

УДК 539.12;537.8  
УКПП 72.19.13-00.00  
№ держреєстрації 0121U111034  
Інв. № \_\_\_\_\_

Міністерство освіти і науки України  
Київський національний університет імені Тараса Шевченка  
01601, м. Київ, вул. Володимирська, 64/13, тел: 239-31-25

ЗАТВЕРДЖУЮ  
Проректор з наукової роботи  
Київського національного університету  
імені Тараса Шевченка  
професор \_\_\_\_\_ Г.М. Толстанова  
«15» грудня 2021 р.

ЗВІТ  
про науково-дослідну роботу  
за договором від 23 квітня 2021 року № 15/02/0036

РОЗРОБКА ФІЗИЧНИХ ЗАСАД АКУСТО-КЕРОВАНОЇ МОДИФІКАЦІЇ ТА  
МАШИННО-ОРІЄНТОВАНОЇ ХАРАКТЕРИЗАЦІЇ КРЕМНІЄВИХ  
СОНЯЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ

грантова підтримка Національного фонду досліджень України  
у межах конкурсу «Підтримка досліджень провідних та молодих учених»

(остаточний)

Науковий керівник НДР  
д-р фіз.-мат. наук, доц.

О.Я. Оліх

2021

Результати роботи розглянуто Науково-технічною радою Київського  
національного університету імені Тараса Шевченка, протокол від  
09 грудня 2021 р. №

## СПИСОК АВТОРІВ

<p><b>Науковий керівник, професор, докт. фіз.-мат. наук, доцент</b></p> <p><b>Завідувач лабораторії, докт. фіз.-мат. наук, професор</b></p> <p><b>Наук. співроб., канд. фіз.-мат. наук</b></p> <p><b>Наук. співроб., канд. техн. наук</b></p> <p><b>Аспірант</b></p> <p><b>Аспірант</b></p>	<p><b>О.Я. Оліх</b>  <b>(вступ, висновки, реферат, розділ 1, підрозділи 2.2, 2.4- 2.7, рекомендації)</b></p> <p><b>В.П. Костильов</b>  <b>(підрозділи 2.2, 2.6, 2.7, висновки, рекомендації, Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України)</b></p> <p><b>В.М. Власюк</b>  <b>(підрозділи 2.1, 2.4, 2.5; Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України)</b></p> <p><b>Р.М. Коркішко</b>  <b>(підрозділи 2.1, 2.3, 2.5; Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України)</b></p> <p><b>О.В. Лозицький</b>  <b>(підрозділи 1.2, 1.5, 1.6)</b></p> <p><b>К.О. Майко</b>  <b>(підрозділи 1.3, 1.4)</b></p>
---	---

## РЕФЕРАТ

Звіт про НДР: 132 с., 2 розділи, 39 рис., 16 табл., 2 дод., 117 джерел.

### АКУСТО-ІНДУКОВАНІ ЯВИЩА, ВОЛЬТ-АМПЕРНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ, ГЛІБОКА НЕЙРОННА МЕРЕЖА, КРЕМНІЙ, ПАРА FeB, ПЕРЕБУДОВА ДЕФЕКТІВ, РЕКОМБІНАЦІЙНІ ЦЕНТРИ, СОНЯЧНІ ЕЛЕМЕНТИ, УЛЬТРАЗВУК

Об'єкт дослідження – процеси перенесення заряду в кремнієвих сонячних елементах з різним станом дефектів, пов'язаних з атомами заліза; процеси трансформації залізо-вмісних дефектів в умовах ультразвукового навантаження.

Мета роботи – розробка, налаштування та тренування нейронної мережі, орієнтованої на оцінку концентрації домішкового заліза в кремнієвих  $n^+ \text{-} p \text{-} p^+$  структурах за величиною фактору неідеальності; встановлення характеристик впливу розпаду пар FeB на фотоелектричні параметри кремнієвих сонячних елементів; виявлення фізичних закономірностей перетворення пар FeB в умовах ультразвукового навантаження.

Методи дослідження – моделювання вольт-амперних характеристик, гратковий та випадковий пошук при налаштуванні штучної нейронної мережі, вимірювання вольт-амперних характеристик та кінетики струму короткого замикання, динамічне ультразвукове навантаження.

Вперше розроблена глибока нейронна мережа, призначена для передбачення концентрації рекомбінаційно активних домішок в кремнієвих  $n^+ \text{-} p \text{-} p^+$  структурах за величинами фактору неідеальності, рівня легування та товщини бази і температури. Проведено налаштування відповідної мережі, визначено оптимальні значення гіперпараметрів. Показана можливість розробленої нейронної мережі визначати концентрацію заліза в кремнієвих сонячних елементах, спираючись як на синтетичні, так і експериментально виміряні вольт-амперні характеристики. Виявлено, що в кремнієвих сонячних елементах найбільш чутливими до розпаду пар залізо-бор є струм короткого замикання та максимальна вихідна потужність; запропоновано підхід до оцінки концентрації заліза за величинами відносних змін вказаних параметрів. Вперше виявлено акустокеровані ефекти зменшення частки пар FeB, які дисоціювали внаслідок освітлення, та зменшення енергії міграції атомів заліза в кремнієвих сонячних елементах. Показано, що ефективність ультразвукового (частота 0,3-30 МГц, інтенсивність до 2 Вт/см<sup>2</sup>) впливу на енергію міграції зростає при підвищенні температури, тоді як частотна залежність визначається типом коливань.

Запропоновано принципові засади методу акустостимульованої деактивації дефектів, пов'язаних з атомами заліза, у монокристалічних кремнієвих сонячних елементах та експрес-методу оцінки концентрації електрично-активних центрів у кремнієвих бар'єрних структурах.

## ABSTRACT

Report SRW: 132 p., 2 chap., 39 fig., 16 tables, 2 app., 117 sour.

### ACOUSTO-INDUCED PHENOMENA, CURRENT-VOLTAGE CHARACTERISTICS, DEEP NEURAL NETWORK, REBUILDING OF DEFECTS, RECOMBINATION CENTERS, SILICON, SOLAR CELLS, ULTRASOUND

Research object – the processes of charge transfer in silicon solar cells with different states of iron-related defects; transformation of iron-related defects in the case of ultrasonic loading conditions.

Purpose of work – the developing, tuning, and training of a neural network assigned for estimating of iron concentration in silicon  $n^+ \text{-} p \text{-} p^+$  structures by ideality factor; the revealing of characteristics of FeB pair dissociation influence on the photoelectric parameters of silicon solar cells; the determination of physical features of FeB pair transformation under ultrasonic loading conditions.

Research methods – modeling of current-voltage characteristics, tuning of an artificial neural network with help of both the lattice and random search, measurement of current-voltage characteristics, and short-circuit current kinetics, dynamic ultrasound loading.

For the first time, the deep neural network, which can predict the concentration of recombinantly active impurities in silicon  $n^+ \text{-} p \text{-} p^+$  structures by the ideality factor, temperature, base thickness and doping level, has been developed. The network was tuned and the optimal values of hyperparameters were determined. The ability of the developed neural network to estimate the iron concentration in silicon solar cells from the synthetic as well as experimental current-voltage characteristics has been shown. It was revealed that the short-circuit current and the maximum output power are the most sensitive to the dissociation of iron-boron pairs in silicon solar cells; the method for estimating iron concentration using relative changes in those parameters has been proposed. For the first time, the acoustically driven decreases in the portion of FeB pairs that dissociate under the action of light as well as the decrease in Fe ion migration energies have been found in silicon solar cells. It has been shown that the efficiency of ultrasound (frequency 0.3-30 MHz, intensity up to  $2 \text{ W/cm}^2$ ) influence on the migration energy increases with temperature increasing, whereas the frequency dependence is determined by the oscillation type.

The basic principles of the method of acoustically stimulated deactivation of iron-related defects in single crystalline silicon solar cells as well as the express method of estimating the concentration of electrically active centers in silicon barrier structures are proposed.

## ЗМІСТ

Скорочення.....	7
Вступ.....	8
1 Розробка зasad експрес-методу кількісної оцінки електрично-активних дефектів у бар'єрних структурах за величиною фактору неідеальності на прикладі домішкового заліза в кремнієвих сонячних елементах.....	14
1.1 Основні характеристики розрахункової моделі кремнієвої $n^+ \text{-} p \text{-} p^+$ структури .....	15
1.2 Моделювання вольт-амперних характеристик кремнієвих $n^+ \text{-} p \text{-} p^+$ структур з різними товщинами, ступенем легування та концентрацією домішки.....	20
1.3 Вплив параметрів $n^+ \text{-} p \text{-} p^+$ структури на величину фактору неідеальності .....	23
1.4 Налаштування штучної нейронної мережі.....	29
1.5 Навчання та тестування нейронних мереж за допомогою синтетичних даних.....	34
1.6 Тестування нейронних мереж на експериментально вимірюваних ВАХ та аналіз застосовності натренованих мереж до різних за типом КСЕ.....	41
1.7 Основні результати розділу 1.....	47
2 Розробка фізичних зasad методу акустостимулюваної деактивації дефектів, пов'язаних з атомами металів, у монокристалічних кремнієвих сонячних елементах .....	49

2.1	Експериментальний стенд для оцінювання кінетичних характеристик перебудови дефектів у бар'єрних структурах в умовах ультразвукового навантаження.....	50
2.2	Методика екстрагування параметрів дефектів, пов'язаних із залізом .....	57
2.3	Кількісні параметри впливу світло-індукованого розпаду пар Fe-B на характеристики кремнієвих сонячних елементів	65
2.4	Закономірності впливу акустичних хвиль на процес світло-індукованої деградації кремнієвих сонячних елементів.....	76
2.5	Закономірності кінетичних характеристик зміни параметрів кремнієвих сонячних елементів внаслідок відновлення пар Fe-B в умовах ультразвукового навантаження.....	82
2.6	Можливі механізми взаємодії залізовмісних дефектних комплексів у КСЕ з акустичними хвилями та шляхи практичного використання ультразвукового навантаження..	88
2.7	Основні результати розділу 2.....	101
	Висновки.....	104
	Рекомендації.....	107
	Перелік джерел посилання.....	109
	Додаток А Перелік підготованих доповідей на конференції.....	123
	Додаток Б Перелік підготованих наукових праць.....	126

## СКОРОЧЕННЯ

AX	—	Акустична хвиля
AI	—	акустоіндукований
ВАХ	—	вольт-амперна характеристика
ГНМ	—	глибока нейронна мережа
КСЕ	—	кремнієвий сонячний елемент
ОПЗ	—	область просторового заряду
ПІД	—	пропорційно-інтегрально-диференціальний
СКЗ	—	струм короткого замикання
ШРХ	—	Шоклі-Ріда-Хола
УЗ	—	ультразвук
УЗН	—	ультразвукове навантаження
BSF	—	back surface field, поле задньої поверхні
CSV	—	comma separated value; дані, розділені комами
DUT	—	device under test, пристрій, що досліджується
MSRE	—	mean squared relative error, середня відносна квадратична похибка
PERC	—	passivated emitter and rear cell, елементи з пасивованим емітером та тиловою поверхнею
REDR	—	recombination-enhanced defect reaction, рекомбінаційно-підсилена реакція дефектів
SRE	—	squared relative error, відносна квадратична похибка

## ВСТУП

Для сучасної цивілізації використання відновлюваних джерел енергії є життєво необхідним. Серед різноманітних технологій, спрямованих на вирішення цього завдання, особливе місце займає безпосереднє перетворення сонячного випромінювання на електроенергію. Унікальність такого підходу пов'язана, насамперед, з можливістю задоволення енергетичних потреб без хімічного та теплового забруднення навколошнього середовища, при цьому генерація енергії може відбуватися безпосередньо в околі місця споживання. Як наслідок, на сьогодні сонячна фотовольтаїка характеризується найшвидшими темпами зростанням серед усіх енергетичних технологій у світі.

У 2020 році понад 90% з більше ніж 855 ТВт·год електроенергії, яка була вироблена внаслідок застосування фотовольтаїчних перетворювачів (а це 3,2% загальносвітового виробництва електроенергії), припадає на кремнієві сонячні елементи (КСЕ). Ці системи створюються з використанням аморфного, полікристалічного чи монокристалічного кремнію, причому частка останніх зараз складає близько 84% (у 2019 – 66%). Як і для інших напівпровідникових пристройів, одним з визначальних чинників властивостей КСЕ є система дефектів, зокрема, їхній домішковий склад. Взаємозв'язок між характеристиками сонячних елементів та наявними дефектами досліджується дуже активно. Зокрема, можна виділити роботи В. Маркевича (Університет Манчестера, Великобританія) та проф. Х. Лу (Бохайський університет Китай). Зауважимо, що з метою здешевлення кінцевої продукції для створення КСЕ переважно використовуються кристали відносно невисокої чистоти і металеві домішки є достатньо типовими для подібних систем. Як наслідок, у світі поширені дослідження щодо впливу різноманітних металевих домішок на характеристики сонячних елементів. Зокрема значна увага приділена атомам алюмінію (Ш. Ян, Х. Ю, К. Фенг, Жейянгський університет, Гонконг) чи нікелю (Ташкентський державний технічний університет, Узбекистан, М.К. Бахадирханов, С.Б. Ісамов, З.Т. Кенжаев, С.В. Ковешніков). Проте

однією з найпоширеніших і водночас з найшкідливіших домішок є атоми заліза. Протягом останніх років активно розвиваються наукові дослідження, спрямовані як на виокремлення ролі саме залізовмісних дефектів у впливі на властивості КСЕ, зокрема параметри вольт-амперних характеристик (ВАХ). Так можна виділити роботи, де експериментально проаналізовано взаємозв'язок концентрації заліза з величиною часу життя неосновних носіїв заряду (І.Гордон, Університет Дебрецена, Угорщина), величиною фактору неідеальності (Дж. Бодунрін, Д. Оеба, С. Молої, Університет Південної Африки, Преторія, Південна Африка), а також теоретичну роботу Я. Шмідта (Інститут досліджень сонячної енергетики, Хамелн, Німеччина), спрямовану на аналіз впливу розпаду пари залізо-бор на параметри фотоелектричного перетворення КСЕ. Водночас результати експериментального дослідження впливу стану подібного комплексу на характеристики реальних КСЕ відсутні. Чимало зусиль науковців спрямовані також на розробку та реалізацію технологічних методів, що мають на меті переведення подібних дефектів у електрично-неактивний стан, зокрема внаслідок їхнього гетерування. При цьому розробляються або додаткові технологічні операції (як це зроблено, наприклад в роботах Х. Талвітіє та А. Хаарахілтунен, Технологічний університет Гельсінкі, Фінляндія), або досліджуються можливості преципітації домішкового заліза під час технологічних операцій, застосовних при стандартному виготовленні КСЕ. Наприклад, показано що деактивація цих дефектів можлива під час дифузії фосфору, як імплантованого у кремній (В. Вяхяніссі, А. Хаарахілтунен, Х. Савін, Університет Аалто, Еспо, Фінляндія), так і нанесеного розпиленням (Д. Вебер, Т. Мчедлідзе, Технічний Університет Дрездена, Німеччина). Останні автори також показали, що деактивація можлива і під час створення антивідбиваючого покриття. Таким чином очевидно, що питання розуміння поведінки дефектів (зокрема, залізовмісних) та керування їхнім станом мають фундаментальне значення для покращення експлуатаційних характеристик КСЕ.

З іншого боку, процеси гетерування атомів заліза визначаються їхньою

дифузійною здатністю і збільшення цього параметру в ультразвуковому полі під час вказаних вище технологічних операцій має підвищити ефективність деактивації дефектів. Проте дослідження щодо впливу пружних коливань на рух атомів заліза в літературі відсутні. Водночас, дослідження С. Остапенка та Р. Бела (Центр мікроелектронних досліджень, Тампа, США) показали, що ультразвук може бути причиною розпаду пар будови дефектних комплексів, пов'язаних з домішкових залізом, тобто цей дефект є акустоактивним. Крім того, певними передумовами робіт, запланованих у Проєкті, є відоме покращення ефективності інших технологічних операцій у випадках, коли вони відбуваються в акустичному полі. Мова насамперед, йде про процеси іонної імплантації, що широко відображені в роботах Б.М. Романюка та В.П. Мельника (Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України). Узагальнюючи зазначимо, що особливістю даного проєкту є те, що він передбачає з'ясування фізичних особливостей та механізмів впливу ультразвукового навантаження на процеси перебудови дефектних комплексів, ініційовані іншим активаційним чинником (освітленням) чи викликані прагненням системи повернутися до стану термодинамічної рівноваги. Тобто, проєкт орієнтований на розробку фізичних зasad методу, що базується на використанні комплексних процесів, де ультразвуку відведена роль додаткового чинника та певного фактору коригування.

Неруйнівні методи, що мають на меті оцінку концентрації домішок (наприклад, заліза) у напівпровідникових структурах, зокрема в КСЕ, мають важливе значення з прикладної точки зору. На сьогодні розроблено чимало як прямих, так і непрямих методів, що дозволяють вирішити подібне завдання. Проте практично всі вони вимагають чи спеціальної підготовки об'єктів для досліджень, чи спеціалізованого обладнання. Водночас, чи не найпоширенішим методом характеризації сонячних елементів є вимірювання ВАХ і тому сучасні наукові дослідження спрямовуються на розробку методів характеризації дефектів, які спираються на аналіз саме цих характеристик. Так К. Клейс та Е. Сімоен (Левенський католицький університет, Левен, Бельгія)

запропонували використовувати температурну залежність компонент струму, С. Булярський (Інститут нанотехнологій мікроелектроніки, Москва, Росія) – диференціальні коефіцієнти ВАХ. Проте ці підходи вимагають вимірювання багаточисленних ВАХ чи висувають високі вимоги до точності апаратури, відповідно. У наших попередніх роботах була показана принципова можливість оцінки концентрації заліза за величиною фактору неідеальності, який безпосередньо може бути визначений в результаті вимірювання ВАХ. Проте однією з найголовніших перепон на шляху розробки подібного зручного для використання та експресного методу є багатопараметричність взаємозв'язку концентрації рекомбінаційних центрів та параметрів ВАХ. Цей проект передбачав подолання цієї перешкоди завдяки використанню методів глибокого навчання, які саме і орієнтовані на вирішення задач, де не передбачається можливість чіткої алгоритмізації. Так І. Чірак (Інститут квантової оптики ім. Макса Планка, Гархінг-бай-Мюнхен, Німеччина) показав, що методи машинного навчання застосовні до багатьох фізичних проблем. У тому числі глибокі нейронні мережі використовуються, наприклад, у роботах Ш. Джу, Ш. Сімідзу та Д. Шіомі (Університет Токіо, Японія) та А. Джайн (Стенфордський університет, США) для визначення транспортних властивостей матеріалів, у роботах Д. Бігмастер, А. Хамедані (Університет Гельсінкі, Фінляндія) для опису радіаційного дефектоутворення, М. Комін, Л.Д. Левіс (Монреальський університет, Канада) для моделювання структури аморфного кремнію чи С. Родрігес, Х. Рамос (Університет Лісабону, Португалія) та В. Венугопала, Ю. Сан, А.Р. Брандта (Стенфордський університет, США) для передбачення поведінки сонячних елементів. Новизна розвинутого у роботі підходу пов'язана з використання величини фактору неідеальності як кількісного показника концентрації заліза та застосування глибоких нейронних мереж для встановлення їхнього взаємозв'язку.

Метою цього проекту є розробка фізичних зasad методу акустостимульованої деактивації дефектів, пов'язаних з атомами перехідних металів, у монокристалічних кремнієвих сонячних елементах з метою

покращення експлуатаційних характеристик (ефективності, світлодеградаційної стійкості) та експрес-методу оцінки концентрації електрично-активних центрів у кремнієвих бар'єрних структурах на основі вимірювання вольт-амперних характеристик з використанням методів глибокого навчання. При цьому було передбачена необхідність вирішення наступних завдань: а) розробка методики оцінювання кінетичних характеристик перебудови дефектів у бар'єрних структурах в умовах ультразвукового навантаження; б) встановлення фізичних закономірностей та механізмів впливу акустичних хвиль на процес перебудови дефектних комплексів, пов'язаних із атомами переходних металів, у КСЕ залежно від температури, інтенсивності та типу коливань; в) шляхом моделювання з'ясування впливу геометричних особливостей, ступеню легування та наявності різних типів дефектів на особливості формування вольт-амперних характеристик типових кремнієвих сонячних елементів в широкому температурному діапазоні; г) використовуючи методи глибокого навчання, встановлення взаємозв'язок між величиною фактору неідеальності та концентрацією рекомбінаційних центрів; запропонувати метод кількісної оцінки електрично-активних дефектів у бар'єрних структурах за величиною фактору неідеальності; д) підготувати 3 доповіді на конференції міжнародного рівня та 2 статті для журналів первого та другого квартилів. Поставлені завдання були вирішенні, що і відображає зміст наступних частин звіту.

Можливі сфери застосування отримання результатів наступні. Встановлені фізичні закономірності впливу ультразвукового навантаження на процеси перебудови домішкових центрів, пов'язаних з атомами переходних металів, можуть бути використані для модифікації стандартних технологічних операцій, що використовуються при створенні кремнієвих сонячних елементів, з метою деактивації вказаних дефектів. Визначені особливості акусто-дефектної взаємодії дозволять налаштовувати параметри ультразвукового впливу задля отримання найбільшої ефективності контролюваної модифікації дефектної підсистеми. Крім того, отримані результати можуть стати основою

для розробки методів акустичної інженерії дефектів у напівпровідниковоих пристроях. З'ясовані кількісні характеристики взаємозв'язку величини фактору неідеальності та концентрації рекомбінаційних центрів можуть бути покладені в основу експрес-методу оцінки домішкового складу реальних сонячних елементів. Налаштована штучна нейронна мережа може бути безпосередньо використана для оцінки концентрації атомів заліза в кремнієвих  $n^+ - p - p^+$  структурах, де вказані дефекти є основними рекомбінаційними центрами.

Проведені під час виконання проєкту дослідження є логічним продовження науково-дослідницької діяльності авторів проєкту, що детально відображені у їхній бібліографії.

Під час виконання проєкту було підготовлено 2 проміжних звіти. А саме

1. «НАУКОВИЙ ЗВІТ ПРО ПРОМІЖНІ РЕЗУЛЬТАТИ РЕАЛІЗАЦІЇ ПРОЄКТУ 2020.02/0036 за договором № 180/02.2020 від 05 листопада 2020 року РОЗРОБКА ФІЗИЧНИХ ЗАСАД АКУСТО-КЕРОВАНОЇ МОДИФІКАЦІЇ ТА МАШИННО-ОРІЄНТОВАНОЇ ХАРАКТЕРИЗАЦІЇ КРЕМНІЄВИХ СОНЯЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ (проміжний)»;
2. «ЗВІТ про науково-дослідну роботу за договором від 23 квітня 2021 року № 15/02/0036 РОЗРОБКА ФІЗИЧНИХ ЗАСАД АКУСТО-КЕРОВАНОЇ МОДИФІКАЦІЇ ТА МАШИННО-ОРІЄНТОВАНОЇ ХАРАКТЕРИЗАЦІЇ КРЕМНІЄВИХ СОНЯЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ грантова підтримка Національного фонду досліджень України у межах конкурсу «Підтримка досліджень провідних та молодих учених» (проміжний) Етап 1. Створення методики оцінювання кінетичних характеристик ВАХ в умовах ультразвукового навантаження та штучної нейронної мережі для оцінки концентрації заліза в КСЕ».

