^{11}, 6,813 \cdot 10^{11},$ $10^{12}, 1,468 \cdot 10^{12},$ $2,154 \cdot 10^{12}, 3,162 \cdot 10^{12},$ $4,642 \cdot 10^{12}, 6,813 \cdot 10^{12},$ 10^{13}	150, 180	290, 295, 300, 305, 310, 315, 320, 325, 330, 335, 340	1672
$4,5 \cdot 10^{15},$ $8 \cdot 10^{16}$	$10^{10}, 2,154 \cdot 10^{10},$ $3,162 \cdot 10^{10}, 1,468 \cdot 10^{11},$ $2,154 \cdot 10^{11}, 4,642 \cdot 10^{11},$ $10^{12}, 2,154 \cdot 10^{12},$ $3,162 \cdot 10^{12}, 4,642 \cdot 10^{12},$ $6,813 \cdot 10^{12}, 10^{13} \text{ см}^{-3}$	210	290, 305, 320, 340	384

Таблиця 1.3 – Параметри структур $n^+ - p - p^+$, що використовувалися при моделюванні з відмінною від основного набору концентрацією заліза

$N_A, \text{см}^{-3}$	N_{Fe}	$d_p, \text{мкм}$	$T, \text{К}$	Кількість ВАХ
$1,778 \cdot 10^{15}$, $5,623 \cdot 10^{15}$, 10^{16} , $3,162 \cdot 10^{16}$, 10^{17}	11 рівномірно розподілених у логарифмічному масштабі значень для діапазону $1,3 \cdot 10^{10} \div 8 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$	180	290, 295, 300, 305, 310, 315, 320, 325, 330, 335, 340	2420
$3,162 \cdot 10^{15}$, 10^{16} , 10^{17}	7 рівномірно розподілених значень у діапазоні $1,2 \cdot 10^{11} \div 5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$	210, 240	290, 300, 310, 320, 330, 340	1004

Таблиця 1.4 – Параметри структур $n^+ - p - p^+$, що використовувалися при моделюванні набору з відмінними від основного значеннями товщини бази

$N_A, \text{см}^{-3}$	N_{Fe}	$d_p, \text{мкм}$	$T, \text{К}$	Кількість ВАХ
10^{15} , $5,623 \cdot 10^{15}$, $1,778 \cdot 10^{16}$, $5,623 \cdot 10^{16}$	10^{10} , $1,468 \cdot 10^{10}$, $2,154 \cdot 10^{10}$, $3,162 \cdot 10^{10}$, $4,642 \cdot 10^{10}$, $6,813 \cdot 10^{10}$, 10^{11} , $1,468 \cdot 10^{11}$, $2,154 \cdot 10^{11}$, $3,162 \cdot 10^{11}$, $4,642 \cdot 10^{11}$, $6,813 \cdot 10^{11}$, 10^{12} , $1,468 \cdot 10^{12}$, $2,154 \cdot 10^{12}$, $3,162 \cdot 10^{12}$, $4,642 \cdot 10^{12}$, $6,813 \cdot 10^{12}$, 10^{13}	190	290, 300, 310, 320, 330, 340	1824

Кінець таблиці 1.4.

$N_A, \text{см}^{-3}$	N_{Fe}	$d_p,$ мкм	$T, \text{К}$	Кількість ВАХ
$10^{15}, 1,778 \cdot 10^{15},$ $3,162 \cdot 10^{15},$ $5,623 \cdot 10^{15}, 10^{16},$ $1,778 \cdot 10^{16},$ $3,162 \cdot 10^{16},$ $5,623 \cdot 10^{16}, 10^{17}$	$10^{10}, 3,162 \cdot 10^{10}, 10^{11},$ $3,162 \cdot 10^{11}, 10^{12}, 3,162 \cdot 10^{12},$ 10^{13}	205	295, 305, 315, 325, 335	1260
$1,778 \cdot 10^{15}, 10^{16}$	$10^{10}, 1,468 \cdot 10^{10}, 2,154 \cdot 10^{10},$ $3,162 \cdot 10^{10}, 4,642 \cdot 10^{10},$ $6,813 \cdot 10^{10}, 10^{11}, 1,468 \cdot 10^{11},$ $2,154 \cdot 10^{11}, 3,162 \cdot 10^{11},$ $4,642 \cdot 10^{11}, 6,813 \cdot 10^{11}, 10^{12},$ $1,468 \cdot 10^{12}, 2,154 \cdot 10^{12},$ $3,162 \cdot 10^{12}, 4,642 \cdot 10^{12},$ $6,813 \cdot 10^{12}, 10^{13}$	230	290, 295, 300, 305, 310, 315, 320, 325, 330, 335, 340	1672

Таблиця 1.5 – Параметри структур $n^+p\text{-}p^+$, що використовувалися при моделюванні ВАХ набору з відмінними від основного значеннями температури

$N_A, \text{см}^{-3}$	$N_{\text{Fe}}, \text{см}^{-3}$	$d_p,$ мкм	$T, \text{К}$	Кількість ВАХ
1	2	3	4	5
$10^{15}, 1,778 \cdot 10^{15},$ $3,162 \cdot 10^{15}, 5,623 \cdot 10^{15},$ $10^{16}, 1,778 \cdot 10^{16},$ $3,162 \cdot 10^{16}, 5,623 \cdot 10^{16},$ 10^{17}	$1,468 \cdot 10^{10}, 4,642 \cdot 10^{10},$ $6,813 \cdot 10^{10}, 1,468 \cdot 10^{11},$ $4,642 \cdot 10^{11}, 6,813 \cdot 10^{11},$ $2,154 \cdot 10^{12}, 4,642 \cdot 10^{12}$	210	314	288

Кінець таблиці 1.5.

1	2	3	4	5
10^{15} , $5,623 \cdot 10^{15}$, $1,778 \cdot 10^{16}$, $3,162 \cdot 10^{16}$	10^{10} , $1,468 \cdot 10^{10}$, $2,154 \cdot 10^{10}$, $3,162 \cdot 10^{10}$, $4,642 \cdot 10^{10}$, $6,813 \cdot 10^{10}$, 10^{11} , $1,468 \cdot 10^{11}$,	150, 180, 210, 240	303	1216
$1,778 \cdot 10^{15}$, $1,778 \cdot 10^{16}$, 10^{17}	$2,154 \cdot 10^{11}$, $3,162 \cdot 10^{11}$, $4,642 \cdot 10^{11}$, $6,813 \cdot 10^{11}$,	150, 180	393	456
10^{15} , $1,778 \cdot 10^{15}$, $3,162 \cdot 10^{15}$, $5,623 \cdot 10^{15}$, 10^{16} , $1,778 \cdot 10^{16}$, $3,162 \cdot 10^{16}$, $5,623 \cdot 10^{16}$, 10^{17}	10^{12} , $1,468 \cdot 10^{12}$, $2,154 \cdot 10^{12}$, $3,162 \cdot 10^{12}$, $4,642 \cdot 10^{12}$, $6,813 \cdot 10^{12}$, 10^{13}	180, 240	336	1328
10^{15} , $1,778 \cdot 10^{15}$, $3,162 \cdot 10^{15}$, $5,623 \cdot 10^{15}$, 10^{16} , $1,778 \cdot 10^{16}$, $3,162 \cdot 10^{16}$, $5,623 \cdot 10^{16}$, 10^{17}	$1,468 \cdot 10^{10}$, $4,642 \cdot 10^{10}$, $6,813 \cdot 10^{10}$, $1,468 \cdot 10^{11}$, $4,642 \cdot 10^{11}$, $6,813 \cdot 10^{11}$, $2,154 \cdot 10^{12}$, $4,642 \cdot 10^{12}$	210	314	288

Таблиця 1.6 – Параметри структур $n^+ - p - p^+$, що використовувалися при моделюванні ВАХ набору з відмінними від основного значеннями товщини бази, температури, концентрації домішкового заліза та рівня легування

N_A , см^{-3}	N_{Fe}	d_p , мкм	T , К	Кількість ВАХ
$7 \cdot 10^{15}$, $4,5 \cdot 10^{16}$	30 значень у діапазоні $5 \cdot 10^{10} \div 5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$	170, 200	297, 309, 321, 333	1920

Кінець таблиці 1.6.

$N_A, \text{см}^{-3}$	N_{Fe}	$d_p, \text{мкм}$	$T, \text{К}$	Кількість ВАХ
$2,5 \cdot 10^{15},$ $8 \cdot 10^{16}$	по 10 значень у діапазонах $1,1 \cdot 10^{10} \div 5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3},$ $1,1 \cdot 10^{11} \div 5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3}$ та $1,1 \cdot 10^{12} \div 5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$	220	292, 302, 312	720
$1,3 \cdot 10^{15},$ $2 \cdot 10^{16}$	4 значення у діапазоні $5 \cdot 10^{12} \div 9 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$	200	293, 313, 333	96

Всі отримані вольт-амперні характеристики можна знайти за адресою <https://github.com/olegolikh/IVcharacteristics.git>.