# 1 РОЗРОБКА ЗАСАД ЕКСПРЕС-МЕТОДУ КІЛЬКІСНОЇ ОЦІНКИ ЕЛЕКТРИЧНО-АКТИВНИХ ДЕФЕКТІВ У БАР'ЄРНИХ СТРУКТУРАХ ЗА ВЕЛИЧИНОЮ ФАКТОРУ НЕІДЕАЛЬНОСТІ НА ПРИКЛАДІ ДОМІШКОВОГО ЗАЛІЗА В КРЕМНІЄВИХ СОНЯЧНИХ ЕЛЕМЕНТАХ

Неруйнівні методи, що мають на меті оцінку концентрації домішок у напівпровідникових структурах, зокрема в кремнієвих сонячних елементах, мають важливе значення з прикладної точки зору. На сьогодні розроблено чимало як прямих, так і непрямих методів, що дозволяють вирішити подібне завдання. Проте практично всі вони вимагають чи спеціальної підготовки об'єктів для досліджень, чи спеціалізованого обладнання. Водночас, чи не найпоширенішим методом характеризації сонячних елементів є вимірювання ВАХ. Одним з параметрів, які швидко визначаються з ВАХ, є фактор неідеальності ( $n$ ). У літературі показано, що ця величина досить часто використовується для характеристики різних напівпровідниківих бар'єрних структур [1,2,3,4,5]. У нашій попередній роботі [6] було показано, що значення коефіцієнта неідеальності може бути використано для оцінки концентрації заліза ( $N_{Fe}$ ) в кремнієвих сонячних елементах. Це відкриває перспективи для розробки швидкого методу кількісної оцінки електрично-активних дефектів, що може бути органічним доповненням вимірювання ВАХ. Проте вплив дефектів на величину фактору неідеальності нерідко маскується впливом багатьох інших фізичних процесів; в результаті отримані аналітичні вирази  $N_{Fe} = f(n)$  не є загальними та для визначення  $N_{Fe}$  потрібні численні калібрувальні криві; крім того, для підвищення точності необхідні вимірювання ВАХ в певному температурному діапазоні [6]. З іншого боку, в останнє десятиліття у різних областях теоретичної та прикладної фізики [7,8,9] почали широко використовуватися методи глибокого навчання, які дозволяють вирішити проблеми без чіткої алгоритмізації. Ця робота спрямована на застосування глибоких нейронних мереж (ГНМ) для подолання проблеми

багатопараметричності взаємозв'язку  $N_{Fe}$  та  $n$  при прогнозуванні концентрації заліза на основі значення коефіцієнта ідеальності (так би мовити, «глибоке навчання для глибоких рівнів»).

Водночас, навчання та тренування штучних нейронних мереж вимагають великої кількості розміщених даних. Очевидно, що подібний набір з експериментальних ВАХ був би найкращим, але практично неможливо підібрати тисячі зразків КСЕ з необхідними параметрами і провести безпосереднє визначення як концентрації заліза, так і величини фактору неідеальності. Іншим шляхом для отримання розміщених даних є моделювання відповідних структур. Тому в даній роботі можна виділити наступні складові 1) моделювання ВАХ для КСЕ з різними параметрами та різними значеннями концентрації заліза; 2) апроксимація отриманих ВАХ з метою визначення величини фактору неідеальності і створення таким чином тренувального та тестового набору розміщених даних; 3) налаштування та тренування штучної нейронної мережі; 4) тестування ГНМ з використанням синтетичних та експериментальних ВАХ. Реалізація вказаних пунктів описана в наступних розділах.

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

В якості наближення до практичного використання у роботі розглядалася система, яка складається з кристалічної кремнієвої  $n^+ \text{-} p \text{-} p^+$  структури (так звана система з полем задньої поверхні (BSF, back surface field)), що містить домішкове залізо, яке вважається основним рекомбінаційним центром. Незважаючи на певну спрощеність, така система має велике практичне значення. Так само кремнієві сонячні елементи забезпечують близько 90% поточного виробництва сонячної енергії у світові [10], а BSF-система є однією з найпопулярніших конструкцій, що використовуються як для промислового виробництва КСЕ, так і моделювання

[11,12]. Залізо ж є основною, а також однією з найбільш шкідливих металевих домішок у КСЕ [13,14].

Розрахунки проводилися для структури, геометрія якої 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 BSF товщиною  $d_{SBF}$ . Вважалося, що концентрації легуючих домішок (фосфору та бору) дорівнюють  $N_D$ ,  $N_B$  та  $N_{SBF}$  в емітері, базі та BSF-шарі, відповідно.

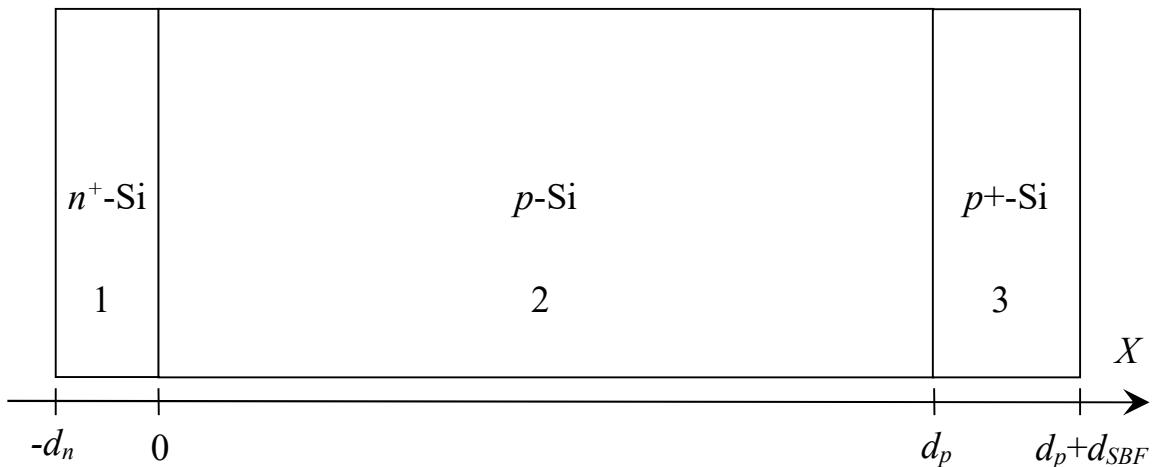


Рисунок 1.1 – Геометрія структури, використаної у розрахунковій моделі. 1 – емітер, 2 – база, 3 – BSF шар

Розрахунки проводилися при різних температурах, тому необхідно було враховувати пов'язані з цим зміни величин параметрів кремнію. Так, ширина забороненої зони обчислювалась за формулою Пасслера [15]

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

де

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

$$\alpha = 3,23 \cdot 10^{-4} \text{ eB/K},$$

$$\Theta = 446 \text{ K},$$

$$\Delta = 0,51.$$

При цьому враховувалось звуження забороненої зони  $\Delta E_G$  внаслідок легування, яке відповідно до даних роботи [16] для  $n$ - та  $p$ -областей має описуватися виразами (1.2) та (1.3) відповідно:

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

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

де значення концентрацій легантів очікуються у  $\text{м}^{-3}$ , а звуження забороненої зони - в  $\text{eB}$ .

При обчисленні теплових швидкостей електронів  $v_{th,n}$  та дірок  $v_{th,p}$  використовувались вирази з роботи [17]; розрахунок ефективної густини станів поблизу дна зони провідності  $N_C$  та ефективної густини станів поблизу стелі валентної зони  $N_V$  відбувався з використанням температурних залежностей ефективних мас густин станів, запропонованих в роботі [18]. Вираз, з останньої роботи також використовувався при оцінці власної концентрації носіїв заряду:

$$n_i(T) = 1,541 \cdot 10^{21} T^{1,712} \exp \left( -\frac{E_G}{2kT} \right). \quad (1.4)$$

Рухливості електронів та дірок обчислювалися за теорією Классена [19], 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 [20].

При розрахунках темпу власної рекомбінації коефіцієнти Оже-рекомбінації дірок та електронів  $C_{p0}$  та  $C_{n0}$  розраховувалися з використанням виразів, наведених в [21]:

$$C_{p0}(T) = (7,91 \cdot 10^{-44} - 4,13 \cdot 10^{-47} T + 3,59 \cdot 10^{-49} T^2) \times \\ \times \left( 1 + \left( 564812 \cdot T^{-1,6545} - 1 \right) \left( 1 - \tanh \left[ \left\{ \frac{p}{5 \cdot 10^{22}} \right\}^{0,29} \right] \right) \right), \quad (1.5)$$

$$C_{n0}(T) = 2,8 \cdot 10^{-43} \times \left( 1 + \left( 235548 \cdot T^{-1,5013} - 1 \right) \left( 1 - \tanh \left[ \left\{ \frac{n}{5 \cdot 10^{22}} \right\}^{0,34} \right] \right) \right). \quad (1.6)$$

В свою чергу, обчислення рекомбінаційного коефіцієнту, пов'язаного з випромінювальними міжзонними переходами, проводилося шляхом апроксимації табличних даних роботи [22] за допомогою поліному 5-го ступеня. Крім того вважалося, що поверхнева швидкість рекомбінації однаакова на обох поверхнях і дорівнює  $10^3$  см/с.

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

$$U_{SRH} = \frac{np - n_i^2}{\tau_{p0}(n + n_1) + \tau_{n0}(p + p_1)}, \quad (1.7)$$

де

$n$  та  $p$  – концентрації електронів та дірок, відповідно, м<sup>-3</sup>;

$$\tau_{n0} = \frac{1}{N_{tr} \sigma_n v_{th,n}}, \quad \tau_{p0} = \frac{1}{N_{tr} \sigma_p v_{th,p}}, \quad (1.9)$$

$N_{tr}$  – концентрація дефектів, м<sup>-3</sup>,

$\sigma_n$  та  $\sigma_p$  – поперечні перерізи захоплення дефектом електронів та дірок, відповідно, м<sup>2</sup>;

$$n_1 = N_c \exp \left( -\frac{E_C - E_{tr}}{kT} \right), \quad p_1 = N_v \exp \left( -\frac{E_{tr} - E_V}{kT} \right), \quad (1.10)$$

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

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

В моделі вважалося, що дефекти в базі та в BSF-шарі пов'язані з домішковими атомами заліза, причому в обох шарах передбачалась однаакова

концентрація  $N_{\text{Fe}}$  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  $N_{\text{Fe}} = N_{\text{Fe},i}$ . На практиці подібний стан реалізується шляхом інтенсивного освітлення сонячного елементу [23] або внаслідок високотемпературної обробки ( $210^{\circ}\text{C}$ , 3 хв) [24]. Надалі цей випадок позначатиметься «Fe».

У другому випадку, який відповідав рівноважному стану неосвітленого сонячного елементу, вважалося, що у кристалі присутні як неспарені міжвузлові атоми заліза, так і пари заміщаючий атом бору – міжвузольний атом заліза  $\text{Fe}_i\text{B}_s$ :  $N_{\text{Fe}} = N_{\text{Fe},i} + N_{\text{FeB}}$  (де  $N_{\text{FeB}}$  – концентрація пар). При цьому розподіл рекомбінаційних центрів є неоднорідним по товщині структури, залежить від положення рівня Фермі  $E_F$  і, відповідно до [25,26], може бути розрахований з використанням наступних співвідношень

$$N_{\text{FeB}} = N_{\text{Fe}} \frac{N_{\text{B}} 10^{-23} \exp\left(\frac{E_b}{kT}\right)}{\left[1 + N_{\text{B}} 10^{-23} \exp\left(\frac{E_b}{kT}\right)\right] \left[1 + \exp\left(\frac{E_F - E_{\text{Fe}}}{kT}\right)\right]}, \quad (1.11)$$

$$N_{\text{Fe},i} = N_{\text{Fe}} - N_{\text{FeB}}, \quad (1.12)$$

де

$E_b = 0,582 \text{ eV}$  – енергія зв'язку пари,

$E_{\text{Fe}}$  – енергія донорного рівня, пов'язаного з міжвузольним залізом. Для позначення цього випадку використовуватиметься скорочення «Fe-FeB».

При розрахунках використовувалися значення параметрів дефектів, наведених в таблиці 1.1.

Таблиця 1.1 – Параметри дефектів, використані у розрахунках [27]

Параметр	Дефект	
	Fe <sub>i</sub>	FeB
$E_{tr}$ , eВ	$E_V + 0,394$	$E_C - 0,26$
$\sigma_n$ , м <sup>2</sup>	$3,47 \cdot 10^{-15} T^{-1,48}$	$5,1 \cdot 10^{-13} T^{-2,5}$
$\sigma_p$ , м <sup>2</sup>	$4,54 \cdot 10^{-20} \exp\left(-\frac{0,05}{kT}\right)$	$3,32 \cdot 10^{-14} \exp\left(-\frac{0,262}{kT}\right)$

1.2 Моделювання 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 одномерного моделювання SCAPS 3.3.08 [28]. Цей пакет широко використовується в літературі для симуляції роботи різноманітних сонячних елементів [29,30,31]. В роботі проводилося моделювання прямої гілки ВАХ в діапазоні напруг 0-0,45 В з кроком 0,01 В. Значення параметрів, які використовувалися під час розрахунків, наведені в таблиці 1.2. Як видно, параметрами, які варіювалися під час моделювання були концентрації бору в базі, її товщина, концентрація домішкового заліза в шарах з дірковою провідністю та температура. Діапазони параметрів вибиралися з умови максимального наближення до реальних елементів. А саме, температурний діапазон 290÷340 К відображає той факт, що фотоперетворювачі в некосмічних умовах використовуються поблизу кімнатних температур, або підвищених, що викликано їхнім перебуванням під прямим сонячним світлом. Для стандартних комерційних кремнієвих сонячних елементів товщина база складає 180 мкм [32] і тому моделювання проводилося для товщин 150÷240 мкм. Так само діапазон ступеня легування  $10^{15} \div 10^{17}$  см<sup>-3</sup> відповідає стандартним фотоперетворювачам. Нарешті, розгляд значень

концентрацій домішкового заліза з інтервалу  $10^{10} \div 10^{13}$  см<sup>-3</sup> зумовлений тим, що, з одного боку, при менших рівнях забруднення залізо практично не впливає на параметри КСЕ [33], а з другого, сучасна технологія виробництва запобігає потраплянню у кремнієві кристали перехідних металів у більшій кількості.

Таблиця 1.2 – Параметри структур  $n^+ \text{-} p \text{-} p^+$ , що використовувалися при моделюванні ВАХ

Параметр	Значення
$d_n$ , мкм	0,5
$d_p$ , мкм	150 $\div$ 240
$d_{SBF}$ , мкм	1
$N_D$ , см <sup>-3</sup>	$10^{19}$
$N_A$ , см <sup>-3</sup>	$10^{15} \div 10^{17}$
$N_{SBF}$ , см <sup>-3</sup>	$5 \cdot 10^{18}$
$N_{Fe}$ , см <sup>-3</sup>	$10^{10} \div 10^{13}$
$T$ , К	290 $\div$ 340

Особливістю SCAPS є те, що він не дозволяє в автоматичному режимі враховувати реальні температурні залежності параметрів як кремнію, так і рекомбінаційних центрів, пов'язаних з домішковими атомами заліза. Як наслідок, виникла необхідність створення окремих файлів даних для роботи SCAPS при обчисленні параметрів кремнієвої  $n^+ \text{-} p \text{-} p^+$  структури для кожного зі значень температури, рівня легування та концентрації домішок. Для автоматизації цього процесу була розроблена спеціальна програма, яку можна знайти за посиланням <https://github.com/olegolikh/SCAPSConversion.git>. Зокрема проводилися розрахунки положення рівня Фермі у структурі без дефектів, а потім отримані результати застосовувалися для оцінки просторового розподілу дефектів різного типу. Приклади таких розрахунків представлені на рис. 1.2.

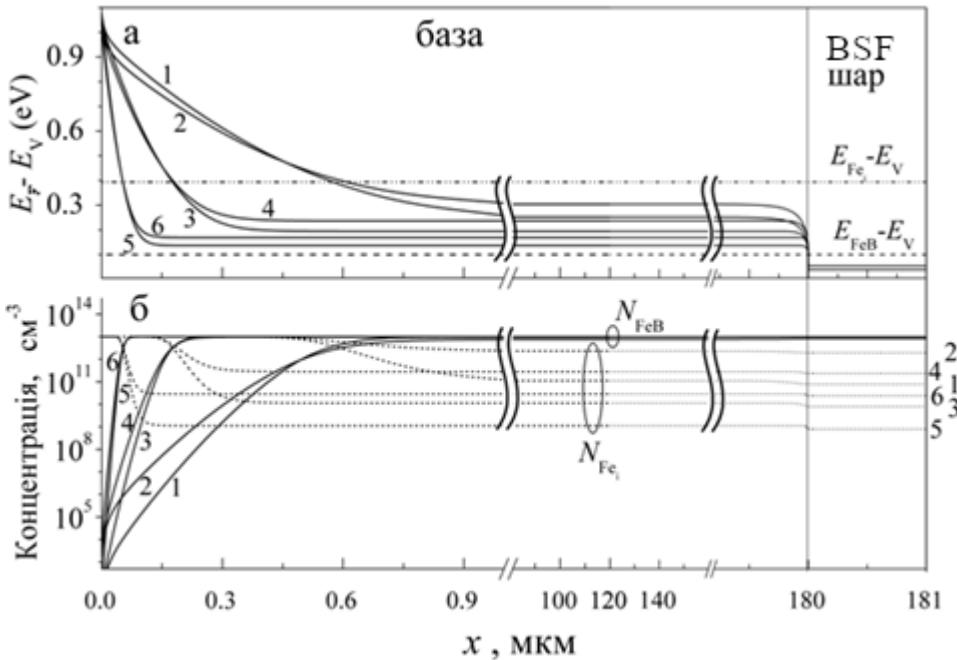


Рисунок 1.2 - Розраховані залежності положення рівня Фермі (а, суцільні лінії), концентрації міжвузольних атомів заліза (б, суцільні лінії) та пар Fe<sub>i</sub>B<sub>s</sub> (б, пунктир) при нульовому зміщенні.  $N_B$ ,  $\text{см}^{-3}$ :  $10^{15}$  (криві 1 та 2),  $10^{16}$  (3 та 4),  $10^{17}$  (5 та 6).  $T$ , К: 290 (1, 3, 5), 340 (2, 4, 6).  $N_{Fe} = 10^{13}$   $\text{см}^{-3}$ .  $d_p = 180$  мкм. В частині (а) показані й положення донорних рівнів, пов'язаних з Fe<sub>i</sub> (штрих-пунктирна лінія) та парою Fe<sub>i</sub>B<sub>s</sub> (пунктир)

Зауважимо, що основною метою даного моделювання є створення бази розмічених даних, які в подальшому використовуються для тренування та тестування ГНМ, орієнтованої на оцінку концентрації домішок за величиною фактору неідеальності КСЕ. У зв'язку з цим отримані в результаті моделювання ВАХ можна розділити на декілька наборів.

Для створення тренувального набору даних були в подальшому використані ВАХ, симульовані з використанням 4 значень товщини бази КСЕ  $d_p$ , 9 значень концентрації бору (легуючої домішки  $p$ -областей)  $N_B$ , 11 значень температури  $T$  та 19 значень концентрації заліза  $N_{Fe}$ , рівномірно розподілених по вказаних у таблиці 2.1 діапазонах (для  $d_p$  і  $T$  використовувалась рівномірність у лінійному масштабі, для  $N_B$  і  $N_{Fe}$  – у логарифмічному). Крім

того, були змодельовані ВАХ для декількох тестових наборів. У набір, який позначено T-varied, увійшли ВАХ, симульовані з використанням значень  $d_p$ ,  $N_B$  та  $N_{Fe}$ , які використовувалися і при створенні тренувального набору та значення температури, які до нього не входять. Подібним чином були створені тестові набори d-varied, Fe-varied та B-varied. При отриманні набору All-varied були використані ВАХ, симульовані з використанням таких значень і товщина бази, і концентрації бору, і температури, і концентрації заліза, які не розглядалися при створенні тренувального набору. Точні значення параметрів для кожного з наборів наведені у Проміжному звіті за 2020 р.

Враховуючи, що розглядалися дві можливі конфігурації дефектної підсистеми та бралися до уваги загальні рекомбінаційні струми чи лише та їхня складова, яка пов'язана з рекомбінацією на дефектах, всього було отримано трохи більше 40 тис. ВАХ. Всі отримані вольт-амперні характеристики можна знайти за адресою <https://github.com/olegolikh/IVcharacteristics.git>.

### 1.3 Вплив параметрів $n^+p-p^+$ структури на величину фактору неідеальності

Останньою частиною підготовки розмічених даних для ГНМ було визначення величин фактору неідеальності для створеного набору ВАХ. Для цього була проведена апроксимація моделюваних ВАХ відповідно до дводіодної моделі сонячного елементу, для якої струм через структуру  $I$  та прикладена до неї напруга  $V$  пов'язані наступним чином [34,35]:

$$I = I_{01} \left[ \exp\left(\frac{q(V - IR_s)}{kT}\right) - 1 \right] + I_{02} \left[ \exp\left(\frac{q(V - IR_s)}{nkT}\right) - 1 \right] + \frac{(V - IR_s)}{R_{SH}}, \quad (1.13)$$

де

$T$  – температура, К,

$I_{01}$  та  $I_{02}$  – струми насиження, пов'язані з процесами рекомбінації у квазінейтральній області та в області просторового заряду (ОПЗ), відповідно, А,

$n$  – фактор неідеальності;

$R_S$  та  $R_{SH}$  – послідовний та шунтуючий опори, відповідно, Ом.

Як видно з (1.13),  $I$  та  $V$  не розділяються, а отже потрібно застосовувати спеціалізовані методи апроксимації та визначення параметрів. Останні роки свою дієздатність при вирішенні подібних оптимізаційних задач довели метаевристичні методи. Зокрема, як показано в літературі [36], для точного та стабільного оцінювання параметрів фотоелектричних перетворювачів в рамках різних моделей може бути використано покращений IJAYA оптимізаційний алгоритм. На відміну від більшості інших алгоритмів, які базуються на використанні популяцій розв'язків, JAYA не передбачає застосування специфічних для алгоритму гіперпараметрів і включає лише два загальні параметри, а саме розмір популяції та кількість поколінь.

В нашому випадку кожен з можливих розв'язків є 5-мірним, так як необхідно визначити п'ять параметрів:  $I_{01}$ ,  $I_{02}$ ,  $n$ ,  $R_S$  та  $R_{SH}$ . Розмір популяції (загальна кількість розв'язків) було вибрано 24 (величина, в чотири рази більша ніж збільшена на одиницю кількість невідомих параметрів [36]). Як цільова функція була використана відносна квадратична похибка

$$f(\vec{x}) = \sum_k \left\{ 1 - \frac{I_{01}}{I_k} \left[ \exp\left(\frac{q(V_k - IR_S)}{kT}\right) - 1 \right] + \frac{I_{02}}{I_k} \left[ \exp\left(\frac{q(V - IR_S)}{nkT}\right) - 1 \right] + \frac{(V - IR_S)}{I_k R_{SH}} \right\}^2,$$

де сумування відбувається по точках ВАХ.

Як показали дослідження, в нашому випадку достатня кількість поколінь для збіжності методу – 3000. Параметри першого покоління ініціюються випадковим чином з заданого інтервалу, який для  $n$  було вибрано [1,2], для  $I_{01} - [10^{-15}, 10^{-4}]$  А,  $I_{02} - [10^{-18}, 10^{-7}]$  А,  $R_S - [10^{-5}, 10]$  Ом та  $R_{SH} - [10^5, 10^{20}]$  Ом.

Метод IJAYA був реалізований на мові програмування Delphi. Програму (відкомпільований варіант та вихідні файли Delphi-проєкту) можна знайти за посиланням <https://github.com/olegolikh/IVcharacteristics/tree/main/Progr>.

Використовуючи розроблену програму було апроксимовано більше 40 тис. попередньо симульованих ВАХ. Зауважимо, що, як показали розрахунки, для симульованих ВАХ можна знектувати як впливом послідовного, так і

шунтуючого опорів (отримані в результаті апроксимації значення для  $R_S$  менші  $10^{-2}$  Ом, а для  $R_{SH}$  – більші  $10^{18}$  Ом). Отримані значення фактору неідеальності разом зі значеннями товщини бази, рівня легування бази, концентрації домішкового заліза та температури, для яких розрахувалась відповідна характеристика, можна знайти за адресою <https://github.com/olegolikh/IVcharacteristics> у файлах CSV-формату.

Також проведено аналіз взаємозв'язку параметрів КСЕ та фактору неідеальності [37]. У представлених далі результатах використовуються наступні позначення для фактору неідеальності, отриманого для різних випадків:  $n_{Fe}^{SRH}$  – «Fe» випадок і врахування тільки ШРХ-рекомбінації,  $n_{Fe}$  – «Fe» випадок і всі рекомбінаційні механізми,  $\delta n_{Fe}^{SRH} = n_{Fe}^{SRH} - n_{Fe}$  – величина, що характеризує вплив власної рекомбінації на фактор неідеальності; відповідні позначення для випадку «Fe-FeB» –  $n_{Fe-FeB}^{SRH}$ ,  $n_{Fe-FeB}$  та  $\delta n_{Fe-FeB}^{SRH} = n_{Fe-FeB}^{SRH} - n_{Fe-FeB}$ . Крім того, була розрахована також величина зміни фактору неідеальності після часткової асоціації пар  $\delta n_{Fe-Fe-FeB} = n_{Fe} - n_{Fe-FeB}$ .

На рис. 1.3-1.5 зображені типові залежності фактору неідеальності від температури, концентрації домішкового заліза  $N_{Fe}$  та концентрації легуючої домішко бору  $N_B$  при різних значеннях товщини бази КСЕ  $d_p$ .