1.3 Основні результати розділу 1

1. Розроблена розрахункова модель кремнієвої n^+p-p^+ структури з врахуванням реальних величинами і температурних залежностей параметрів кристалів кремнію та рекомбінаційних центрів, пов'язаних з домішковими атомами заліза.

2. За допомогою програмного пакету SCAPS 3.3.08 та розробленого програмного забезпечення проведено моделювання вольт-амперних характеристик кремнієвих n^+p-p^+ структур з різною товщиною бази ($150 \div 240 \text{ мкм}$) та ступенем її легування ($10^{15} \div 10^{17} \text{ см}^{-3}$) бази при варіації концентрації домішкового заліза в інтервалі $10^{10} \div 10^{13} \text{ см}^{-3}$ для температурного діапазону $290 \div 340 \text{ К}$. Отримано більше 40 тис. характеристик, які враховують можливість перебування домішкових атомів заліза у міжвузольному стані та у складі пари FeB.

ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

- 1 Numerical simulations of multilevel impurity photovoltaic effect in the sulfur doped crystalline silicon / E.T. Hu, G.Q. Yue, R.J. Zhang et al. // Renewable Energy. – 2015. – Vol. 77. – P. 442–446.
- 2 Modeling the effect of 1 MeV electron irradiation on the performance of n⁺-p-p⁺ silicon space solar cells / A. Hamache, N. Sengouga, A. Meftah, M. Henin // Radiat. Phys. Chem. – 2016. – Vol. 123. – P. 103–108.
- 3 Azzouzi G. Improving silicon solar cell efficiency by using the impurity photovoltaic effect / G. Azzouzi, W. Tazibt // Energy Procedia. – 2013. – Vol. 41. – P. 40–49.
- 4 Passler R. Dispersion-related description of temperature dependencies of band gaps in semiconductors / R. Passler // Phys. Rev. B. – 2002. – Vol. 66. – P. 085201.
- 5 Yan D. Empirical determination of the energy band gap narrowing in p⁺ silicon heavily doped with boron / D. Yan, A. Cuevas // Phys. Rev. B. – 2014. – Vol. 116. – P. 194505.
- 6 Green M. A. Intrinsic concentration, effective densities of states, and effective mass in silicon / M.A. Green // J. Appl. Phys.. – 1990. – Vol. 67. – P. 2944-2954.
- 7 Couderc R. Reassessment of the intrinsic carrier density temperature dependence in crystalline silicon / R. Couderc, M. Amara, M. Lemiti // J. Appl. Phys. – 2014. – Vol. 115. – P. 093705.
- 8 Klaassen D.B.M. A unified mobility model for device simulation - I. Model equations and concentration dependence / D.B.M. Klaassen // Solid-State Electron. – 1992. – Vol. 35. – P. 953-959

- 9 O'Mara W.C. Handbook of semiconductor silicon technology / W.C. O'Mara, R.B. Herring, L.P. Hant. – New Jersey, USA: Noyes Publications, 1990. – 795 p.
- 10 Assessment and parameterisation of Coulomb-enhanced Auger recombination coefficients in lowly injected crystalline silicon / P.P. Altermatt, J. Schmidt, G. Heiser, A.G. Aberle // J. Appl. Phys. – 1997. – Vol. 82. – P. 4938–4944.
- 11 Nguyen H.T. Temperature dependence of the radiative recombination coefficient in crystalline silicon from spectral photoluminescence / H.T. Nguyen, S.C. Baker-Finch, D. Macdonald // Appl. Phys. Lett. – 2014. – Vol. 104. – P. 112105.
- 12 Rein S. Electronic properties of interstitial iron and iron-boron pairs determined by means of advanced lifetime spectroscopy / S. Rein, S.W. Glunz // J. Appl. Phys. – 2005. – Vol. 98. – P. 113711.
- 13 Temperature dependence of the iron donor level in silicon at device processing temperatures / H. Kohno, H. Hieslmair, A.A. Istratov, E.R. Weber // Appl. Phys. Lett. – 2000. – Vol. 76. – P. 2734-2736.
- 14 Rougieux F.E. Determining the charge states and capture mechanisms of defects in silicon through accurate recombination analyses: A review / F.E.Rougieux, C. Sun, D. Macdonald // Solar Energy Materials and Solar Cells. – 2018. – Vol. 187. – P. 263-272.
- 15 Comparison of iron-related recombination centers in boron, gallium, and indium doped silicon analyzed by defect parameter contour mapping / T.U. Naerland, S. Bernardini, N. Stoddard et al. // Energy Procedia. – 2017. – Vol. 124. – P. 138-145.
- 16 Recombination-enhanced Fe atom jump between the first and the second neighbor site of Fe-acceptor pair in Si / S. Sakauchi, M. Suezawa, K. Sumino, H. Nakashima // J. Appl. Phys. – 1996. – Vol. 80. – P. 6198-6203.