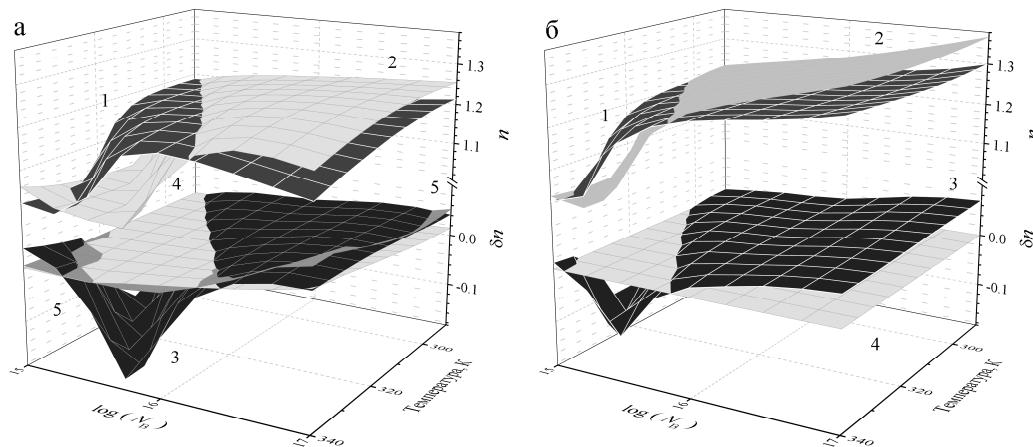


Рисунок 1.3 – Залежність фактору неідеальності від температури та концентрації бору.  $N_{Fe}$ ,  $\text{см}^{-3}$ :  $10^{10}$  (а),  $10^{13}$  (б).  $d_p=240$  мкм. Поверхня 1 –  $n_{Fe-FeB}$ , 2 -  $n_{Fe}$ , 3 -  $\delta n_{Fe-Fe-FeB}$ , 4 -  $\delta n_{Fe-FeB}^{SRH}$ , 5 -  $\delta n_{Fe}^{SRH}$

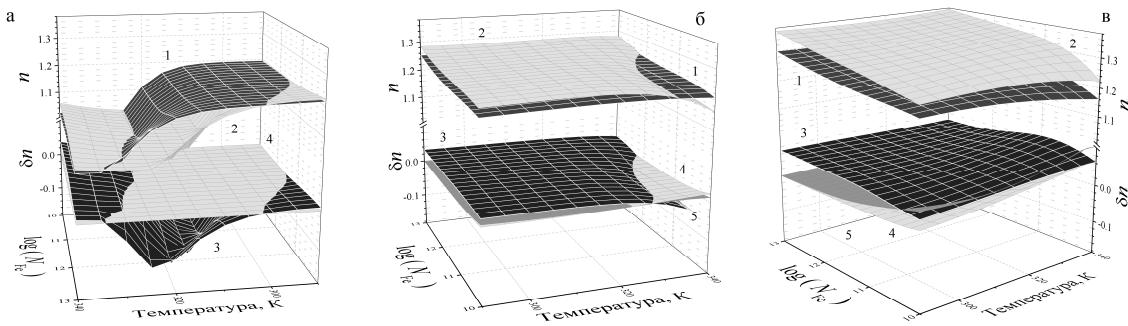


Рисунок 1.4 – Залежність фактору неідеальності від температури та концентрації заліза.  $N_B$ ,  $\text{см}^{-3}$ :  $10^{15}$  (а),  $10^{16}$  (б),  $10^{17}$  (в).  $d_p=150$  мкм. Позначення поверхонь такі ж як на рис. 1.3

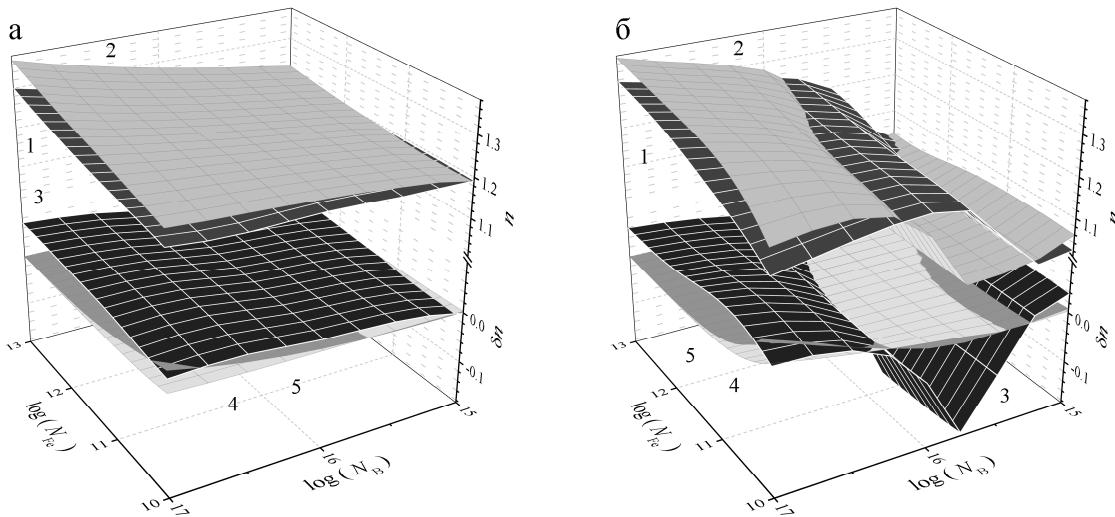


Рисунок 1.5 – Залежність фактору неідеальності від концентрацій заліза та бору.  $T$ , К: 290 (а), 340 (б).  $d_p=180$  мкм. Позначення поверхонь такі ж як на рис. 1.3

Виявлено, що, по-перше, міжузольні атоми заліза відіграють переважаючу роль в рекомбінації навіть якщо в глибині КСЕ присутні як  $\text{Fe}_i$ , так і пари  $\text{FeB}$ . Дійсно, донорний рівень пари в наших структурах розташовано нижче рівня Фермі, а отже ймовірність захоплення ним нерівноважного електрону дуже мала. Крім того, фактор неідеальності переважно визначається рекомбінацією в ОПЗ, а концентрація  $\text{Fe}_i$  переважає концентрацію  $\text{FeB}$  в 2/3 товщини цієї області. Це підтверджується подібністю залежностей  $n_{\text{Fe-FeB}}$  (поверхня 1) та  $n_{\text{Fe}}$  (поверхня 2) на рис. 1.3-1.5. По-друге, абсолютна

концентрація неспарених атомів заліза може бути достатньо великою навіть у випадку співіснування обох типів дефектів і вона підвищується при зростанні температури та зменшення рівня легування. Наприклад, розрахунки показують, що концентрація  $Fe_i$  в квазі-нейтральній області складає 23 (або 3)%  $N_{Fe}$  при 340 К та  $N_B=10^{15}$  см<sup>-3</sup> (або 10<sup>16</sup> см<sup>-3</sup>). А отже за цих умов, концентрація неспарених атомів заліза в рівновазі та при  $N_{Fe}=10^{13}$  см<sup>-3</sup> перевищує відповідну величину після освітлення при  $N_{Fe}=10^{11}$  см<sup>-3</sup>.

При аналізі залежності фактору неідеальності від температури та концентрації бору необхідно врахувати наступне.

1) Присутність дірки на рівні  $E_{Fe}$ , пов'язаному з  $Fe_i$ , яка визначає ефективність рекомбінації. Згідно зі статистикою Фермі-Дірака, ймовірність діркової заселеності  $f_p$  в невиродженному напівпровіднику  $p$ -типу в режимі виснаження акцептора може бути записана у вигляді

$$f_p = \frac{1}{1 + \frac{N_V}{N_B} \exp\left(\frac{E_V - E_{Fe}}{kT}\right)}. \quad (1.14)$$

Як було показано раніше [6], залежність  $f_p (T, N_B)$  загалом схожа, на ту, що отримана для фактору неідеальності. Зокрема, якщо  $f_p$  близька до одиниці (високий рівень легування та низькі температури), залежність  $n$  слабка і ця величина є температуро незалежною, слабко зростаючи зі зменшенням  $N_B$  – див. рис. 1.4б,в, 1.5в. Якщо  $N_B$  зменшується та (або) зростає  $T$ , рівень заповнюється електроном в достатньо вузькому діапазоні параметрів, рекомбінація ШРХ послаблюється і фактор неідеальності різко спадає – див. рис. 1.3, 1.4а, 1.5б.

2) Співвідношення між власною рекомбінацією та рекомбінацією на дефектах. Рекомбінація ШРХ викликає збільшення фактору неідеальності. В свою чергу, власна рекомбінація підсилюється при збільшенні як концентрації вільних носіїв заряду, так і температури ([21,22], формули (1.5),(1.6)). В цьому випадку фактор неідеальності зменшується і величини  $\delta n_{Fe}^{SRH}$  та  $\delta n_{Fe-FeB}^{SRH}$  стають відмінними від нуля – див. рис. 1.3а, 1.4б,в, 1.5.

Зміна концентрації заліза майже не впливає на характер залежностей  $n$  від інших параметрів. Проте зростання  $N_{\text{Fe}}$  супроводжується збільшенням величини  $n$  (див. рис. 1.4, 1.5), яке є фактично лінійним відносно  $\ln(N_{\text{Fe}})$ . Відхилення спостерігаються лише у випадку, коли рівень міжузольного заліза заповнений електроном ( $n < 1,06$ ). Водночас, внесок власної рекомбінації збільшується при низьких концентраціях заліза (за сталості інших параметрів), що викликає різке зменшення величини фактору неідеальності – рис. 1.5б,в.

Також виявлено залежність величини  $n$  від товщини бази  $n^+ \text{-} p \text{-} p^+$  структури, яка для «Fe» та «Fe-FeB» випадків задовільно описується лінійною функцією:

$$n = n_0 - \beta d_p, \quad (1.15)$$

де

$\beta$  – товщинний коефіцієнт,  $\text{мкм}^{-1}$ . Тобто, процеси у квазінейтральній області також впливають на фактор неідеальності. Виявлено, що максимальний вплив товщини спостерігається для середніх  $1,05 < n < 1,25$  значень. Послаблення  $\beta$  при малих значеннях  $n$  пов'язано зі зменшенням відносного внеску рекомбінації ШРХ. В той же час, великі значення фактору неідеальності спостерігаються при значній концентрації заліза, що, в свою чергу викликає зменшення довжини дифузії електронів ( $L_n$ ) в базі КСЕ. Очевидно, що вплив товщини можливий лише при  $L_n > d_p$  і саме з цієї причини  $\beta \approx 0$  при  $n > 1,3$ .

На рис. 1.3-1.5 також представлені залежності зміни фактора неідеальності після спарювання міжузольного заліза – див. поверхні 3. Так як подібний процес має пригнічувати рекомбінацію ШРХ, то очікувалось, що для всіх значень параметрів мало бути  $\delta n_{\text{Fe-Fe-FeB}} > 0$ . Проте, як видно з рис. 1.4б,в та 1.5а спостерігається і протилежний ефект. В цьому випадку  $\delta n_{\text{Fe-Fe-FeB}}$  збільшується при зростанні концентрації бору і практично не залежить від  $T$  та  $N_{\text{Fe}}$ . Випадок  $n_{\text{Fe}} < n_{\text{Fe-FeB}}$  спостерігається в області зменшення фактору неідеальності, пов'язаного із заповненням рівня  $\text{Fe}_i$ . Можливою причиною цього могла бути відмінність положення рівня Фермі для «Fe» та «Fe-FeB»

випадків. Проте проведені розрахунки показали, що ця відмінність не перевищує  $5 \cdot 10^{-6}$  еВ і тому не може бути причиною даного ефекту. В свою чергу, рис. 1.6 представляє розраховані просторові розподіли рекомбінаційно активних (додатно заряджених) атомів заліза до та після спарювання. Очевидно, ступінь зменшення концентрації  $\text{Fe}_i^+$  залежить від відстані до  $p$ - $n$  переходу (розташованого при  $x=0$ ). На нашу думку, саме зміна профілю  $N_{\text{Fe}^+}$  є можливою причиною збільшення фактору неідеальності. Зауважимо, що ефект залежить від концентрації заліза.

Крім того, величина  $\delta n_{\text{Fe-Fe-FeB}}$  залежить від  $N_{\text{Fe}}$  і у випадку  $n_{\text{Fe}} > n_{\text{Fe-FeB}}$ . Тобто, використання двох значень фактору неідеальності (для рівноважного випадку і випадку, який можна реалізувати освітленням) дозволяє отримати додаткову інформацію про концентрацію домішок. Саме такий підхід і буде використаний надалі, при налаштуванні ГНМ.

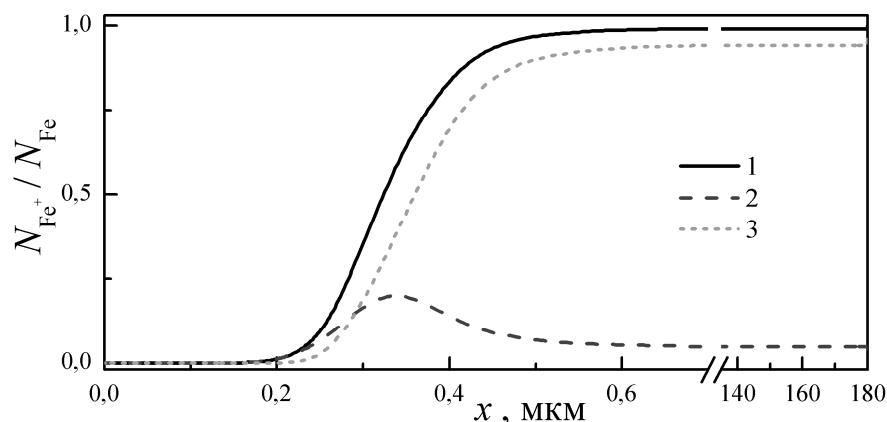


Рисунок 1.6 – Розподіл частки додатно заряджених атомів заліза в базі структури. Криві 1 та 2 відповідають «Fe» та «Fe-FeB» випадкам, відповідно; 3 – різниця між 1 та 2.  $T=330$  К,  $N_B=3,162 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ ,  $d_p=180$  мкм

#### 1.4 Налаштування штучної нейронної мережі

Як вже зазначалося, одним із завдань проекту роботи було створення штучної нейронної мережі, здатної передбачити концентрацію домішкових

атомів заліза в КСЕ, спираючись на вимірювання ВАХ (значення фактору неідеальності і температуру вимірювання) та параметри сонячного елементу (товщину та рівень легування бази). На попередніх етапах роботи були створені тренувальний набір даних, який складався з 7524 зразків, та декілька тестових: T-varied (894 зразка), d-varied (1189 зразків), Fe-varied (856 зразків), B-varied (514 зразків) та All-varied (864 зразки). Відмінності наборів детально описані в підрозділі 1.2.

Загалом розглядалися два варіанти ГНМ [38]. В одному з них використовувалося лише значення фактору неідеальності для рівноважного стану КСЕ -  $n_{Fe-FeB}$ . Для позначення цієї мережі використовувалося позначення DNN<sub>FeFeB</sub>. В другому варіанті до уваги бралися як величина  $n_{Fe-FeB}$ , так і  $n_{Fe}$  (подальше позначення - DNN<sub>FeFeB-Fe</sub>).

Узагальнена схема використаної глибокої мережі приведена на рис. 1.7. Вхідний шар складався з чотирьох або п'яти вузлів і величинами, які подавалися туди подавалися окрім  $n_{Fe-FeB}$  (або  $n_{Fe-FeB}$  та  $n_{Fe}$ ) були температура, товщина бази КСЕ та логарифм концентрації бору в базі. Вихідний шар містив один вузол, використовував лінійну функцію активації і передбачав логарифм концентрації заліза в КСЕ. Для отримання прогнозованої концентрації до значення вихідного вузла застосувалася функція антилогарифмування.

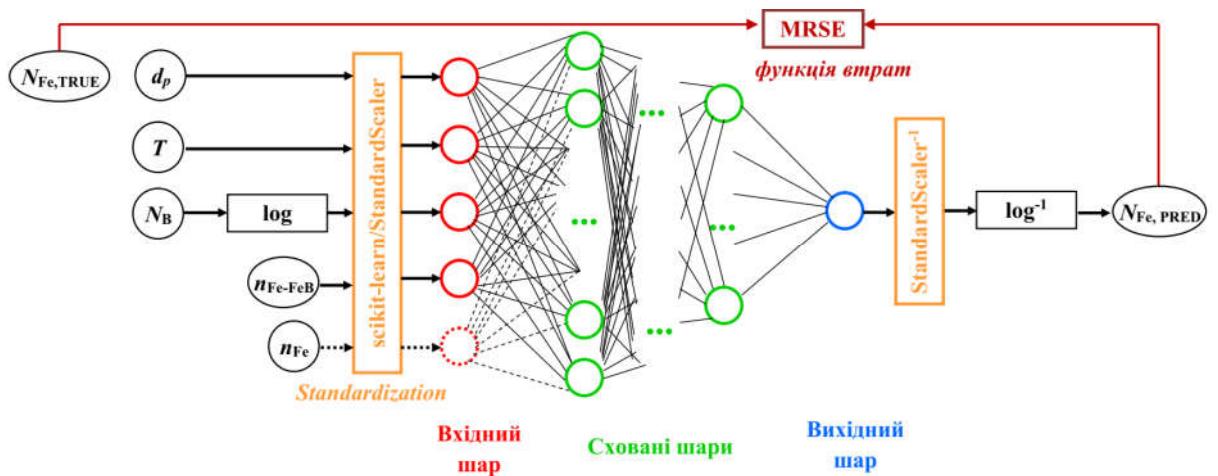


Рисунок 1.7 – Схема ГНМ для оцінки концентрації заліза

У якості функції втрат використовувалося середнє значення відносної

квадратичної похибки (mean squared relative error, MSRE):

$$\text{MRSE} = \frac{1}{N_S} \sum_{i=1}^{N_S} \frac{(N_{\text{Fe,TRUE},i} - N_{\text{Fe,PRED},i})^2}{N_{\text{Fe,TRUE},i} N_{\text{Fe,PRED},i}}, \quad (1.16)$$

де

$N_S$  – кількість зразків у тренувальному (тестовому) наборі,

$N_{\text{Fe,TRUE},i}$  – істинна величина концентрації заліза для  $i$ -го зразка (та, яка використовувалась при моделюванні відповідної ВАХ),

$N_{\text{Fe,PRED},i}$  – величина, передбачена ГНМ для даного зразка.

Для роботи з ГНМ використовувався високорівневий пакет Keras API від TensorFlow. Сховані шари були повнозв'язними. Під час налаштування мережі розглядалися різні конфігурації схованих шарів та вибиралися оптимальні (раціональні) значення таких гіперпараметрів як кількість шарів ( $N_{\text{HL}}$ ), кількість вузлів у першому схованому шарі ( $N_{\text{node}}$ ), розмір пакету (batch size, BS), тип активаційної функції для схованих шарів (activation function, ActF), тип оптимізатора (optimizer, Opt), темп навчання (learning rate, LR), кількість епох ( $N_{\text{ep}}$ ), метод попередньої підготовки даних (preprocessing method, PreM), тип функції регуляризації (regularization function, RegF), темп регуляризації (regularization rate, RR), темп проріджування (dropout rate, DR), тип початкової ініціалізації вагових коефіцієнтів (weight initializer, WI). Значення гіперпараметрів, які розглядалися, зведені у таблиці 1.3.

Розглядалися 5 конфігурацій схованих шарів (див. рис. 1.8):

- pipe: всі сховані шари складаються з однакової кількості вузлів;
- trapezium: шість схованих шарів, в кожному наступному з них кількість вузлів зменшується на 10% кількості вузлів у першому шарі;
- triangle: десять шарів, кількість нейронів в який рівномірно зменшується від 100% (перший шар) до 10% (останній шар);
- butterfly: дві дзеркально відображені trapezium конфігурації;
- fir: дві послідовні trapezium конфігурації.

Таблиця 1.3 – Початковий простір пошуку гіперпараметрів

Гіпер-параметр	Значення
$N_{\text{HL}}$	2÷16
$N_{\text{node}}$	5, 10, 20, 30, 40, 50, 75, 100, 125, 150, 175, 200, 250, 300, 500
BS	2, 4, 6, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 80, 100, 120, 140, 170, 200, 250, 300
ActF	ReLU, sigmoid, tanh, SELU, ELU
Opt	SGD, RMSprop, Adam, Adadelta, Adagrad, Adamax, Nadam, Ftrl
LR	$0.01, 3.16 \cdot 10^{-3}, 10^{-3}, 3.16 \cdot 10^{-4}, 10^{-4}, 3.16 \cdot 10^{-5}, 10^{-5}$
$N_{\text{ep}}$	10, 20, 50, 75, 100, 200, 300, 500, 700, 900, 1100, 1300, 1500
PreM	StandartScaler, MinMaxScaler
RegF	None, L2, L1, Dropout
RR	$10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}$
DR	0.2, 0.3, 0.4, 0.5
WI	Xavier Normal, Xavier Uniform, He Normal, He Uniform, Random Normal, Random Uniform, Ones

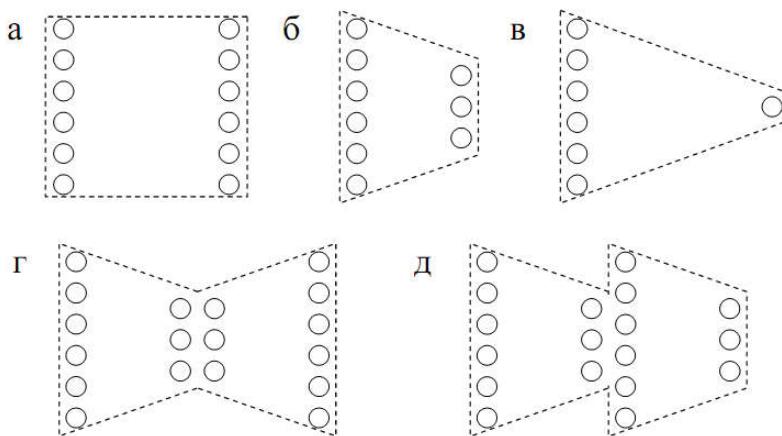


Рисунок 1.8 – Схеми конфігурації схованих шарів ГНМ, які розглядалися при налаштуванні. а – pipe; б – trapezium; в – triangle; г – butterfly; д – fir

Під час налаштування гіперпараметрів для кількісної характеризації

прогностичних властивостей ГНМ використовувалася 5-кратна перехресна перевірка (5-fold cross-validation) на тренувальному наборі, а також якісна оцінка на тестових наборах.

Налаштування ГНМ відбувалося в два етапи . На першому з них для грубої оцінки значень гіперпараметрів фіксувалися майже всі з них, окрім одного чи двох та проводився гратковий пошук (grid search) раціональних значень. Пошук проводився для ріре-конфігурації. Це дозволяло обмежити простір гіперпараметрів почергово по кожній з розмірностей.

Для тонкого налаштування, в межах цього обмеженого простору проводився відбувався випадковий пошук (random search). При цьому використовувався пакет Keras Tuner. Пошук проводився в декілька етапів на все меншому ареалі параметрів. В таблиці 1.4 представлені остаточні значення гіперпараметрів, оптимальні в нашому випадку.

Таблиця 1.4 – Вибрані в результаті налаштування значення гіперпараметрів

Мережа	DNN <sub>FeFeB</sub>	DNN <sub>FeFeB-FeB</sub>
Гіперпараметр	Значення	
конфігурація	120-108-96-84-72-60	100-100-100-100
BS	32	32
ActF	ReLU	ReLU
Opt	Adamax	Adamax
LR	$10^{-3}$	$10^{-3}$
$N_{ep}$	400	1500
PreM	StandartScaler	StandartScaler
RegF	None	None
WI	Xavier Normal	Xavier Normal

## 1.5 Навчання та тестування нейронних мереж за допомогою синтетичних даних

Для оцінки остаточного ступеня навчання ГНМ з визначеними у попередньому пункті гіперпараметрами була використана 10-кратна перехресна перевірка. Результати представлені в таблиці 1.5. Як видно, мережа DNN<sub>FeFeB-FeB</sub> демонструє значно кращі прогностичні результати. Це стосується як абсолютноого середнього значення MSRE на 10 наборах, так і середньоквадратичної похибки, яка також вказана в таблиці.

Таблиця 1.5 – Результати 10-кратної перехресної перевірки навчання

Набір	MSRE	
	DNN <sub>FeFeB</sub>	DNN <sub>FeFeB-FeB</sub>
тренувальний	0,31±0,07	0,03±0,01
повний	0,28±0,05	0,03±0,01

Натреновані мережі були застосовані для передбачень на тестових наборах. Для оцінки якості використовувалися MSRE, коефіцієнт детермінації  $R^2$  та коефіцієнт кореляції Пірсона  $R$ . Результати для DNN<sub>FeFeB</sub> представлені на рис. 1.9 та в таблиці 1.6. Видно, що в цьому випадку похибка для окремих зразків (тобто наборів  $\{d_p, T, N_B, n_{Fe-FeB}\}$ ) може бути достатньо великою.

Таблиця 1.6 – Результати тестування навчених мереж на синтетичних тестових наборах

Набір	DNN <sub>FeFeB</sub>			DNN <sub>FeFeB-FeB</sub>		
	MSRE	$R^2$	$R$	MSRE	$R^2$	$R$
T-varied	0,41	0,936	0,967	0,020	0,994	0,997
d-varied	0,37	0,961	0,980	0,018	0,996	0,998
B-varied	1,06	0,881	0,939	0,084	0,991	0,995
Fe-varied	0,06	0,991	0,996	0,005	0,996	0,999
All-varied	0,54	0,813	0,901	0,138	0,948	0,974

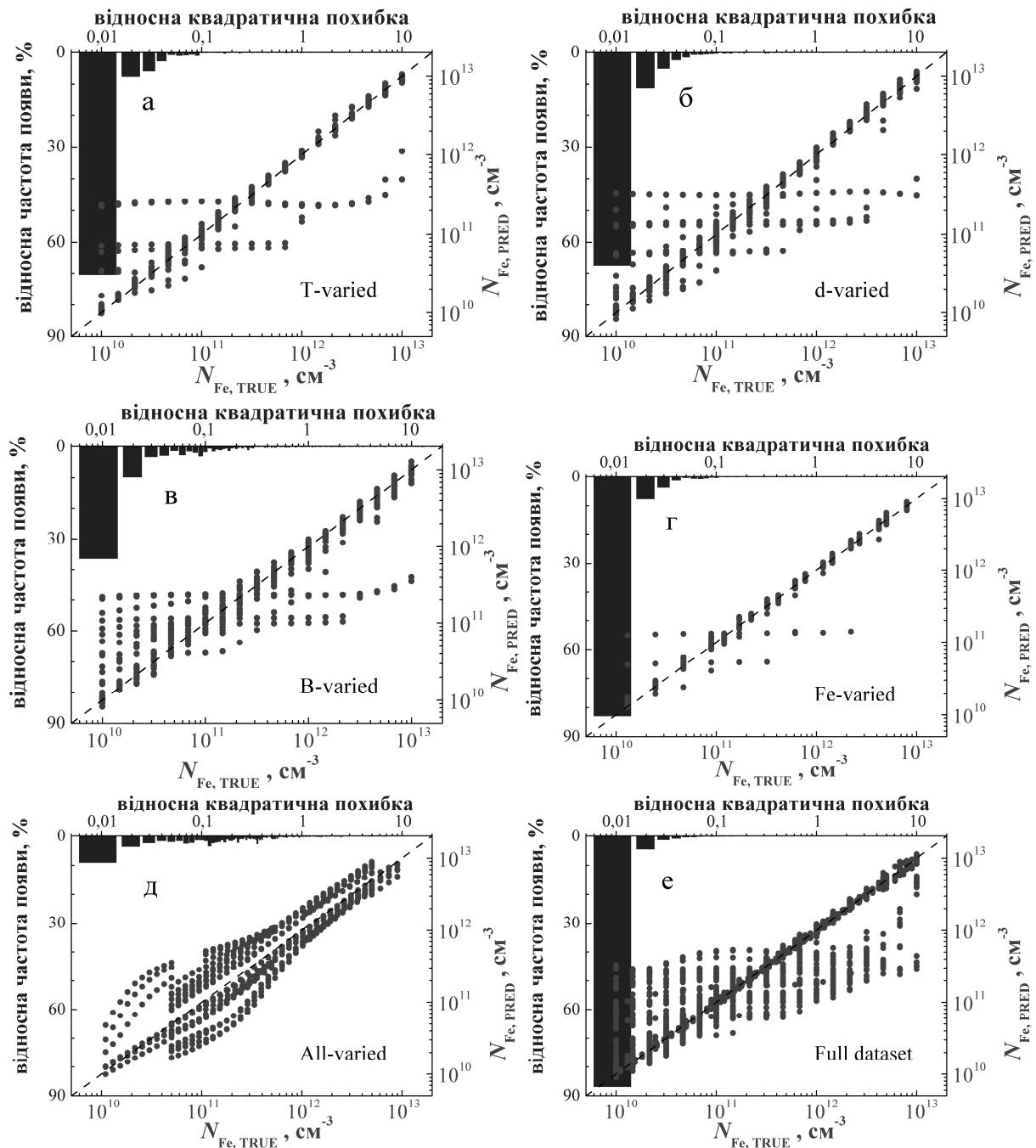


Рисунок 1.9 – Співвідношення передбачених мережею DNN<sub>FeFeB</sub> та істинних значень концентрацій заліза для T-varied (а), d-varied (б), B-varied (в), Fe-varied (г), All-varied (д) та повного (е) наборів (точки). Стовпці відображають гістограми SRE. ГНМ була навчена на тренувальному (а-д) або повному (е) наборах. Пунктирна лінія істинності наведена для зручності

На рисунку також наведено гістограми, які відображають розподіл величини відносної квадратичної похибки (squared relative error, SRE) по

тестовим наборам. Необхідно зауважити, що, частка передбачень з дійсно великою відмінністю між  $N_{\text{Fe,TRUE},i}$  та  $N_{\text{Fe,PRED},i}$  не є великою для більшості випадків. Так SRE не перевищує 0,05 для 87%, 88% та 96% для наборів T-varied, d-varied та Fe-varied відповідно – див. рис. 1.9а,б,г.

Найбільша похибка спостерігається у випадку, коли тестовий набір (B-varied) створювався з використанням тих значень легування, які не зустрічалися у тренувальному наборі. В цьому випадку частина зразків характеризувалася дійсно великою похибкою ( $\text{SRE} > 20$ ), що призвело до  $\text{MSRE} = 1,06$ . Для цього набору  $\text{SRE} < 0,05$  для 54% зразків. Найбільш неточні прогнози цілком очікувано спостерігаються для All-varied набору:  $R^2$  дорівнює всього 0,813, а SRE менша 0,05 всього для 18% зразків. З іншого боку, набір Fe-varied найбільш наближений до реальної ситуації, і в цьому випадку навіть для DNN<sub>FeFeB</sub> відносна квадратична похибка не перевищує 0,01 для 88% випадків. Також були розглянуті залежності помилок прогнозування DNN від значень параметрів КСЕ – див. рис. 1.10-1.13. На рисунках представлені дані для тренувального набору даних, результати для тестових подібні.

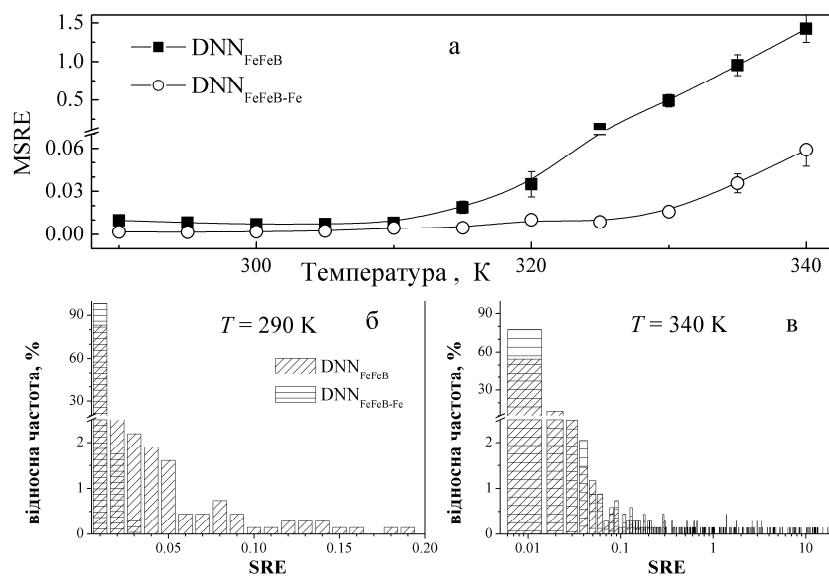


Рисунок 1.10 – Залежність MSRE для тренувального навчання набору від температури (а). Гістограми частот появи SRE для  $T = 290$  K (б) та  $T = 340$  K (в). Похиле штрихування -  $\text{DNN}_{\text{FeFeB}}$ ; горизонтальне -  $\text{DNN}_{\text{FeFeB-Fe}}$

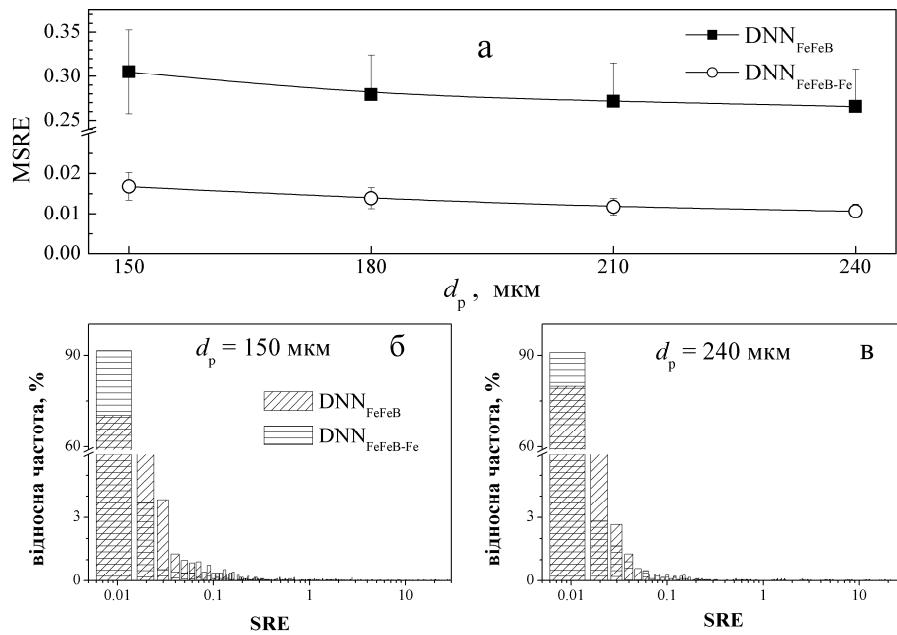


Рисунок 1.11 – Залежність MSRE для тренувального навчання набору від товщини бази (а). Гістограми частот появі SRE для  $d_p = 150$  мкм (б) та  $d_p = 240$  мкм (в). Похиле штрихування - DNN<sub>FeFeB</sub>; горизонтальне - DNN<sub>FeFeB-Fe</sub>

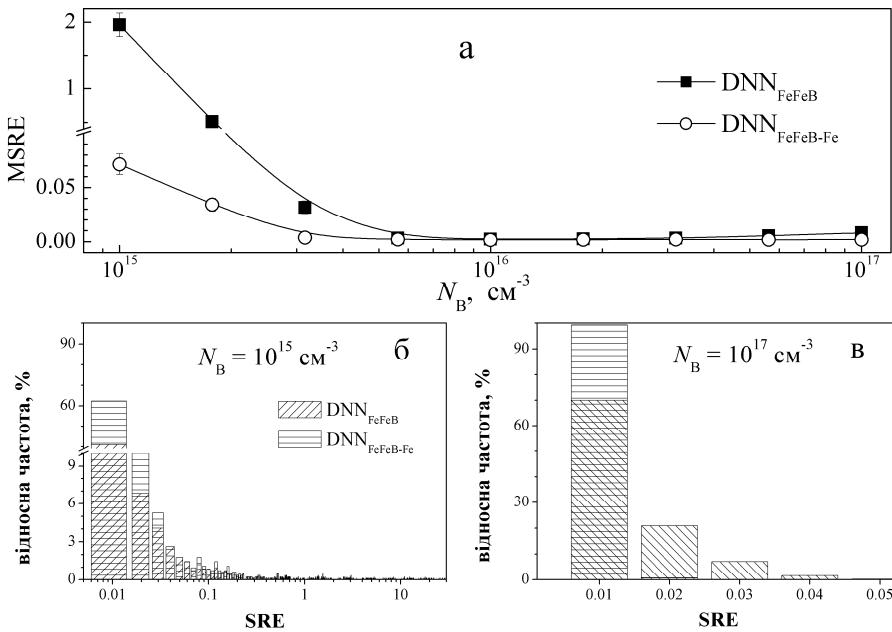


Рисунок 1.12 – Залежність MSRE для тренувального навчання набору від концентрації бору (а). Гістограми частот появі SRE для  $N_B = 10^{15}$  см<sup>-3</sup> (б) та  $N_B = 10^{17}$  см<sup>-3</sup> (в). Похиле штрихування - DNN<sub>FeFeB</sub>; горизонтальне - DNN<sub>FeFeB-Fe</sub>

Так з рис. 10а видно, що для DNN<sub>FeFeB</sub> значне збільшення значення помилки прогнозування спостерігається при  $T > 320$  К. Так для температури 340 К максимальне значення SRE становить близько 20, а відсоток зразків, для яких значення SRE менше 0,01 становить всього 55% (див. рис. 10в). В той же час для 290 К (рис. 10б) відповідні величини дорівнюють 0,02 та 83%. Як було зазначено раніше, підвищення температури викликає збільшення впливу власної рекомбінації на величину фактору неідеальності. Як наслідок, вплив рекомбінації ШРХ на  $n$  послаблюється і прогностична здатність ГНМ падає.

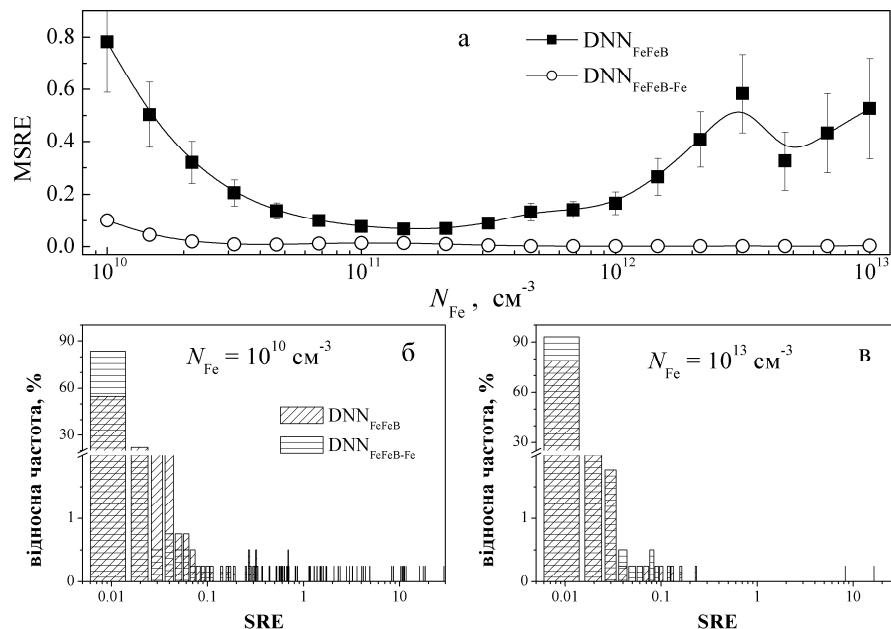


Рисунок 1.13 – Залежність MSRE для тренувального навчання набору від концентрації заліза (а). Гістограми частот появі SRE для  $N_{Fe} = 10^{10}$  см<sup>-3</sup> (б) та  $N_{Fe} = 10^{13}$  см<sup>-3</sup> (в). Похиле штрихування - DNN<sub>FeFeB</sub>; горизонтальне - DNN<sub>FeFeB-Fe</sub>

Як показано на рис. 11, товщина бази КСЕ практично не впливає на помилки прогнозування (як на середнє значення SRE, так і на відносну частоту, з якою зустрічається помилка певної величини). Проте, як вже було зазначено раніше (див. підрозділ 1.3, формулу (1.15)), значення коефіцієнта неідеальності залежить від товщини бази і тому  $d_p$  є важливим параметром під час навчання ГНМ.

Похибка прогнозування різко зростає зі зменшенням рівня легування -

див. рис. 12а. Так, максимальне значення SRE становить приблизно 0,05 для  $N_B = 10^{17} \text{ см}^{-3}$  (рис. 12в), тоді як для  $N_B = 10^{15} \text{ см}^{-3}$  відносна квадратична похибка у квадраті менше 0,05 лише для 56% зразків (рис. 12б). Як випливає з формулі (1.14) зменшення  $N_B$  підвищує ймовірність заповнення електроном рівня, пов'язаного з міжвузольним залізом, що спричинює різке зменшення впливу рекомбінації за участю рівня даного дефекту на величину фактору неідеальності, що і пояснює виявлене послаблення точності прогнозу ГНМ. Додатковою причиною є описане в підрозділі 1.3 загальне зменшення впливу домішок на  $n$  при низьких рівнях легування (рис. 1.5). Зауважимо, що заповнення рівня  $\text{Fe}_i$  може бути додатковою причиною збільшення помилок передбачень при зростанні температури.

З рис. 13а видно, що MSRE зростає як при малих, так і при великих концентраціях заліза. Перша область поганих передбачень є цілком прогнозованою, друга – достатньо несподіваною. Проте, як видно з рис. 13в, зростання MSRE при  $N_{\text{Fe}} = 10^{13} \text{ см}^{-3}$  пов'язане насамперед з існуванням всього декількох зразків з дійсно великим (декілька десятків) значенням SRE.

На нашу думку, не достатньо високі прогностичні можливості DNN<sub>FeFeB</sub> викликані фундаментальною неможливістю точно передбачити концентрацію заліза через неоднозначність зв'язку  $n_{\text{Fe-FeB}}$  та  $N_{\text{Fe}}$  – див. підрозділ 1.3. Збільшення кількості вхідних параметрів само по собі має підвищити можливості ГНМ, але в нашему випадку розгляд ще одного значення фактору неідеальності ( $n_{\text{Fe}}$ ) має спричинити своєрідне зняття виродження взаємозв'язку фактору неідеальності та концентрації заліза.

Результати, як тренування, так і застосування до тестових наборів даних для мережі DNN<sub>FeFeB-FeB</sub> представлені на рис. 1.14 та в таблицях 1.5 та 1.6. Дійсно, в цьому випадку спостерігається суттєве підвищення прогностичних властивостей ГНМ порівняно з використанням всього одного значення фактору неідеальності. Це стосується як MSRE, яке в найгіршому випадку All-varied набору складає всього 0,138, так і розкиду передбачень для окремих зразків (рис. 1.10-1.14): так максимальна величина SRE не перевищує 1 навіть

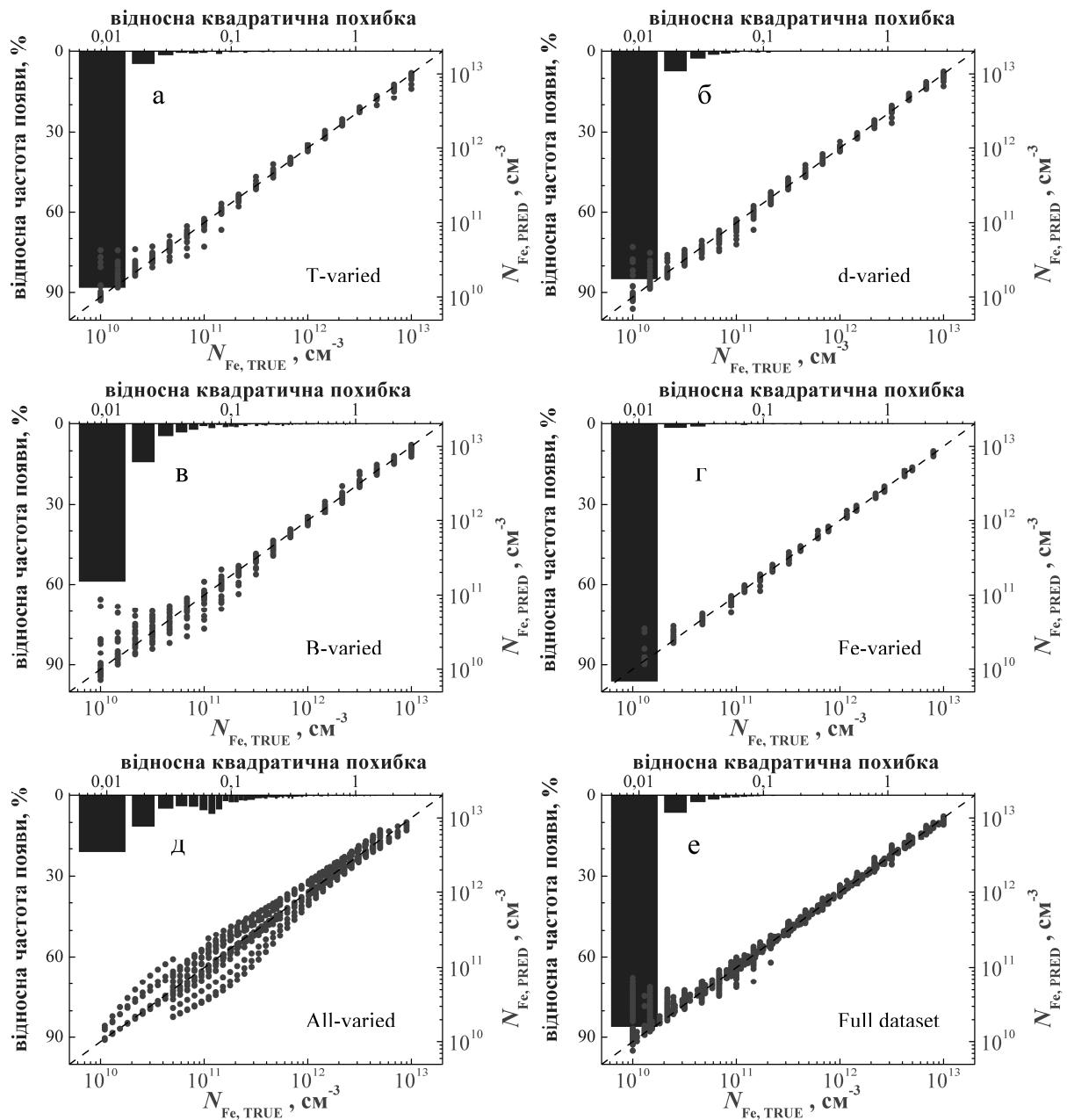


Рисунок 1.14 – Співвідношення передбачених мережею

$DNN_{FeFeB-FeB}$  та істинних значень концентрацій заліза для Т-varied (а), d-varied (б), B-varied (в), Fe-varied (г), All-varied (д) тестових та повного (е) наборів (точки). Стовпці відображають гістограми SRE. ГНМ була навчена на тренувальному (а-д) або повному (е) наборах. Пунктирна лінія істинності наведена для зручності

для All-varied набору і SRE менше 0,02 для 93%, 92%, 73% та 97% зразків для наборів T-varied, d-varied, B-varied та Fe-varied, відповідно. Також звертають

на себе уваги значення коефіцієнтів детермінації (0,999) та кореляції (0,999) для Fe-varied тестового набору.

Окрім суттєвого підвищення точності, інші виявлені особливості для мережі DNN<sub>FeFeB-FeB</sub> подібні до DNN<sub>FeFeB</sub>. А саме, критичним для вдалого функціонування ГНМ є використання для тренування тих значень  $N_B$ , які очікуються в подальшій оціночній діяльності, а також сприятлива з точки зору практичного застосування здатність достатньо точно передбачати відхилення у концентрації заліза. Крім того, підвищення температури (рис. 1.10), зменшення рівня легування (рис. 1.12) та концентрації заліза (рис. 1.13) призводять до зростання похиби передбачення. Проте, на відміну від DNN<sub>FeFeB</sub>, при збільшенні  $N_{Fe}$  похибка не зростає і діапазон отриманих значень SRE при  $N_{Fe} = 10^{13} \text{ см}^{-3}$  більш вужчий, ніж у випадку  $N_{Fe} = 10^{10} \text{ см}^{-3}$  – див. рис. 1.13б,в.

Відомо [39], що збільшення розміченого набору даних, які використовуються для тренування, має покращувати результати роботи ГНМ. Ми використали всі дані, так званий повний набір, який складався з тренувального та всіх тестових, для тренування як DNN<sub>FeFeB-FeB</sub>, так і DNN<sub>FeFeB</sub>. Результати наведені в таблиці 1.5 та на рис. 1.9e і 1.14e. Видно, що дійсно, використання розширеного набору викликає певне покращення тренування DNN<sub>FeFeB</sub>.