- 17 Istratov A.A. Iron and its complexes in silicon / A.A. Istratov, H. Hieslmair, E.R. Weber // *Applied Physics A: Materials Science & Processing*. – 1999. – Vol. 69. – P. 13-44.
- 18 The effect of oxide precipitates on minority carrier lifetime in p-type silicon / J.D. Murphy, K. Bothe, M. Olmo et al. // *J. Appl. Phys.* – 2011. – Vol. 110. – P. 053713.
- 19 Wijaranakula W. The reaction kinetics of iron-boron pair formation and dissociation in p-type silicon / W. Wijaranakula // *J. Electrochem. Soc.* – 1993. – Vol. 140. – P. 275-281.
- 20 Burgelman M. Modelling polycrystalline semiconductor solar cells / M. Burgelman, P. Nollet, S. Degraeve // *Thin Solid Films*. – 2000. – Vol. 361-362. – P. 527-532.
- 21 Study of the reverse saturation current and series resistance of p-p-n perovskite solar cells using the single and double-diode models / M.A. Cappelletti, G.A. Casas, A.P. Cedola et al. // *Superlattices Microstruct.* – 2018. – Vol. 123. – P. 338-348.
- 22 Simulation of high efficiency CIGS solar cells with SCAPS-1D software / M. Mostefaoui, H. Mazari, S. Khelifi et al. // *Energy Procedia*. – 2015. – Vol. 74. – P. 736-744.
- 23 Zhao B. Numerical simulation of the impurity photovoltaic effect in silicon solar cells doped with thallium / B. Zhao, J. Zhou, Y. Chen // *Physica B: Condensed Matter*. – 2010. – Vol. 405. – P. 3834-3837.
- 24 Sinke W.C. Development of photovoltaic technologies for global impact / W.C. Sinke // *Renewable Energy*. – 2019. – Vol. 138. – P. 911-914.
- 25 Schmidt J. Effect of dissociation of iron-boron pairs in crystalline silicon on solar cell properties / J. Schmidt // *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*. – 2005. – Vol. 13. – P. 325-331.

- 26 Macdonald D. Measuring dopant concentrations in compensated p-type crystalline silicon via iron-acceptor pairing / D. Macdonald, A. Cuevas, L.J. Geerligs // *Appl. Phys. Lett.* – 2008. – Vol. 92. – P. 202119.
- 27 Geerligs L.J. Dynamics of light-induced FeB pair dissociation in crystalline silicon / L.J. Geerligs, D. Macdonald // *Appl. Phys. Lett.* – 2004. – Vol. 85. – P. 5227-5229.
- 28 Zoth G. A fast, preparation-free method to detect iron in silicon / G. Zoth, W. Bergholz // *J. Appl. Phys.* – 1990. – Vol. 67. – P. 6764-6771.
- 29 Walz D. On the recombination behaviour of iron in moderately boron-doped p-type silicon / D. Walz, J.P. My, G. Kamarinos // *Appl. Phys. A: Mater. Sci. Process.* – 1996. – Vol. 62. – P. 345-353.
- 30 Accelerated light-induced degradation (ALID) for monitoring of defects in PV silicon wafers and solar cells / M. Wilson, P. Edelman, A. Savtchouk et al. // *J. Electron. Mater.* – 2010. – Vol. 39. – P. 642-647.
- 31 Accelerated light-induced defect transformation study of Elkem solar grade silicon / M. Tayyib, J. Theobald, K. Peter et al. // *J Energy Procedia* – 2012. – Vol. 27. – P. 21-26.
- 32 Breitenstein O. Understanding the current-voltage characteristics of industrial crystalline silicon solar cells by considering inhomogeneous current distributions / O. Breitenstein // *Opto-Electronics Review* – 2013. – Vol. 21. – P. 259-282.
- 33 Dynamics of iron-acceptor-pair formation in co-doped silicon / T. Bartel, F. Gibaja, O. Graf et al. // *Appl. Phys. Lett.* – 2013. – Vol. 103 – P. 202109.
- 34 Analysis of the silicon solar cells efficiency. Type of doping and level optimization / A.V. Sachenko, V.P. Kostilyov, M.V. Gerasymenko et al. // *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics.* – 2016. – Vol. 19 – P. 67-74.