Всі натреновані мережі (як з використанням тренувального, так і повного наборів розмічених даних) знаходяться у вільному доступі за адресою <https://github.com/olegolikh/IVcharacteristics/tree/main/Models>.

## 1.6 Тестування нейронних мереж на експериментально вимірюваних ВАХ та аналіз застосовності натренованих мереж до різних за типом КСЕ

Здатність ГНМ передбачати концентрацію заліза була також протестована на реальних КСЕ. Детальніше зразки описані у підрозділі 2.1, проте тут зауважимо, що це були кремнієві  $n^+ \text{-} p \text{-} p^+$  структури, виготовлені з Cz-пластин, легованих бором з питомим опором 10 Ом·см ( $N_B = 1,4 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ ).

Емітерний  $n^+$  шар мав товщину 0,7 мкм та поверхневий опір 20-30 Ом/ $\square$ , товщина бази – 350 мкм, товщина та поверхневий опір  $p^+$  шару – 0,6 мкм та 10-20 Ом/ $\square$ . Концентрація заліза в базі КСЕ  $N_{\text{Fe,MEAS}}$  була визначена шляхом вивчення кінетики зміни величини струму короткого замикання при монохроматичного освітлення після дисоціації пар [40] – метод описано в підрозділі 2.2. Для тестування було використано два зразки, #320 та #349, значення  $N_{\text{Fe,MEAS}}$  для яких становило  $(2,0 \pm 0,4) \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$  та  $(6,7 \pm 0,7) \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ , відповідно.

Як видно з наведених даних, перед ГНМ була поставлено достатньо важка задача, складність якої пов’язана певною відмінністю параметрів реальних структур, та тих, які були використані під час симуляції. Проте головним критерієм вибору саме цих зразків була необхідність того, щоб рекомбінація ШРХ визначалась саме дефектами, пов’язаними із залізом.

Темнові ВАХ вказаних структур були виміряні при температурах 300, 320 та 340 К. Вимірювання були проведені як після витримки зразків в темряві на протязі 48 год при кімнатній температурі (випадок «Fe-FeB»), так і безпосередньо після інтенсивного освітлення КСЕ галогеновою лампою (випадок «Fe»). Після цього була проведена апроксимація виміряних ВАХ відповідно до формули (1.13) та визначено параметри, зокрема  $n$ ,  $R_S$ ,  $R_{\text{SH}}$ . Типові результати вимірювання та апроксимації наведено на рис. 1.15 та в таблиці 1.7. Варто зауважити, що для експериментальних ВАХ, на відміну від синтетичних, не можна знехтувати впливом послідовного та шунтуючого опорів (величина  $R_S$  становила близько 3 та 6 Ом для зразків #320 та #349, відповідно, значення  $R_{\text{SH}}$  наведено в таблиці 1.7).

Значення фактору неідеальності, визначені з експериментальних ВАХ, та параметри зразків були використані як вхідні дані для попередньо натренованих на синтетичних даних (лише на тренувальному наборі чи на повному наборі розмічених даних) DNN<sub>FeFeB</sub> та DNN<sub>FeFeB-FeB</sub>. Результати передбачень зведені в таблиці 1.7.

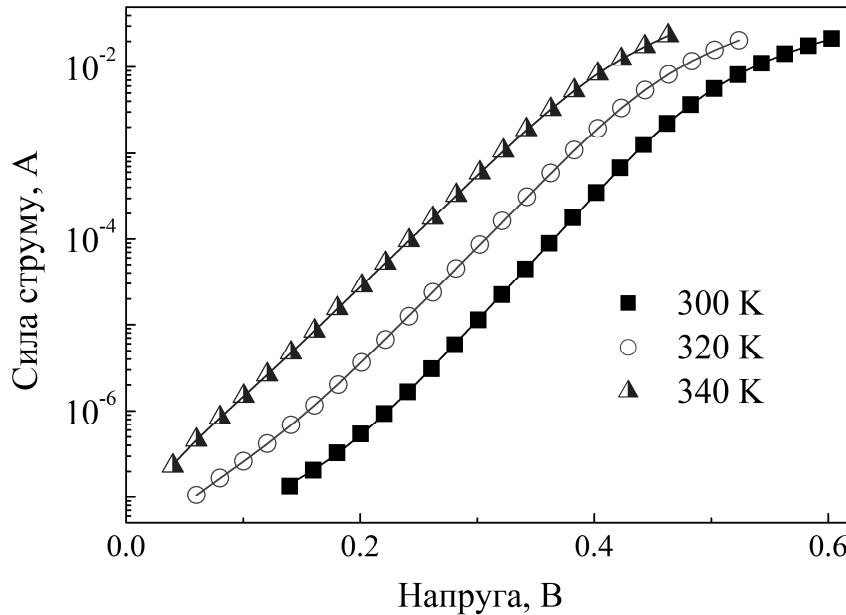


Рисунок 1.15 – Вольт-амперні характеристики зразка #320\_1, виміряні при температурах 300, 320 та 340 К. Точки – експеримент, лінії – апроксимація відповідно до (1.13)

Таблиця 1.7 – Результати апроксимації експериментальних ВАХ та тестування передбачень щодо вмісту заліза за допомогою ГНМ

Зразок	$N_{Fe,MEAS}, 10^{12} \text{ см}^{-3}$	$T, \text{ К}$	$n_{Fe-FeB}$	$R_{SH, Fe-FeB}, \text{ Ом}$	$n_{Fe}$	$R_{SH, Fe}, \text{ Ом}$	$N_{Fe,PRED}, 10^{12} \text{ см}^{-3}$			
							DNN <sub>FeFeB</sub>		DNN <sub>FeFeB-FeB</sub>	
							трен	повн	трен	повн
#320	$2,0 \pm 0,4$	300	1,214	$1,6 \cdot 10^6$	1,195	$1,4 \cdot 10^6$	3,9	2,8	3,0	2,0
		320	1,204	$8,6 \cdot 10^5$	1,148	$8,0 \cdot 10^5$	6,6	1,9	16	19
		340	1,118	$4,3 \cdot 10^5$	1,111	$4,3 \cdot 10^5$	3,8	1,2	89	574
#349	$6,7 \pm 0,7$	300	1,223	$2,9 \cdot 10^6$	1,222	$2,6 \cdot 10^6$	8,9	5,6	15	11
		320	1,183	$1,7 \cdot 10^6$	1,182	$1,7 \cdot 10^6$	1,2	0,4	10	32
		340	1,138	$1,3 \cdot 10^6$	1,173	$1,3 \cdot 10^6$	9,8	1,7	26	411

Аналізуючи отримані результати, щонайперше зауважимо, що незважаючи на те, що використана модель не було надзвичайно складною, точність передбачень навіть перевищила очікувану. Особливо це стосується

DNN<sub>FeFeB</sub>, прогноз якої щодо концентрації заліза відрізнялися лише в декілька разів від вимірюваних значень. А у випадку застосування DNN<sub>FeFeB</sub>, тренованої на повному наборі, до #320, помилка прогнозу взагалі не перевищує 40%.

Також зауважимо, що результати для реальних ВАХ підтверджують тенденції, виявлені при роботі з синтетичними ВАХ. Зокрема, точність прогнозу падає при температурах, вищих 320 К та концентраціях заліза, близьких до верхньої межі ( $10^{13}$  см<sup>-3</sup>) використаного діапазону. Це повністю збігається з даними на рис. 1.10а та рис. 1.13а, відповідно. Крім того, значення рівня легування бази реальних КСЕ ( $N_B = 1,4 \cdot 10^{15}$  см<sup>-3</sup>) не використовувалося при створенні тренувального набору розмічених даних, проте зустрічалося в B-varied наборі (а отже, і в повному). З таблиці 1.7 видно, що передбачення DNN<sub>FeFeB</sub>, тренованої на повному наборі, кращі ніж у випадку використання лише тренувального набору, особливо для #320. Ця особливість підтверджує зроблений раніше висновок про важливість тренування ГНМ з тими значеннями  $N_B$ , які очікуються у об'єктах майбутніх досліджень.

З іншого боку, всупереч очікуванням, DNN<sub>FeFeB-FeB</sub> продемонструвала гірші результати ніж DNN<sub>FeFeB</sub> в більшості випадків. Причин для цього може бути декілька. По-перше, використання двох значень фактору неідеальноті підсилює вплив спрощень, використаних під час симуляції (наприклад, вплив неврахованих під час моделювання процесів, що викликають появу послідовного та шунтувочного опорів). По-друге, точне визначення  $n_{Fe}$  є більш складною задачею з експериментальної точки зору, ніж  $n_{Fe-FeB}$ . Наприклад, в нашому випадку вимірювання ВАХ після інтенсивного освітлення потребувало близько 100 с. Цей проміжок був необхідний для встановлення температури зразка після нагріву, індукованого освітленням, а також для безпосереднього вимірювання значень струму та напруги. Відповідно до [41,42], характеристичний час асоціації пари FeB при  $T = 340$  К та  $N_B = 1,4 \cdot 10^{15}$  см<sup>-3</sup> становить близько 600 с. А отже, не можна очікувати, що визначене при такій температурі значення фактору неідеальноті відповідає саме випадку повної дисоціації пар FeB. Таким чином, незважаючи на потенційно вищу

точність прогнозів мережі DNN<sub>FeFeB-FeB</sub>, показано в попередньому підрозділі, практичне застосування такого підходу є більш ускладненим.

Загалом, отримані результати підтверджують можливість оцінки концентрації домішкового заліза (або інших електрично активних дефектів) за величиною фактору неідеальності.

Наприкінці розглянемо можливість застосування створених та натренованих ГНМ до різних типів реально існуючих КСЕ. На сьогодні найпопулярнішими конфігураціями є BSF та PERC (passivated emitter and rear cell) [43,44]. Обговорення застосовності натренованих ГНМ повинно відштовхуватися від факту, що фактор ідеальності дозволяє вирізнати рекомбінацію в області збіднення від інших джерел рекомбінації [35, 45]. Звичайно, для реальних структур спостерігаються відхилення від цього правила. Наприклад, проведене нами моделювання показало, що  $n$  залежить від товщини бази [37]. Але ця залежність є слабкою і значення фактору неідеальності все-таки переважно визначається саме рекомбінацією у збідненій області.

По-перше, застосовність створених ГНМ визначається виконанням умови, що ШРХ рекомбінація Шоклі-Ріда-Хола. Для опису випадків, коли суттєвими є інші механізми зменшення концентрації вільних носіїв заряду, запропоновані інші моделі, які відрізняються від дво-діодної (наприклад, три-діодні [46,47]). Крім того, база має бути легована бором. Наприклад, якщо КСЕ виготовлені з Si:Al (кремнію, легованого бором), симуляційна модель, яка використовується для підготовки тренувального набору, повинна бути змінена: вона повинна використовувати параметри пари Fe<sub>i</sub>Al<sub>s</sub>, а також враховувати зміну розподілу дефектів (формула (1.11)). Нарешті, якщо інші дефекти (на додачу до глибоких рівнів, пов'язаних із залізом) присутні в сонячному елементі і також є причиною інтенсивної ШРХ рекомбінації, розрахункова модель має бути більш складною. Основними конкурентами пари FeB в CZ-Si є комплекси бор-кисень [48,49] та кисневмістні преципітати [50,51]; побудова відповідної моделі може бути наступним кроком подібних

досліджень. До речі, зауважимо, що показником наявності інших типів дефектів може бути високе значення  $n$ : в наших симуляціях отримане значення  $n$  не перевищувало 1,4. Останнє обмеження може бути найбільш лімітуючим фактором застосування ГНМ; зокрема, це звузило вибір КСЕ для експериментальної перевірки запропонованого методу.

Таким чином, натреновані ГНМ можна застосовувати до BSF сонячних елементів, виготовлених з Si:B пластин. Варто зауважити, що сучасний технологічний рівень вирощування кристалів дозволяє суттєво обмежити концентрацію кисню навіть у Cz-Si. З одного боку, на промисловому рівні для створення легованої  $p^+$  області найчастіше використовується алюміній [43,44]. Проте BSF з використанням бору є багатообіцяючим підходом для створення тилового контакту високої якості [52, 53] і саме  $p^+$  шар, легований бором розглядався в наших дослідженнях. З іншого боку, вплив  $p^+$ -шару на рекомбінаційні процеси у збідненій області визначається швидше за все лише створеним ним електричним полем. А отже тип легуючих атомів  $p^+$  шару не є дуже важливим для моделювання і, на нашу думку, мережі цілком застосовні і до Al BSF сонячних елементів.

Крім того, рекомбінація в області задньої поверхні не є визначальною для величини фактору неідеальності. Тому, на нашу думку, натреновані цілком глибокі нейронні мережі можуть бути використані і до тих PERC сонячних елементів, для яких а) база легована бором; б) пов'язані із залізом глибокі рівні є основною причиною рекомбінації, зв'язаної з дефектами.

Запропонований підхід передбачає використання простого та широко поширеного обладнання і не потребує багато часу. Проте зауважимо, що так як наше дослідження було спрямоване на розробку зasad експрес-методу кількісної оцінки електрично-активних дефектів у бар'єрних структурах, було розглянуто спрощений випадок. На нашу думку, існує два основні напрямки покращення методу. Один із них пов'язаний з використанням більш якісного набору розмічених даних для тренування ГНМ. Такий набір може бути отриманий або шляхом використання 3D симуляторів бар'єрних структур

(наприклад, SILVACO TCAD) або завдяки експериментальним вимірюванням ВАХ на широкому наборі реальних КСЕ. Другий шлях пов'язаний з покращенням функціонування ГПМ і в цьому випадку найбільш перспективним видається використання підходу донаучання. Наприклад, небагаточисленний набір параметрів структур та результатів вимірювань (в нашому випадку -  $d_p$ ,  $T$ ,  $N_B$ ,  $n_{Fe-FeB}$ ) може бути мультипліковано і перетворено на зображення. Після цього для розпізнавання можуть бути використані вже готові (навчені, оптимізовані) ГНМ, орієнтовані на розпізнавання зображень (наприклад, VGG16).

## 1.7 Основні результати розділу 1

1. Розроблена розрахункова модель кремнієвої  $n^+ \text{-} p \text{-} p^+$  структури з врахуванням реальних величин 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 більше 40 тис. вольтамперних характеристик кремнієвих  $n^+ \text{-} p \text{-} p^+$  структур з різною товщиною бази ( $150 \div 240$  мкм) та ступенем її легування ( $10^{15} \div 10^{17}$  см $^{-3}$ ) для температурного діапазону  $290 \div 340$  К при варіації концентрації домішкового заліза в інтервалі  $10^{10} \div 10^{13}$  см $^{-3}$ ; враховано можливість перебування домішкових атомів заліза у міжвузольному стані та у складі пари FeB; визначені відповідні значення фактору неідеальності.

3. Показано, що залежність фактору неідеальності від температури та рівня легування переважно пов'язані з ймовірністю наявності дірки на рівні міжвузольного заліза. Виявлено, величина фактору неідеальності монотонно залежить від концентрації домішкового заліза, а також визначається його просторовим розташуванням в КСЕ. Виявлено залежність фактору

неідеальноті від товщини бази структури  $n^+ \text{-} p \text{-} p^+$  у випадку, якщо вона переважає довжину дифузії неосновних носіїв заряду.

4. Проведено налаштування гіперпараметрів глибоких нейронних мереж для передбачення концентрації домішкового заліза в КСЕ (раціональні значення параметрів зведені у таблиці 1.4), а також навчання відповідних ГНМ з використанням синтетичних даних.

5. Шляхом тестування роботи ГНМ на синтетичних та експериментальних даних, показана можливість визначення концентрації електрично-активних центрів (на прикладі заліза) у кремнієвих сонячних елементах за величиною фактора неідеальноті.

6. Показано, що важливим для тренування мережі є використання даних, які відповідають структурам з рівнем легування, що збігається з відповідною величиною в структурах, які надалі досліджуються. Водночас ГНМ з достатньою високою точністю спроможні визначати значення концентрації домішок, які не використовувалися при тренуванні.

7. Виявлено, що точність прогнозування зменшується з підвищенням температури вимірювань, а також зі збільшенням концентрації легуючої домішки.

8. Показано, використання двох значень величини фактору неідеальноті, які відповідають наявності лише міжвузольних атомів заліза та рівноважного співіснування пар FeB та Fe<sub>i</sub>, потенційно дозволяє суттєво підвищити прогностичні властивості нейронної мережі, але практична реалізація подібного підходу є ускладненою.

9. Проведено аналіз можливої області застосування створених глибоких мереж і показано, що вони можуть бути застосовані для визначення концентрації домішкового заліза як в BSF, так і PERC сонячних елементах, виготовлених з пластин кремнію, легованих бором.

**2 РОЗРОБКА ФІЗИЧНИХ ЗАСАД МЕТОДУ  
АКУСТОСТИМУЛЬОВАНОЇ ДЕАКТИВАЦІЇ ДЕФЕКТІВ,  
ПОВ'ЯЗАНИХ З АТОМАМИ МЕТАЛІВ, У  
МОНОКРИСТАЛІЧНИХ КРЕМНІЄВИХ СОНЯЧНИХ  
ЕЛЕМЕНТАХ**

Добре відомо, що ультразвук (УЗ) може ефективно впливати на дефектну підсистему напівпровідниківих кристалів та структур на їхній основі внаслідок поглинання пружної енергії, яке особливо ефективно відбувається в областях відхилення від періодичності [54,55,56]. Так при використанні допорогових інтенсивностей УЗ, спостерігаються акустоіндуковані (АІ) зміни концентрації та рухливості носіїв заряду [57,58], висоти бар’єру Шотки [59,60], чи, наприклад, амплітуди тунельної та рекомбінаційної складових струму в р-п структурах [56,61]. Іншим перспективним напрямком застосування УЗ є використання акустичних хвиль (АХ) як додаткового інструменту модифікуючого впливу під час стандартних технологічних операцій. В цьому випадку напівпровідникова структура, як правило, перебуває в нерівноважних умовах і тому дефектна підсистема може бути видозмінена внаслідок збудження пружних коливань достатньо малої інтенсивності. Наприклад, застосування ультразвукового навантаження (УЗН) під час іонної імплантації полегшує формування надмілких переходів в кремнієвих структурах внаслідок модифікації дифузійної здатності легуючої домішки (бору) [62], інтенсифікує процес афорфізації поверхневого шару Si [63]; УЗН, використане під час створення поруватого кремнію, спричинює його структурне упорядкування [64], а прикладене під час нанесення шарів ZnO – підвищує однорідність плівок [65].

З іншого боку, залізо є одночасно як однією з найбільш поширеніх неконтрольованих домішок в КСЕ, так і однією з найшкідливіших з точки зору погіршення фотоконверсійних властивостей. В кремнієвій фотовольтаїці існує два основних підходи до знешкодження впливу цієї домішки внаслідок

виведення з активної робочої зони пристрою [66]: 1) сегрегація внаслідок створення за рахунок легування відмінностей у ступеню розчинності в різних областях пластини; 2) так зване релаксаційне гетерування, під час якого міжвузольні атоми заліза включаються у кластери, розташовані протяжних дефектів, кисневмісних преципітатів чи поверхонь. Останній шлях, зокрема, може бути реалізований і під час таких стандартних операцій як дифузія фосфору [67] чи створення анти відбиваючого покриття [68]. Головною метою цієї частини проекту було експериментальне дослідження впливу АХ на дифузійну здатність заліза в КСЕ. Головним індикатором рухливості міжвузольних іонів заліза виступав характерних час асоціації пари залізо-бор після світло індукованої дисоціації. Раніше [69,70,71] була показана принципова здатність УЗ впливати на залізовмісні дефектні комплекси в кремнії, проте в нашому випадку вперше досліджувалися процеси трансформації подібних порушень періодичності в умовах УЗ навантаження.

## 2.1 Експериментальний стенд для оцінювання кінетичних характеристик перебудови дефектів у бар'єрних структурах в умовах ультразвукового навантаження

Під час виконання проекту стан дефектів, пов'язаних із домішковим залізом, визначався за параметрами вольт-амперних характеристик КСЕ (DUT, device under testing). Загальна схема експериментального стенду для вимірювання ВАХ представлена на рис. 2.1. Безпосереднє визначення ВАХ відбувалося в режимі постійної напруги, причому для компенсації падіння напруги на вимірювачі струму була використана схема зворотного зв'язку. Комутуючий блок забезпечував реалізацію стандартних інтерфейсів (I2C, SPI, RS232, OneWire) та узгодження роботи різних частин стенду і був створений з використанням мікроконтролерної плати Arduino Mega 2560. Загалом, можна виокремити три визначальні особливості даної експериментальної установки.

високоінтенсивне джерело світла

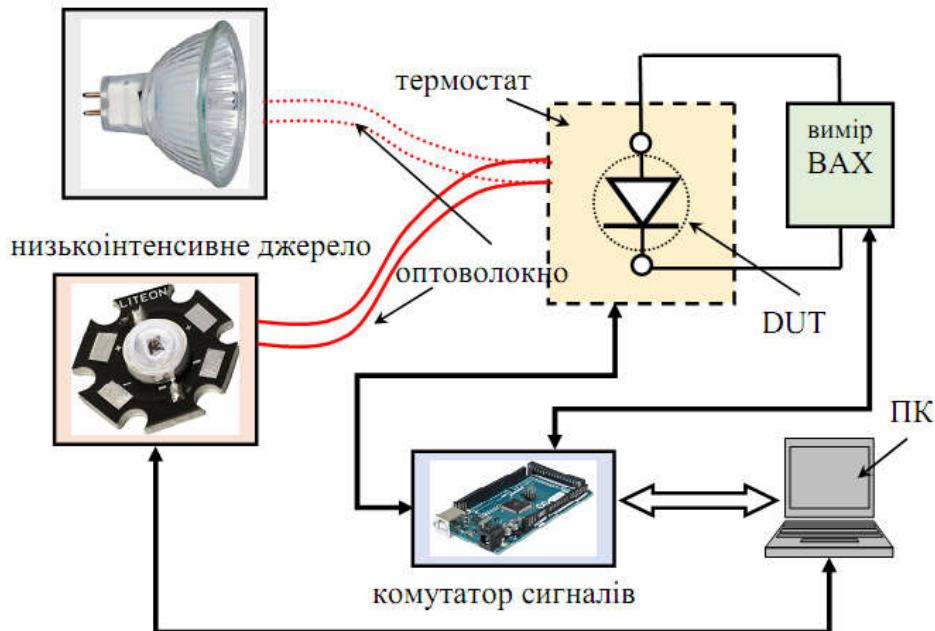


Рисунок 2.1 – Загальна схема експериментального стенду для вимірювання ВАХ

По-перше, використовувалося два джерела світла. Одне, високоінтенсивне, роль якого відігравала галогенова лампа потужністю 200 Вт, було призначене для реалізації світлоіндукованої дисоціації пар FeB. Друге джерело використовувалося для оцінки фотоелектричного перетворення, яке слугувало індикатором стану дефектної підсистеми КСЕ. Як показали попередні дослідження, найбільш чутливим до зміни стану дефектів є струм короткого замикання КСЕ, причому доцільно використовувати монохроматичне освітлення, при якому відбувається рівномірна генерації носіїв заряду по об'єму бази елементу. У зв'язку з цим був використаний світловипромінюючий діод SN-HPIR940nm-1W, максимум випромінювальної здатності якого припадає на 940 нм (при цьому ефективна глибина поглинання світла  $d_\lambda$  у кремнії становить приблизно 55 мкм [72,73]). У зв'язку з необхідністю швидких змін джерела освітлення був розроблений спеціальний блок з використанням оптоволоконного світловоду. Інтенсивність випромінювання джерел (на виході світловоду) була прокалібротована за допомогою вимірювача потужності PowerMeter Rk-5720. Для галогенової

лампи оптична потужність складає величину від 70 до 220 мВт при зміні сили струму через неї від 5,5 до 7,5 А, для світлодіоду - від 30 до 700 мкВт при зміні струму через діод від 30 до 300 мА. Так як поблизу кімнатних температур процеси відновлення пар залізо-бор є достатньо тривалими (в нашому випадку очікуваний характерний час при 300 К складав близько 13000 с), то необхідною є висока стабілізації інтенсивності випромінювання діоду, яке, як відомо, залежить як від температури пристрою, так і від споживаного струму. З цією метою він розміщувався в термостаті на базі схеми W1209, а живлення здійснювалося за допомогою спеціально розробленої схеми з позитивним зворотнім зв'язком та цифровим керуванням (детальніше дані блоки описані у попередньому звіті).

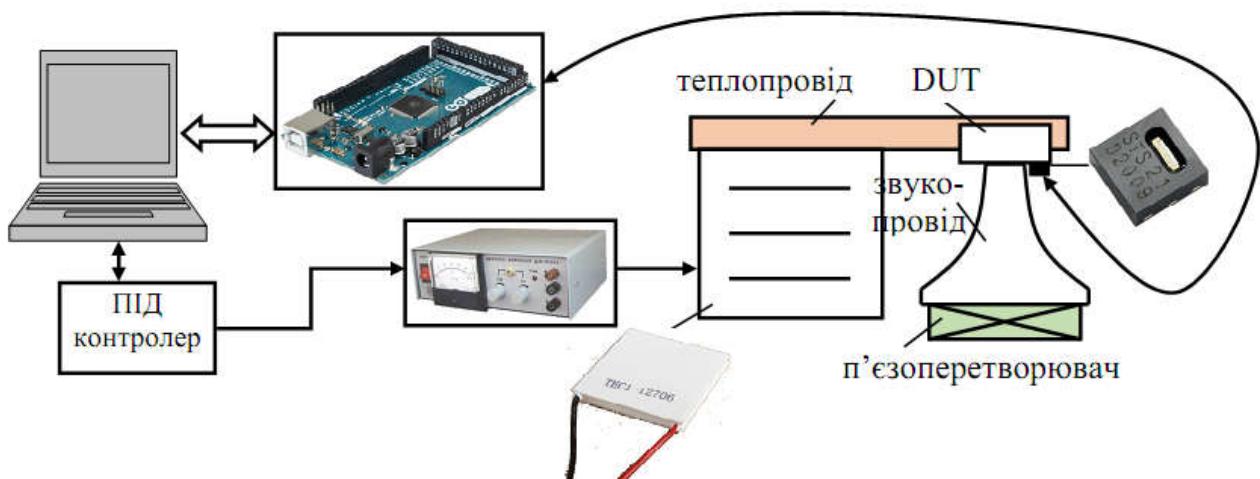


Рисунок 2.2 – Схема контролю та вимірювання температури КСЕ

По-друге, особлива увага була приділена точності вимірювання температури КСЕ (схема відповідного блоку наведена на рис. 2.2). DUT розміщувався в термостаті, температура якого регулювалася за допомогою термоелектричного нагрівача, стабілізувалася з використанням програмно реалізованого пропорційно-інтегрально-диференціального контролера та вимірювалася цифровим датчиком STS-21 (або HTU21D), розташованим безпосередньо на поверхні КСЕ. Система дозволяла вимірювати температуру з точністю до 0,01 К та ефективно підтримувати її на протязі довгого проміжку

часу (десятки годин) в діапазоні  $\pm 0,05$  К від необхідного значення.

По-третє, вимірювання ВАХ могли бути проведені в умовах поширення в КСЕ ультразвуку. Загальна схема УЗН представлена на рис. 2.3. Для збудження пружних хвиль використовувалися п'єзоелектричні перетворювачі, виготовлені з пластин ніобату літію (зріз  $Y+36^\circ$  у випадку повздовжніх хвиль та  $Y+163^\circ$  для поперечних) або п'єзокераміки ЦТС19. Обидві грані пластин були металізовані шляхом вакуумного напилення алюмінію. Проводилося збудження пружних коливань на частотах  $f_{US}$ , які відповідають власним товщинним коливанням (перша, третя та п'ята (для одного перетворювача) гармоніки). Крім того, у випадку п'єзокерамічного перетворювача введення поперечних хвиль у зразок відбувалося завдяки збудженню радіальних коливань.

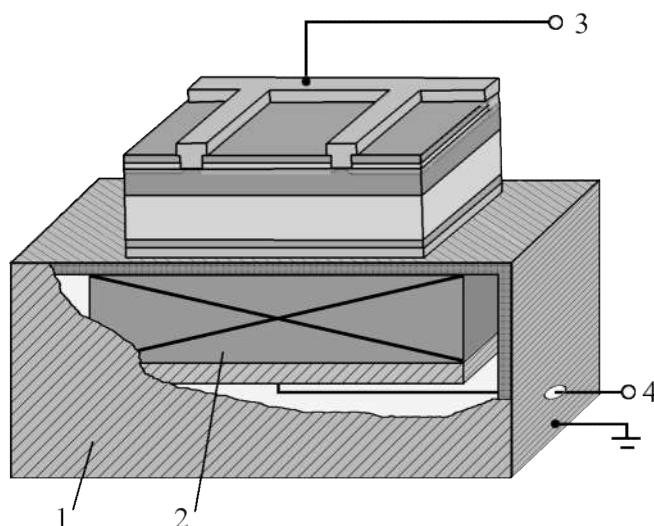


Рисунок 2.3 – Схема УЗН кремнієвих сонячних елементів.

1 – екран-звукопровід (мідна фольга); 2 – п'єзоелектричний перетворювач; 3 – контакти для вимірювання ВАХ; 4 – контакти для збудження УЗ

Відомо, що акустичні коливання п'єзоелектричних матеріалів супроводжуються значними електричними полями, які, проникаючи в КСЕ, здатні як суттєво впливати на стан дефектів, так і спотворювати результати вимірювання ВАХ. З метою перешкоджання подібним явищам проводилося

екранування п'єзоелектричних полів за рахунок розташування між п'єзоперетворювачем та КСЕ заземленого екрану, у ролі якого виступала тонка мідна фольга (1 на рис. 2.3). Для створення акустичного контакту використовувалися клей БФ6 та вакуумне масло.

Для оцінки інтенсивності акустичної хвилі (AX)  $W_{\text{US}}$ , введеної у напівпровідникову структуру, використовувалася формула плоского п'єзо перетворювача [74]:

$$W_{\text{US}} = 4K_p^2 C_p f_r \frac{\rho_p \vartheta_p}{\rho_{\text{Si}} \vartheta_{\text{Si}}} \frac{V_{\text{RF}}^2}{A_p M_0}, \quad (2.1)$$

де

$K_p$  – коефіцієнт електромеханічного зв'язку, для LiNbO<sub>3</sub>(Y+36°)  $K_p^2=0,24$ , для LiNbO<sub>3</sub>(Y+163°) - 0,46, для ЦТС19 - 0,40;

$C_p$  – статична ємність закріпленого перетворювача, Ф;

$f_r$  – частота резонансу перетворювача, Гц;

$\rho_p$  – густина матеріалу п'єзоперетворювача, 4700 кг/м<sup>3</sup> (LiNbO<sub>3</sub>), 7500 кг/м<sup>3</sup> (ЦТС19);

$\rho_{\text{Si}}$  – густина кремнію, 2328 кг/м<sup>3</sup>;

$v_p$  – швидкість звуку в п'єзоперетворювачі, 7340 м/с (LiNbO<sub>3</sub>, Y+36°), 4560 м/с (LiNbO<sub>3</sub>, Y+163°), 4560 м/с (ЦТС19, повздовжні хвилі), 2600 м/с (ЦТС19, поперечні хвилі);

$v_{\text{Si}}$  – швидкість звуку в КСЕ, враховуючи (100) орієнтацію пластин 9850 м/с для повздовжніх хвиль та 8430 м/с для поперечних;

$V_{\text{RF}}$  – амплітуда високочастотної напруги, прикладеної до перетворювача, В;

$A_p$  – площа перетворювача, м<sup>2</sup>;

а коефіцієнт  $M_0$  розраховується за допомогою співвідношення

$$M_0 = \frac{\left[ \cos\left(\pi \frac{f_{\text{US}}}{f_r}\right) \right]^2 + \left[ \frac{\rho_p \vartheta_p}{\rho_{\text{Si}} \vartheta_{\text{Si}}} \sin\left(\pi \frac{f_{\text{US}}}{f_r}\right) \right]^2}{\left[ \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{f_{\text{US}}}{f_r}\right) \right]^4}. \quad (2.2)$$

Параметри використаних перетворювачів зведені у таблиці 2.1.

Таблиця 2.1 – Параметри п’єзоелектричних перетворювачів

Перетво рювач	Матеріал	$f_r$ , МГц	$f_{us}$ , МГц	Тип хвиль*	$C_p$ , $\pi\Phi$	$A_p$ , мм <sup>2</sup>
L2d4	ЦТС19	2,23	2,39	1	6250	314
		0,32	0,31	t		
L4d1	$\text{LiNbO}_3$	4,02	4,09	1	135	178
		13,41	13,60	1		
L5d4	$\text{LiNbO}_3$	5,33	5,40	1	288	283
		18,90	17,87	1		
L9d0	$\text{LiNbO}_3$	8,53	8,98	1	378	225
		30,42	30,74	1		
T5d5	$\text{LiNbO}_3$	5,55	5,94	t	480	200
		17,27	20,74	t		
T5d2	$\text{LiNbO}_3$	4,95	5,23	t	520	192
		15,89	16,03	t		
		26,83	26,80	t		
T8d9	$\text{LiNbO}_3$	8,94	8,96	t	1040	192
		27,54	28,02	t		

\* 1 – повздовжні хвилі, t – поперечні хвилі

При аналізі можливих механізмів виявленіх акустоіндукованих ефектів проводилися також розрахунки відносної деформації гратки при поширенні УЗ:

$$\xi_{us} = \sqrt{\frac{2W_{us}}{\rho_{Si} \vartheta_{Si}^3}} \quad (2.3)$$

та амплітуди зміщень атомів

$$u_{\text{US}} = \frac{1}{\pi f_{\text{US}}} \sqrt{\frac{W_{\text{US}}}{2\rho_{\text{Si}} g_{\text{Si}}}}. \quad (2.4)$$

Для досліджень було використано зразки КСЕ дифузійно-польового типу зі структурою  $n^+ - p - p^+$  - див. рис. 2.4а.

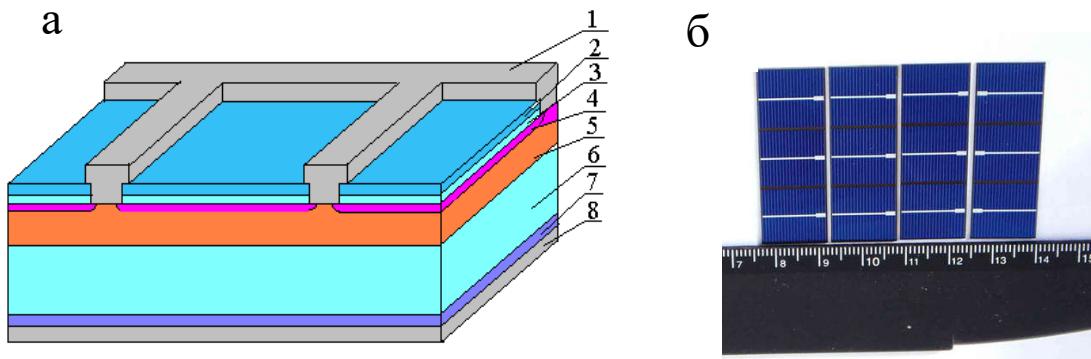


Рисунок 2.4а – Схема структури досліджених КСЕ. 1 – фронтальний електрод (Al); 2 – шар нітриду кремнію; 3 – діелектричний шар  $\text{SiO}_2$ ; 4 – індукований  $n^{++}$ -шар; 5 – дифузійний  $n^+$ -шар; 6 – базова область ( $p$ -Si); 7 – дифузійний  $p^+$ -шар; 8 – тилова металізація (Al). б – Фотографія реальних КСЕ

Виготовлені вони були з монокристалічних (100) пластин  $p$ -типу кремнію товщиною 380 мкм марки КДБ-10 (кремній дірковий легований бором з питомим опором 10 Ом·см), концентрація вільних носіїв  $p_0$  в якому складала близько  $1,36 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ . Пластини вирізані зі злитків, вирощених за методом Чохральського.  $P-n$  перехід було створено шляхом дифузії фосфору при температурі  $940^\circ\text{C}$  з газової фази ( $\text{POCl}_3$ ). Товщина  $n^+$ -шару складала 0,7 мкм, його поверхневий опір 20-30 Ом/□. Антирекомбінаційний ізотипний перехід на тиловій поверхні створено за допомогою  $p^+$  шару, який сформовано дифузією бору при температурі  $985^\circ\text{C}$  з газової фази ( $\text{BCl}_3$ ). Товщина цього шару та поверхневий опір – 0,6 мкм та 10-20 Ом/□ відповідно. На фронтальній поверхні КСЕ були наявні також просвітлюючі покриття з двоокису кремнію  $\text{SiO}_2$  товщиною 30 нм і нітриду кремнію  $\text{Si}_3\text{N}_4$  товщиною 40 нм. Також на поверхнях КСЕ було сформовані за допомогою методу магнетронного

роздилення алюмінієві контакти: суцільний на тиловій і та гребінчастий на фронтальній. В експериментах використовувалися зразки розміром  $1,52 \times 1,523$  см<sup>2</sup> - рис. 2.4б.

Як було встановлено, що джерелом домішкового заліза в структурах були недостатньо чисті хімічні реактиви, які використовувалися у технологічному процесі. Для досліджень впливу УЗН на процеси трансформації пар залізо-бор було відібрано зразки з різним ступенем забруднення залізом ( $N_{Fe} = (0,4 \div 4) \cdot 10^{13}$  см<sup>-3</sup>).

## 2.2 Методика екстрагування параметрів дефектів, пов'язаних із залізом

У роботі індикатором стану дефектів, пов'язаних із залізом, у КСЕ слугувала ВАХ. У зв'язку з цим була розроблена методика, яка дозволяла визначати характеристики дефектів з аналізу часових залежностей параметрів ВАХ, зокрема струму короткого замикання (СКЗ,  $I_{SC}$ ).

Відомо [23,24,41] що дисоціація пар FeB може бути здійснена шляхом інтенсивного освітлення при кімнатній температурі, інжекцією неосновних носіїв заряду або шляхом відпалу при температурі близько 200°C. В нашому випадку реалізовувалось світло-індукована дисоціація пар шляхом освітлення галогеновою лампою; інтенсивність освітлення  $W_{ill} = 0,08 \div 0,2$  Вт/см<sup>2</sup>, час  $t_{ill}$  – до 30 с. Після припинення інтенсивного освітлення проводилися вимірювання кінетики СКЗ. Визначення СКЗ відбувалося при використанні монохроматичного освітлення з довжиною хвилі  $\lambda = 940$  нм – типова залежність  $I_{SC}(t)$  наведена на рис. 2.5. Як показали розрахунки за методикою, запропонованою в [75], концентрація нерівноважних носіїв заряду  $\Delta n$  при монохроматичному освітленні не перевищувала  $10^{12}$  см<sup>-3</sup>. Відомо [76], що при таких значеннях розпад пар має викликати зменшення часу життя неосновних носіїв заряду  $\tau$ , а отже і зменшення СКЗ, що і спостерігається на експерименті. Крім того, з рис. 2.5 видно, що величина  $I_{SC}$  повністю відновлюється після зберігання при температурі близько 70°C протягом 50 хв. Це збігається з

очікуваним [41,42] часом, необхідним для відновлення FeB в даних умовах, що також підтверджує взаємозв'язок змін СКЗ та змін стану міжвузольного заліза. Крім того, величини  $\Delta n$  та коефіцієнта заповнення при вимірюванні кінетики СКЗ (0,5%) свідчать, що під дією такого освітлення розпад пар не відбувається.

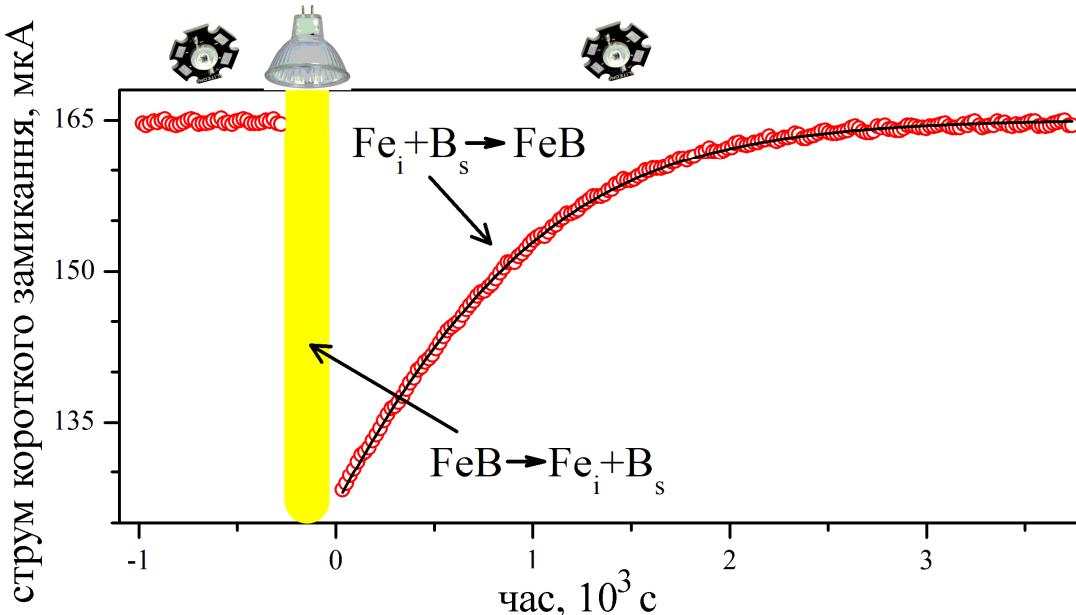


Рисунок 2.5 – Залежність струму короткого замикання до та після інтенсивного освітлення. Початок відліку збігається з моментом закінчення освітлення. Температура 340 К. Точки – експеримент, лінія – апроксимація за методом, описаним в тексті

Для вибраної довжини хвилі фотогенерований струм переважно зумовлюється утворенням електронно–діркових пар у  $p$ –області (базі) КСЕ. Якщо база КСЕ перевищує у декілька разів  $L_n$ , то величина СКЗ може бути записана у наступному вигляді [77,78]:

$$I_{sc}(t) = \frac{W_{ph} (1 - R_{ph}) q \beta \lambda}{hc} \frac{\alpha_{ph} L_n(t)}{1 + \alpha_{ph} L_n(t)}, \quad (2.5)$$

де

$\alpha_{ph} = \alpha_{ph}(T, \lambda)$  - коефіцієнт поглинання світла,  $\text{m}^{-1}$ ;

$W_{ph}$  – світлова потужність, Вт;

$R_{ph}$  – коефіцієнт відбиття;

$\beta$  – коефіцієнт квантового виходу.

Як показали вимірювання  $L_n$  по спектральній залежності внутрішнього квантового виходу, в нашому випадку ця величина становить від 35 до 150 мкм (залежно від зразка) і тому використання виразу (2.5) є цілком віправданим. В свою чергу

$$L_n(t) = \sqrt{\frac{\mu_n k T}{q} \tau(t)}, \quad (2.6)$$

де

$\mu_n$  – рухливість електронів,  $\text{m}^2/(\text{B}\cdot\text{c})$ .

У припущенні, що суттєву роль в рекомбінації відіграють саме дефекти, пов'язані із залізом, для оцінки  $\tau$  відповідно до правила Матісона може бути використаний наступний вираз:

$$\frac{1}{\tau(t)} = \frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_{SRH}^{\text{Fe}_i}(t)} + \frac{1}{\tau_{SRH}^{\text{FeB}}(t)} + \frac{1}{\tau_{\text{other}}}, \quad (2.7)$$

де

$\tau_i$  – час життя, пов'язаний із власною рекомбінацією, с;

$\tau_{SRH}^{\text{Fe}_i}$  та  $\tau_{SRH}^{\text{FeB}}$  пов'язані з рекомбінацією на міжузольних атомах заліза  $\text{Fe}_i$  та на парах  $\text{FeB}$ , відповідно, с;

$\tau_{\text{other}}$  описує решту рекомбінаційних каналів (інші домішки, дефекти кристалічної гратки, поверхнева рекомбінація тощо), с.

Для обчислення  $\tau_{SRH}^{\text{Fe}_i}$  та  $\tau_{SRH}^{\text{FeB}}$  може бути використана ШРХ модель:

$$\tau_{SRH}^{\text{Fe}_i, \text{FeB}}(t) = \frac{\tau_{p0}^{\text{Fe}_i, \text{FeB}}(t)(n_0 + n_1^{\text{Fe}_i, \text{FeB}} + \Delta n) + \tau_{n0}^{\text{Fe}_i, \text{FeB}}(t)(p_0 + p_1^{\text{Fe}_i, \text{FeB}} + \Delta n)}{p_0 + n_0 + \Delta n}, \quad (2.8)$$

де

$n_0$  – рівноважна концентрація електронів в базі, яка може бути отримана за допомогою закону діючих мас,  $\text{m}^{-3}$ ;

$n_1$  та  $p_1$  задаються виразом (1.10), а  $\tau_{n0}$  та  $\tau_{p0}$  – (1.9), причому вважається, що концентрація дефектів залежить від часу.

Відомо, що після розпаду пар часова залежність концентрації міжвузольних атомів заліза описується виразом [25,26]:

$$N_{\text{Fe}}(t) = (N_{\text{Fe},0} - N_{\text{Fe,eq}}) \exp(-t/\tau_{\text{ass}}) + N_{\text{Fe,eq}}, \quad (2.9)$$

де

$N_{\text{Fe},0}$  – концентрація міжвузольних атомів зразу після інтенсивного освітлення,  $\text{M}^{-3}$ ,

$N_{\text{Fe,eq}}$  – та частина міжвузольних атомів заліза з  $N_{\text{Fe},0}$ , які залишаться неспареними в рівноважному стані, відповідно до [26]

$$N_{\text{Fe,eq}}(T, p_0, N_{\text{Fe},0}) = \frac{N_{\text{Fe},0}}{\left[1 + p_0 10^{-23} \exp\left(\frac{0,582}{kT}\right)\right] \left[1 + \exp\left(\frac{E_F - 0,394}{kT}\right)\right]}, \quad (2.10)$$

$\tau_{\text{ass}}$  – характерний час асоціації комплексу, який залежить від концентрації бору та температури, зокрема, у [41,42] для його оцінки запропоновано вираз

$$\tau_{\text{ass}} = 5,7 \cdot 10^5 \frac{c}{K \cdot \text{cm}^3} \frac{T}{p_0} \exp\left(\frac{E_m}{kT}\right), \quad (2.11)$$

де

$E_m$  – енергія міграції міжвузольних атомів заліза, еВ.

В свою чергу, часова залежність концентрації пар залізо-бор  $N_{\text{FeB}}$ , утворених внаслідок асоціації частини з  $N_{\text{Fe},0}$  має описуватися виразом

$$N_{\text{FeB}}(t) = N_{\text{Fe},0} - N_{\text{Fe}}(t). \quad (2.12)$$

Відомо, ступінь дисоціації пар залежить від часу освітлення. У випадку, коли цей час достатній для дисоціації всіх наявних пар величина де  $N_{\text{Fe},0}$  має відповідати повній концентрації атомів домішкового заліза  $N_{\text{Fe,tot}}$ , в протилежному випадку має бути меншою. В останньому випадку  $\tau_{\text{other}}$  також буде враховувати внесок в рекомбінацію пар FeB, які не дисоціювали внаслідок освітлення (і мають концентрацію  $N_{\text{Fe,tot}} - N_{\text{Fe},0} - N_{\text{Fe,eq}}(T, p_0, N_{\text{Fe,tot}} - N_{\text{Fe},0})$ ) та відповідного числа міжвузольних атомів заліза (з концентрацією  $N_{\text{Fe,eq}}(T, p_0, N_{\text{Fe,tot}} - N_{\text{Fe},0})$ ).

В нашому випадку вважалося, що  $\beta = 1$ ,  $R_{ph} = 0,14$  (результат розрахунку,

проведеного для досліджених структур відповідно до [79]). Розрахунок  $a_{ph}(T,\lambda)$  проводився відповідно до [72,73], використані параметри дефектів наведено в таблиці 1.1, теплові швидкості носіїв обчислювалися за даними роботи [17], а рухливість електронів - за теорією Классена [19]. При оцінці  $\tau_i$  враховувалась міжзонна випромінювальна рекомбінація та Оже-рекомбінація, причому відповідні коефіцієнти обчислювалися з використанням виразів, запропонованих в [21,22].

Експериментально виміряна залежність  $I_{SC}(t)$  апроксимувалася відповідно до комплексу наведених вище виразів. Апроксимація проводилася з використанням метаевристичного методу EBL SHADE [80], шуканими параметрами вважалися величини  $W_{ph}$ ,  $\tau_{other}$ ,  $N_{Fe,0}$  та  $E_m$ .

Приклади апроксимації наведені на рис. 2.5 та 2.6. Визначені шляхом апроксимації величини параметрів склали наступні значення.  $W_{ph} = (3,2 \pm 0,3) \cdot 10^{-4}$  Вт. Ця величина добре співпадає зі значенням  $3,1 \cdot 10^{-4}$  Вт, отриманим під час калібрування джерела (див. підрозділ 2.1). У випадку, коли час інтенсивного освітлення перевищує 20 с,  $\tau_{other} > 100$  с, що свідчить про те, що внесок інших рекомбінаційних каналів у досліджених зразках може бути знехтуваний.  $N_{Fe,0} = (2,0 \pm 0,4) \cdot 10^{13}$  см<sup>-3</sup>, що, з одного боку, є достатньо типовою величиною для сонячного кремнію, а з другого – є близьким до значень ( $0,9 \cdot 10^{13}$  см<sup>-3</sup>), отриманих за допомогою методу дослідження спектральної залежності струму короткого замикання [24, 81]. Нарешті, отримане значення енергії міграції атомів заліза склало  $E_m = (0,655 \pm 0,002)$  еВ. Ця величина збігається з відомим в літературі [41,42,82, 83] значенням ( $0,66 \pm 0,01$ ) еВ.

Додатковим підтвердженням застосовності даного методу визначення параметрів є особливості розпаду пар, виявлені під час досліджень і які збігаються з описаними в літературі. А саме, були проведені вимірювання кінетики відновлення струму короткого замикання після освітлення галогеновою лампою з різною тривалістю. Типові приклади наведені на рис. 2.7. Видно, що в цьому випадку час відновлення СКЗ не міняється, тоді як амплітуда світло-індукованих змін залежить від час освітлення. Подальша

апроксимація дозволила оцінити кількість пар, що дисоціювали внаслідок освітлення  $N_{\text{Fe},0}$ , як функцію  $t_{\text{ill}}$  – див. рис. 2.8.

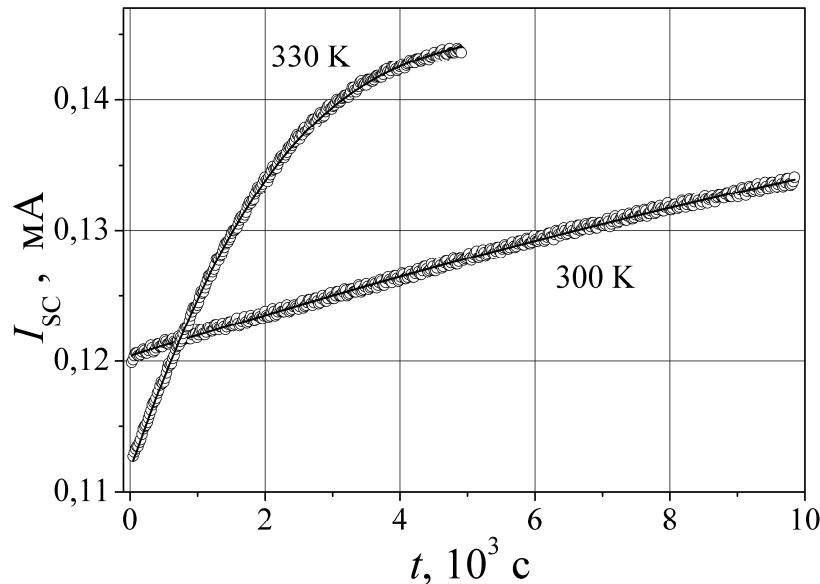


Рисунок 2.6 – Кінетика струму короткого замикання КСЕ після інтенсивного освітлення при різних температурах. Точки – експеримент, лінії – апроксимація

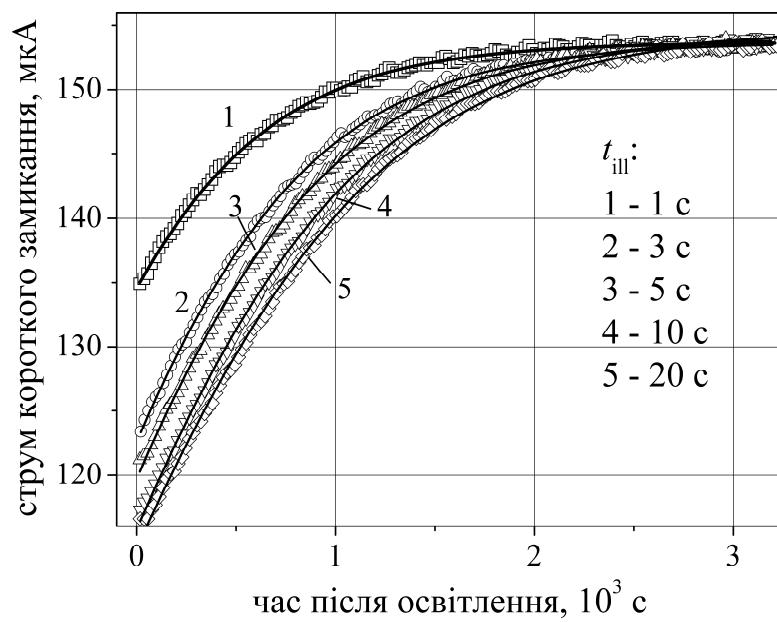


Рисунок 2.7 – Кінетика струму короткого замикання КСЕ після інтенсивного освітлення різної тривалості.  $T = 340$  К. Точки – експеримент, лінії – апроксимація

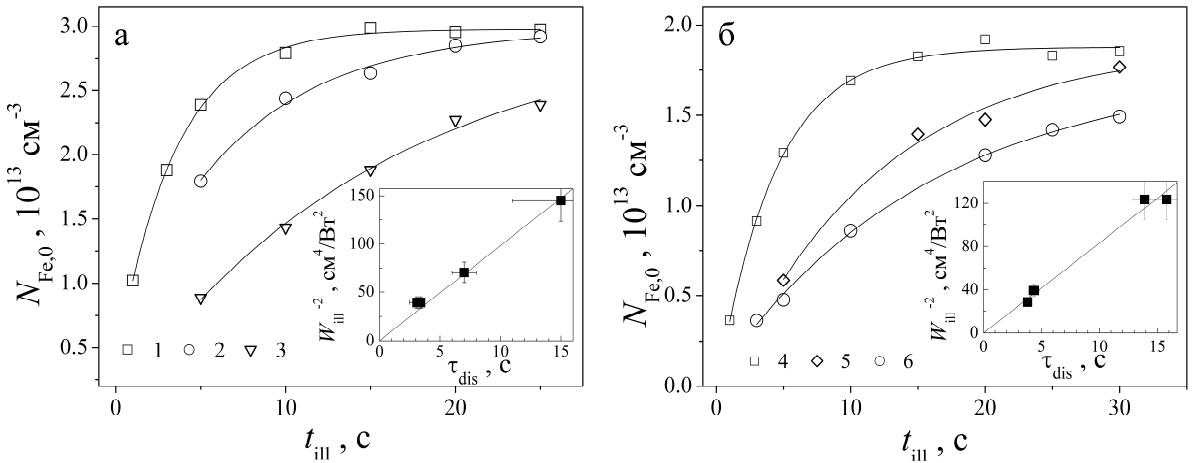


Рисунок 2.8 – Залежності концентрації дисоційованих пар FeB від часу освітлення. Точки - – експеримент, лінії – апроксимація за формулою (2.13).  $W_{ill}$ ,  $\text{Bt}/\text{cm}^2$ : 0,16 (1, 4, 5), 0,12 (2), 0,09 (6) 0,08 (3).  $T$ , К: 340 (1-4, 6), 320 (5). Частини а та б наведено для різних зразків. Вставки – Залежності характерного часу дисоціації від  $W_{ill}^{-2}$ . Лінії – апроксимація за формулою  $\tau_{dis} = const \cdot W_{ill}^{-2}$

Видно, що зі збільшенням часу освітлення  $N_{Fe,0}$  зростає, поступово досягаючи насичення. Ці цілком збігається з результатами попередніх досліджень [23,41,42], які передбачають експоненційний спад кількості пар при зростанні тривалості освітлення. Насичення відповідає повній дисоціації. Експериментальні залежності були апроксимовані наступним виразом

$$N_{Fe,0}(t_{ill}) = A \exp(-t_{ill} / \tau_{dis}) + N_{Fe,fit}. \quad (2.13)$$

де

$\tau_{dis}$  – характерний час дисоціації, с;

$N_{Fe,fit}$  – концентрація дисоційованих пар, що відповідає насиченню,  $N_{Fe,fit} \approx N_{Fe,tot}$ .

Відомо [23,42, 84], темп дисоціації FeB має бути прямопропорційним квадрату інтенсивності освітлення. На вставках рис. 2.8 наведені залежності  $\tau_{dis}$  від  $W_{ill}^{-2}$ , лінійність яких свідчить на користь запропонованого методу оцінки параметрів дефектів. Крім того, відомо [85] що час дисоціації має

зменшуватися приблизно вдвічі при підвищенні температури на 20°C. В нашому випадку для зразка #350\_2 при 320 K  $\tau_{\text{dis}} = (11 \pm 4)$  с, тоді як при 340 K –  $(4,3 \pm 0,3)$  с, що повністю відповідає очікуванням.

Крім того, якщо величина  $t_{\text{ill}}$  така, що  $N_{\text{Fe},0}$  не відповідає насиченню,  $\tau_{\text{other}}$  змінюється в інтервалі  $10^{-6} \div 10^{-4}$  с і зростає зі збільшенням часу освітлення. Як вже зазначалося, в рамках запропонованого наближення це означає, що  $\tau_{\text{other}}$  в цьому випадку пов'язана з рекомбінацією на залізо-вмісних дефектах, які не перебудовуються. Для перевірки були розраховані величини  $\tau_{\text{other}}^{\text{calc}}$ :

$$\tau_{\text{other}}^{\text{calc}} = \left( \left( \tau_{\text{SHR}}^{\text{Fe}_i} \right)^{-1} + \left( \tau_{\text{SHR}}^{\text{FeB}} \right)^{-1} \right)^{-1}. \quad (2.14)$$

де для обчислень  $\tau_{\text{SHR}}^{\text{Fe}_i}$  та  $\tau_{\text{SHR}}^{\text{FeB}}$  використано вираз (2.8), причому вважалося, що концентрація міжузольних атомів заліза  $N_{\text{Fe}} = N_{\text{Fe,eq}}(T, p_0, N_{\text{Fe,tot}} - N_{\text{Fe},0})$ , а концентрація пар –  $N_{\text{FeB}} = N_{\text{Fe,tot}} - N_{\text{Fe},0} - N_{\text{Fe}}$ . Виявилося, що значення  $\tau_{\text{other}}$  та  $\tau_{\text{other}}^{\text{calc}}$ , отримані в одинакових умовах, дуже близькі (див. рис. 2.9), коефіцієнт кореляції дорівнює 0,98.

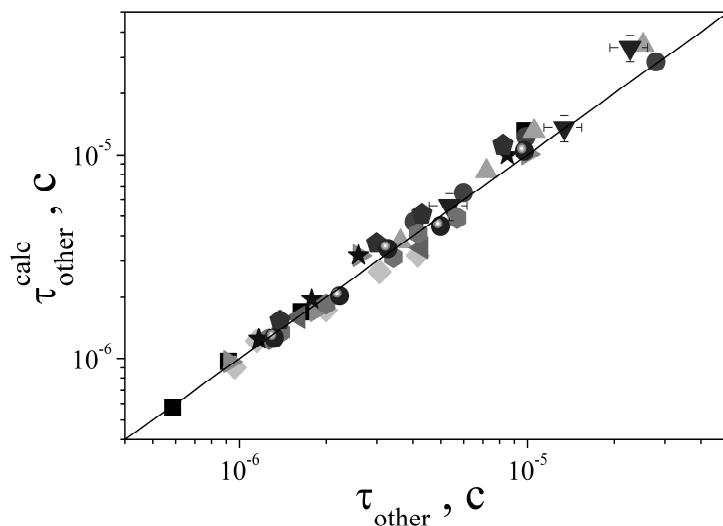


Рисунок 2.9 – Співвідношення між  $\tau_{\text{other}}$  та величиною, розрахованою на основі  $N_{\text{Fe},0}$  та  $N_{\text{Fe,fit}}$  (див. текст). Різні точки відповідають різним зразкам та умовам освітлення. Суцільна лінія істинності наведена для зручності

Таким чином, запропоновано методику визначення параметрів залізомісних дефектів в КСЕ, що базується на вимірюванні кінетики струму короткого замикання після інтенсивного освітлення [86]. Фактично, час відновлення СКЗ є індикатором значення енергії міграції атомів заліза, а амплітуда світло-індукованих змін СКЗ пов'язана з концентрацією пар FeB, які розпалися.

### 2.3 Кількісні параметри впливу світло-індукованого розпаду пар Fe-B на характеристики кремнієвих сонячних елементів

З метою визначення впливу розпаду пар FeB на характеристики КСЕ вимірювання їхніх ВАХ як у темряві, так при освітленні (монохроматичному:  $\lambda = 940$  нм,  $W_{ph} \approx 3 \cdot 10^{-4}$  Вт/см<sup>2</sup>) та за стандартних умов енергетичної освітленості: спектр AM1,5,  $W_{ph} \approx 0,1$  Вт/см<sup>2</sup>) до та після високоінтенсивного освітлення ( $W_{ill} = 0,1 \div 0,2$  Вт/см<sup>2</sup>,  $t_{ill} = (15 \div 20)$  с) при температурах 300  $\div$  340 K. Типові ВАХ представлені на рис. 2.10.

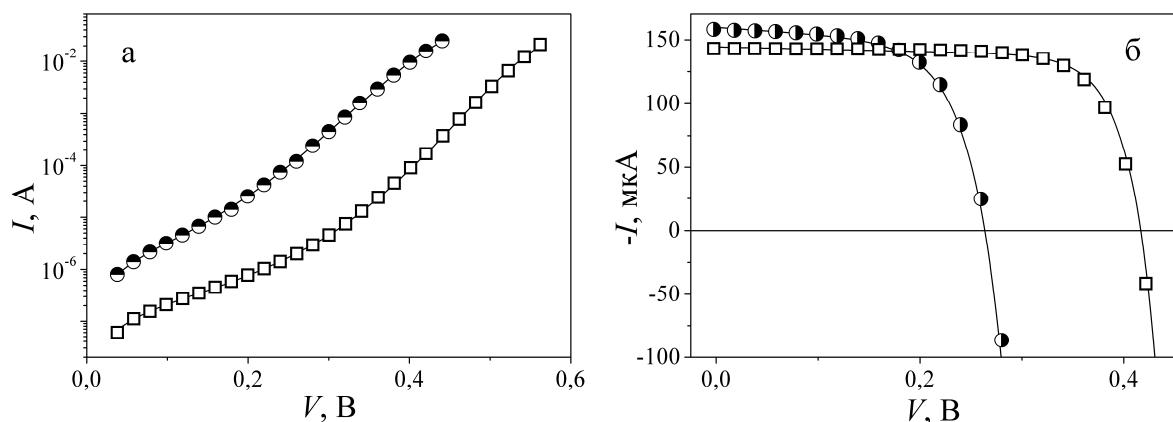


Рисунок 2.10 – Типові темнові (а) та світлові при монохроматичному освітленні (б) ВАХ КСЕ.  $T, K: 290$  (квадрати),  $340$  K (кола). Точки – експеримент, лінії – апроксимація. Зразок #350\_1

Темнові ВАХ апроксимувалися відповідно до дводіодної моделі (формула (1.13)) з використанням методу IJAVA [36]. З освітлених ВАХ

визначалися  $I_{SC}$ , напруга розімкнутого кола  $V_{OC}$ , фактор заповнення  $FF$  та максимальна вихідна потужність  $P_m$  (для монохроматичного освітлення) або коефіцієнт корисної дії  $\eta$  (за стандартних умов освітленості). При цьому застосовувався підхід, запропонований в роботі [87], який базується на нелінійній апроксимації різних ділянок ВАХ.

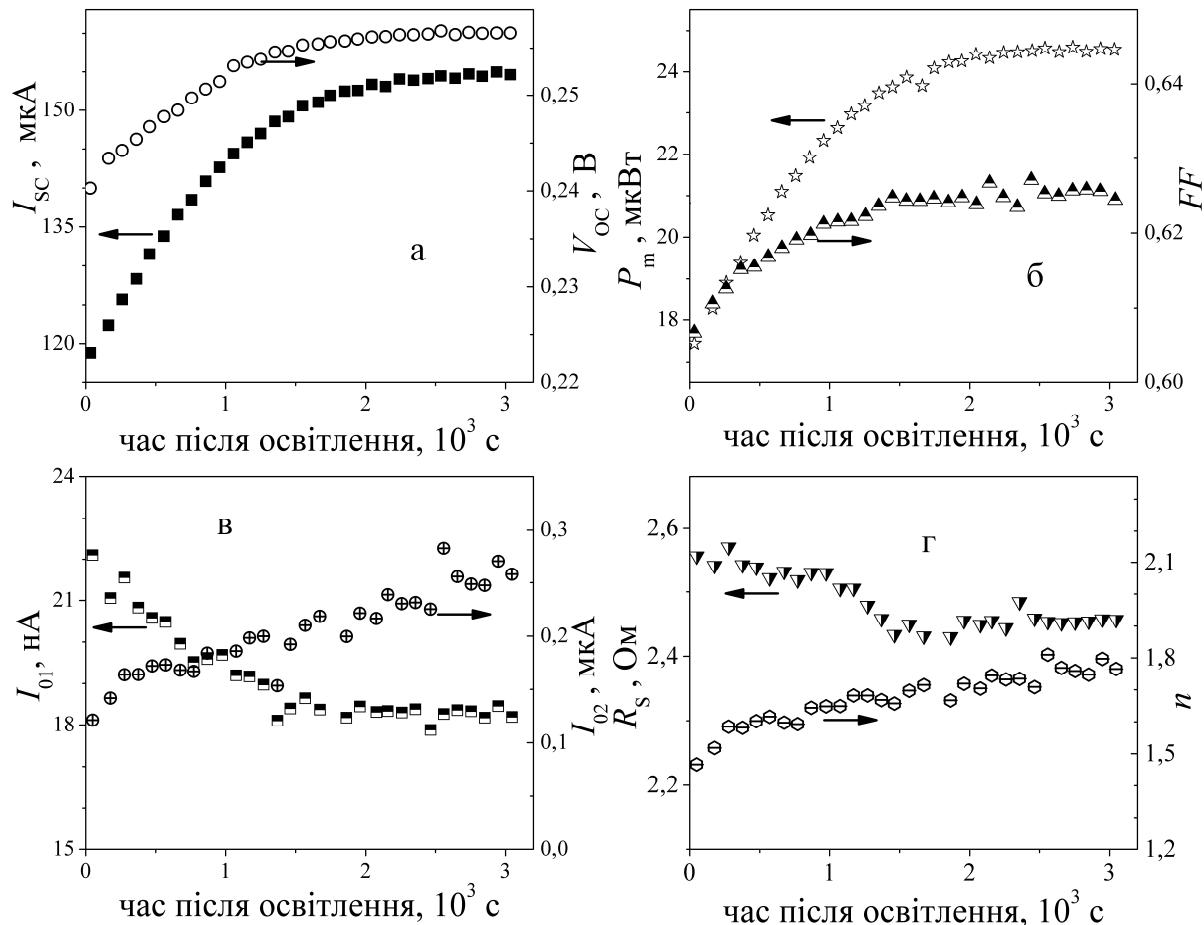


Рисунок 2.11 – Кінетика зміни СКЗ, напруги розімкненого кола (а), максимальної вихідної потужності, коефіцієнта форми (б), рекомбінаційних струмів для квазі-нейтральній області та в ОПЗ (в), фактору неідеальності та послідовного опору (г). Зразок #350\_1.  $T = 340$  К

Як показано у попередньому підрозділі, зміни СКЗ при монохроматичному освітленні безпосередньо пов'язані зі процесами трансформації пар FeB. Тому основним критерієм того, що розпад пар FeB впливає на певний параметр була схожість кінетичних залежностей зміни

цього параметру після освітлення із залежностями, зареєстрованими для  $I_{SC}$ . На рис. 2.11 та 2.12 представлено типові залежності змін параметрів КСЕ після інтенсивного освітлення, екстрагованих як з темнових ВАХ, так і ВАХ, отриманих при монохроматичному освітленні при різних температурах. Видно, що розпад пар викликає зменшення всіх чотирьох параметрів, що характеризують фотоелектричне перетворення ( $I_{SC}$ ,  $V_{OC}$ ,  $P_m$  та  $FF$ ). Визначені значення параметрів узагальнено в таблиці 2.2. Величини зміни суттєво залежить від типу параметру та температури.

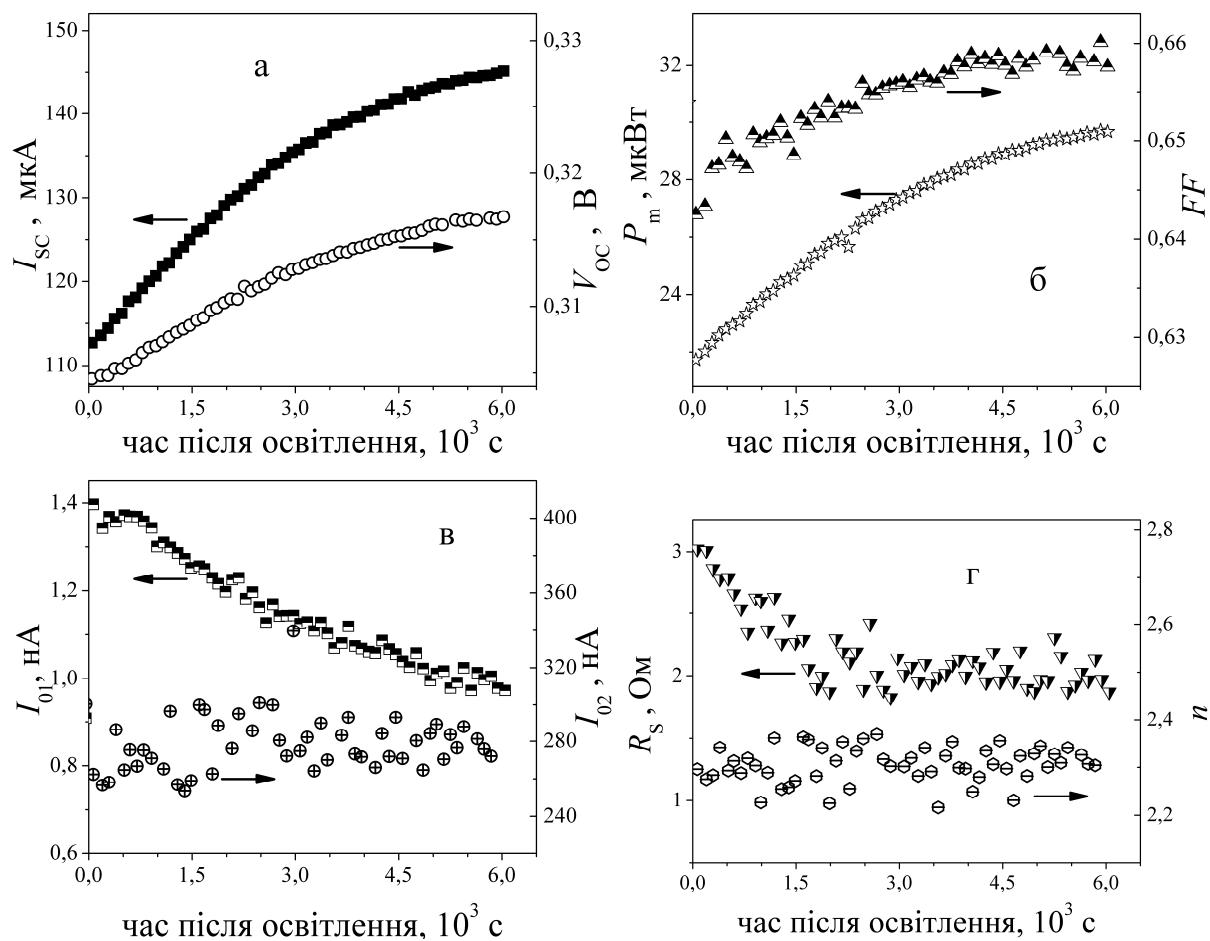


Рисунок 2.12 – Те саме, що й на рис. 2.11.  $T = 320$  К

Щодо характеристик КСЕ, отриманих з темнових ВАХ, то тут ситуація складніша. З впевненістю можна сказати, що розпад пар FeB спричинює зростання струму насищення, пов'язаного з рекомбінаційними процесами в ОПЗ ( $I_{01}$ , див. рис. 2.119в та 2.12в). Це є цілком очікуваним, так як в підрозділі 2.2 показано, що для досліджуваних зразків впливом інших рекомбінаційних

каналів, крім тих, що пов'язані з домішковим залізом, можна знехтувати ( $\tau_{other} > 100$ ). Розпад пар викликає підсилення рекомбінаційних процесів завдяки більшим коефіцієнтам захоплення електронів міжвузольним залізом порівняно з парою FeB, а отже і до збільшення  $I_{01}$ .

Таблиця 2.2 – Фотоелектричні параметри КСЕ до та після інтенсивного освітлення, отримані при монохроматичному освітленні

Зразок	$N_{Fe}$ , $10^{13} \text{ см}^{-3}$	$T$ , К	Освіт- лення	$I_{SC}$ , мкА	$V_{OC}$ , В	$FF$ , %	$P_m$ , мкВт	$I_{01}$ , нА
1	2	3	4	5	6	7	8	9
#403_1	0,4	340	без	156	0,102	25,4	4,04	30
			після	137	0,090	25,3	3,3	36
		320	без	143	0,095	25,1	3,4	2,7
			після	124	0,083	25,0	2,8	2,9
		300	без	132	0,089	25,6	3,00	0,070
			після	117	0,080	25,6	2,45	0,077
#403_2	1,0	340	без	170	0,127	25,9	5,6	30
			після	144	0,110	27,1	4,3	36
		320	без	158	0,121	26,1	5,00	2,7
			після	129	0,103	25,7	3,85	3,0
		305	без	150	0,115	26,8	4,6	0,31
			після	120	0,098	25,4	3,5	0,35
#350_1	3,3	340	без	154	0,256	62,6	24,8	18
			після	119	0,240	61,0	17,4	22
		320	без	147	0,319	65,9	30,8	1,04
			після	112	0,305	64,4	21,7	1,35
		300	без	144	0,381	71,7	39,3	0,053
			після	104	0,364	70,3	26,5	0,059

Кінець таблиці 2.2

1	2	3	4	5	6	7	8	9
#320	0,2	340	без	155	0,258	64,2	25,8	
			після	148	0,255	64,0	24,2	
		320	без	149	0,318	69,5	33,0	
			після	137	0,316	69,3	30,1	
		300	без	143	0,375	73,5	40,3	
			після	127	0,367	73,5	34,3	
#341_1	4,2	340	без	164	0,190	36,7	11,4	22
			після	128	0,167	34,0	7,2	28
		320	без	155	0,214	37,1	12,3	1,26
			після	117	0,185	36,4	7,9	1,62
		300	без	145	0,225	40,1	13,2	0,058
			після	108	0,196	40,5	8,5	0,071
#349_1	1,0	340	без	174	0,265	64,3	29,5	24
			після	146	0,255	63,7	23,7	79
		320	без	165	0,324	69,6	36,8	0,332
			після	136	0,314	69,3	29,5	0,635
		300	без	157	0,384	73,9	44,7	0,013
			після	126	0,318	73,7	35,2	0,017

Параметри, пов'язані з процесами в ОПЗ ( $I_{02}$  та фактор неідеальності) після розпаду пар зменшуються – див. рис. рис. 2.11в та 2.11г. Проте їхні зміни достатньо невеликі і зменшуються при зменшенні температури: так при 340 К ці зміни несуттєво переважають точність вимірювань (рис.2.11в та 2.11г), а при  $T \leq 320$  К фактично не спостерігаються (рис.2.12в та 2.12г, для менших температур графіки не наведені). Крім того, вищеозначені світлоіндуковані зміни  $I_{02}$  та  $n$  спостерігаються лише у зразках з високою концентрацією заліза ( $N_{Fe} > 2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ ). Все це свідчить про те, що в ОПЗ суттєвим є внесок інших

рекомбінаційних каналів. Цікаво, що в підрозділі 1.3 показано, що розпад пар може викликати саме зменшення коефіцієнта неідеальності в КСЕ (внаслідок перерозподілу в ОПЗ додатно заряджених іонів заліза), причому ефект має збільшуватися з підвищеннем концентрації заліза у структурах з  $N_{\text{Fe}} > 10^{15} \text{ см}^{-3}$ .

Також виявлено, що після освітлення спостерігається збільшення величини послідовного опору – див. рис. 2.11г та 2.12г. Проте час відновлення цієї величини в темряві не залежить від температури і складає значення близько 1500 с. А отже, зміну  $R_s$  не можна пов'язати зі зміною стану міжвузольного заліза. Щодо шунтувочого опору, то змін його величини після інтенсивного освітлення не виявлено.

Строга апроксимація кінетичних залежностей інших параметрів, подібно до описаної у підрозділі 2.2 для СКЗ, вимагає інформації про значну кількість характеристик, пов'язаних як з рекомбінаційними процесами не лише на дефектах, пов'язаних із залізом, так із альтернативними механізмами проходження струму (позабар'єрний рух, тунелювання тощо). Тому на практиці такий шлях є важкореалізовним. Крім того, як показують отримані результати, точне визначення кінетичних характеристик зміни ряду параметрів є утрудненим через їхню слабку залежність від стану міжвузольного заліза – насамперед це стосується коефіцієнта форми та напруги холостого ходу.

У таблиці 2.2 окрім узагальненої інформації щодо кількісних змін параметрів КСЕ після розпаду пар FeB при різних температурах, також наведено значення концентрації заліза, отримані з релаксації  $I_{\text{SC}}$  за умов повного розпаду пар. Видно, що величини змін залежать також і від концентрації заліза у конкретному зразку. В подальшому акцентуємо увагу на відносних змінах кожного з параметрів:

$$\varepsilon A = \Delta A / A_{\text{FeB}} \times 100\% = (A_{\text{FeB}} - A_{\text{Fe}}) / A_{\text{FeB}} \times 100\%, \quad (2.15)$$

де

$A$  – параметр КСЕ ( $I_{\text{SC}}$ ,  $V_{\text{OC}}$ ,  $P_m$ ,  $FF$ ,  $\eta$  чи  $I_{01}$ ),

індекс «FeB» відповідає значенню параметра у рівновазі, індекс «Fe» - зразу після освітлення.

На рис. 2.13 наведено температурні залежності відносних змін  $I_{SC}$ ,  $V_{OC}$ ,  $P_m$ ,  $FF$ , та  $I_{01}$ . Так, розпад FeB викликає зменшення  $I_{SC}$  приблизно на (20-25)% при  $N_{Fe} \geq 10^{13} \text{ см}^{-3}$ , причому зі зростанням температури відгук зміни струму короткого замикання на розпад пар несуттєво зменшується.

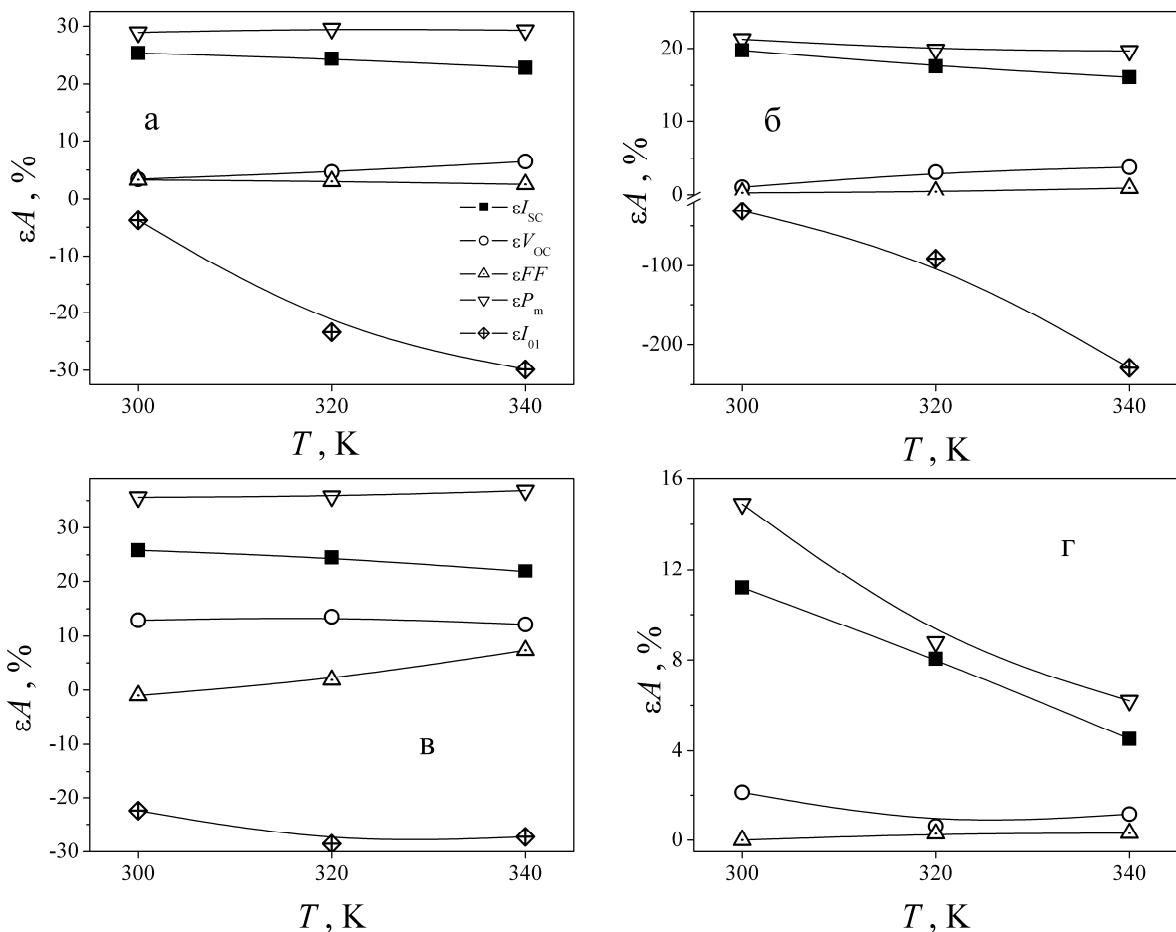


Рисунок 2.13 – Температурні залежності відносних змін параметрів КСЕ внаслідок розпаду пар FeB для зразків #350\_1 (а), #349\_1 (б), #341\_1 (в) та #320 (г). Фотоелектричні параметри отримані при монохроматичному освітленні

Максимально чутливим до зміни стану дефектного комплексу є максимальна вихідна потужність, причому  $\varepsilon P_m$  практично не залежить від температури в дослідженному діапазоні. Певні відхилення спостерігаються для зразка #320, але в цьому випадку концентрація заліза є значно меншою.

Зменшення напруги розімкнутого кола та фактору форми внаслідок розпаду пар набагато менші. Так, наприклад, в більшості випадків  $\varepsilon V_{OC}$  не

перевищує 10%. При розгляді  $V_{OC}$  необхідно взяти до уваги, що знехтувавши впливом послідовного та шунтуючого опорів у випадку  $I_{SC} \approx I_{ph} \gg I_{02}, I_{01} \approx I_0$  вираз для неї може бути записаний у вигляді

$$V_{OC} = \frac{n k T}{q} \ln \left( \frac{I_{SC}}{I_0} + 1 \right). \quad (2.16)$$

Тобто, якщо розпад пар безпосередньо спричинює зменшення довжини дифузії неосновних носіїв, а отже і  $I_{SC}$ , то для  $V_{OC}$  має місце логарифмічна залежність від струму короткого замикання, причому при зменшенні температури залежність послаблюється. Враховуючи, що в нашому випадку  $I_{SC}/I_0 \gg 1$  та нехтуючи зміною величини струму насищення внаслідок розпаду пар, для відносної зміни  $V_{OC}$  можна наблизено записати:

$$\varepsilon V_{OC} \approx \frac{n k T}{V_{OC,FeB} I_{SC,FeB}} \varepsilon I_{SC}. \quad (2.17)$$

Таким чином, зменшення абсолютноого значення  $V_{OC}$  зі зростанням температури також є причиною зменшення чутливості даного параметру до стану домішкової пари при охолодженні. Подібні міркування застосовні і до фактору форми ВАХ: як наслідок при кімнатних температурах зміни цього параметра після розпаду пар FeB мінімальні.

Зауважимо, що для зразків #403 та #341\_1 характерним є мале значення коефіцієнту форми (блізько 0,25 та 0,4 порівняно з ~0,65 для інших структур), що найшвидше пов'язане з наявністю важливих рекомбінаційних каналів окрім залізо-вмісних дефектів. На нашу думку, саме це і є причиною відмінностей абсолютнох значень  $\varepsilon V_{OC}$  та  $\varepsilon FF$  для цих зразків.

Відносні зміни фактично кожного з параметрів КСЕ зростають зі збільшенням концентрації заліза (не вдалося виявити монотонної залежності лише для  $\varepsilon I_{01}$ ). Достатньо цікавим є питання щодо можливості оцінки концентрації цієї домішки за величинами світлоіндукованих змін. Зауважимо, що з цієї точки зору найбільш перспективними виглядають СКЗ та максимальна вихідна потужність. На рис. 2.14 представлена концентраційні

залежності  $\varepsilon I_{SC}$  та  $\varepsilon P_m$ . Видно, що отримані залежності добре описуються лінійними функціями

$$\varepsilon I_{SC} \approx C_{SC}(T) + (14 \pm 2) \cdot \log N_{Fe}, \quad (2.18)$$

$$\varepsilon P_m \approx (12 \pm 1) + (8,5 \pm 0,8) \cdot 10^{-13} \cdot N_{Fe}, \quad (2.19)$$

де  $C_{SC}$  залежить від температури (змінюється від -150 при 300 К до -180 при 340 К), а чисельні коефіцієнти записані для випадку, коли  $\varepsilon I_{SC}$  та  $\varepsilon P_m$  вимірюються у відсотках, а  $N_{Fe}$  – в  $\text{см}^{-3}$ . Фактично запропоновані залежності (2.18) та (2.19) можуть бути використані для оцінки концентрації домішкового заліза в КСЕ, причому слабка температурна залежність  $\varepsilon P_m$  спрощує оцінку  $N_{Fe}$ , дозволяючи не зважати на цей параметр.

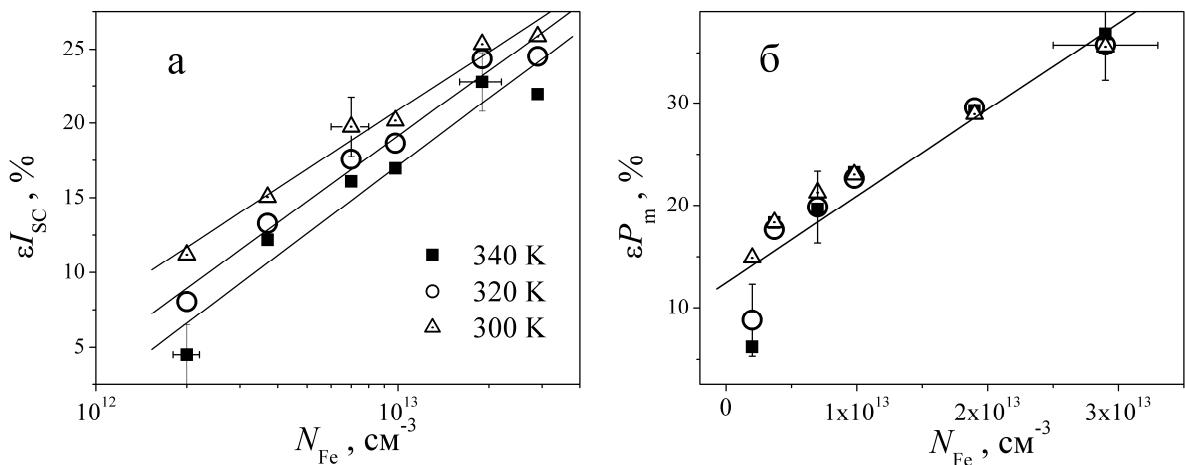


Рисунок 2.14 – Залежності відносних змін СКЗ (а) та максимальної вихідної потужності (б) внаслідок розпаду пар FeB від концентрації заліза.  $I_{SC}$  та  $P_m$  отримані при монохроматичному освітленні. Точки – експеримент, прямі – лінійна апроксимація (для  $\varepsilon I_{SC}$  для кожної температури окремо, для  $\varepsilon P_m$  – всіх значень)

При вивченні впливу розпаду пар FeB на параметри КСЕ за стандартних умов енергетичної освітленості вимірювання кінетики відновлення характеристик не проводилося. В цьому випадку основним критерієм зв'язку параметру з залізовмісними дефектами вважався сам факт його відновлення

при збереженні зразка у темряві та час відновлення при температурах 21°C та 90°C, який порівнювався з  $\tau_{ass}$  (формула (2.11)). Виявлені зміни параметрів узагальнено в таблиці 2.3, а на рис.2.15 представлено їхні відносні зміни. Як видно з наведених даних, результати, отримані при використанні сонячного імітатора, загалом, збігаються з тими, що були виявлені при застосуванні монохроматичного освітлення. А саме, найбільші відносні зміни в результаті розпаду пар FeB спостерігаються для ефективності перетворення та струму короткого замикання, тоді як  $\varepsilon V_{OC}$  та  $\varepsilon FF$  набагато менші. Водночас, абсолютні значення  $\varepsilon A$  за умов AM1,5 менші ніж при  $\lambda = 940$  нм. Це пов'язано з тим, що за умов стандартної освітленості більш значну роль у формуванні фотовідгуку відіграють процеси, не пов'язані з поширенням нерівноважних неосновних носіїв заряду в базі КСЕ.

Таблиця 2.3 – Фотоелектричні параметри КСЕ до та після розпаду FeB, отримані за стандартних умов енергетичної освітленості AM1,5.  $T = 298$  K

Зразок	$I_{SC}$ , мкА		$V_{OC}$ , В		$FF$ , %		$\eta$ , %	
	до	після	до	після	до	після	до	після
#293_3	43,776	42,523	0,541	0,537	76,104	75,880	4,26	4,03
#297_3	47,52	44,302	0,567	0,558	76,359	76,78	4,82	4,43
#313_3	43,966	40,643	0,545	0,537	77,033	75,598	4,39	3,82
#319_3	45,223	43,418	0,555	0,551	70,334	69,772	4,25	3,95
#325_3	47,466	42,014	0,563	0,555	78,356	77,192	4,96	4,36
#326_3	49,472	42,97	0,557	0,545	73,691	71,022	4,81	3,91
#329_3	50,081	48,064	0,556	0,554	75,127	74,905	5,05	4,72
#338_3	39,884	36,725	0,542	0,537	71,79	71,328	3,72	3,27
#341_3	47,254	40,304	0,563	0,553	78,587	76,957	5,08	3,99
#348_3	43,037	40,882	0,548	0,541	77,06	76,793	4,26	3,97
#350_3	52,407	44,506	0,578	0,572	70,726	69,945	5,06	4,2
#352_3	52,276	44,572	0,558	0,553	68,105	68,437	4,64	3,98

З рис.2.15 видно, що значення  $\varepsilon A$  достатньо суттєво змінюються від зразка до зразка. Очевидно, що це визначається дефектним складом конкретного КСЕ. Розраховані коефіцієнти кореляції  $R$  та детермінації  $R^2$  між  $\varepsilon A$  та абсолютною величинами фотоелектричних параметрів, а також між параметрами  $\varepsilon A$  – див. таблицю 2.4.

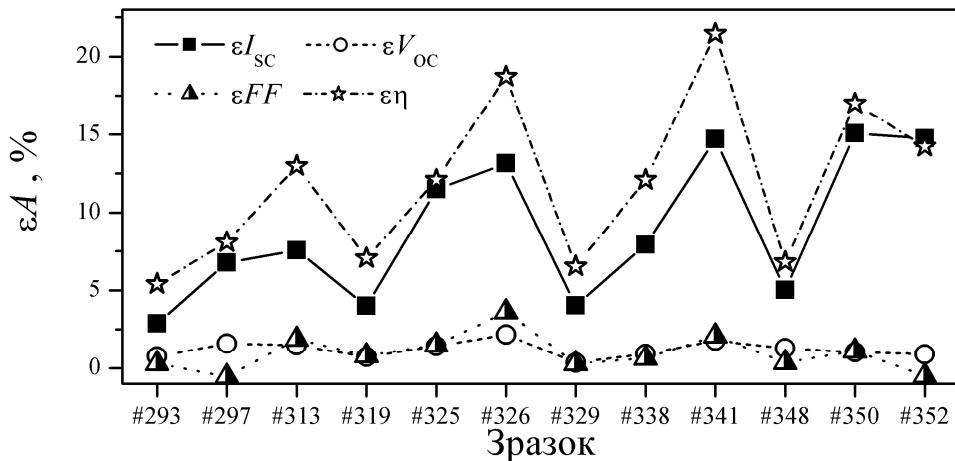


Рисунок 2.15 – Відносні зміни параметрів КСЕ, отриманих при освітленості AM1,5, внаслідок розпаду пар FeB.  $T = 298$  К. Точки – експеримент, лінії наведено для зручності

Таблиця 2.4 – Коефіцієнти кореляції та детермінації між змінами фотоелектричних параметрів КСЕ. Умови освітленості AM1,5;  $T = 298$  К

Незалежна змінна	$\varepsilon I_{SC}$		$\varepsilon V_{OC}$		$\varepsilon FF$		$\varepsilon \eta$	
	$R$	$R^2$	$R$	$R^2$	$R$	$R^2$	$R$	$R^2$
$I_{SC}$	0,59	0,35	0,043	0,002	0,036	0,001	0,39	0,15
$V_{OC}$	0,61	0,38	0,23	0,055	0,052	0,003	0,44	0,19
$FF$	-0,21	0,45	0,41	0,17	0,25	0,061	-0,057	0,003
$\eta$	0,51	0,26	0,27	0,075	0,22	0,05	0,42	0,18
$\varepsilon I_{SC}$	1	1	0,51	0,26	0,41	0,16	0,91	0,83
$\varepsilon V_{OC}$	0,51	0,26	1	1	0,66	0,44	0,63	0,40
$\varepsilon FF$	0,40	0,16	0,66	0,44	1	1	0,66	0,43
$\varepsilon \eta$	0,91	0,83	0,63	0,4	0,66	0,43	1	1

Отримані результати свідчать, що певний взаємозв'язок існує лише між  $\varepsilon I_{SC}$  та  $\varepsilon \eta$ , тоді як навіть абсолютні значення струму короткого замикання та ефективності не можуть бути використані для передбачень змін параметрів внаслідок модифікації стану міжвузольного заліза. Раніше було вказано, що значення  $\varepsilon I_{SC}$  та  $\varepsilon \eta$  визначаються  $N_{Fe}$  і тому взаємозв'язок між цими величинами є цілком очікуваним. З іншого боку, отримані результати ще раз підтверджують, що жодна з величин  $\varepsilon V_{OC}$ ,  $\varepsilon FF$ ,  $I_{SC}$ ,  $V_{OC}$ ,  $FF$ ,  $\eta$  не може бути використана для оцінки концентрації заліза в КСЕ.

#### 2.4 Закономірності впливу акустичних хвиль на процес світлоіндукованої деградації кремнієвих сонячних елементів

Одним із завдань проекту є експериментальне дослідження впливу наявності акустичних хвиль ультразвукового діапазону на процеси світлоіндукованого розпаду пар залізо-бор. Індикатором стану дефектної пари вважалися параметри КСЕ, насамперед СКЗ, при цьому розглядалися їхні зміни після інтенсивного освітлення за умови, що воно відбувається при УЗН досліджуваних зразків. Один підхід полягав у порівнянні величин змін параметрів до і після освітлення – приклади наведені у таблиці 2.5. Зауважимо, що, за наявності пружних коливань параметри КСЕ змінюються: СКЗ зростає, а напруга розімкненого кола, коефіцієнт форми та максимальна потужність зменшуються - ефект детально був досліджений раніше [88]. Проте незважаючи на зміну величин самих параметрів, їхні відносні зміни внаслідок розпаду пар практично не залежать від УЗН. Це залишається справедливим незалежно від типу використаних хвилі (повздовжні чи поперечні), їхньої частоти та інтенсивності – див. дані в таблиці 2.5.

Другий підхід мав на меті дослідити кінетику розпаду пар за умов поширення акустичних хвиль. З цією метою проводилися експерименти по дослідженю кінетики СКЗ після освітлення галогеновою лампою з різною тривалістю та інтенсивністю. Приклади отриманих в результаті залежностей

кількості дисоційованих пар  $N_{Fe,0}$  від часу освітлення наведено на рис. 2.16 для різних за частотою, потужністю та типом хвиль УЗН.

Таблиця 2.5 – Відносні зміни параметрів ВАХ внаслідок розпаду пар FeB, отриманих при монохроматичному освітленні за умов УЗН та без нього

Зразок	УЗН	$T$ , К	$\varepsilon I_{SC}$ , %	$\varepsilon V_{OC}$ , %	$\varepsilon FF$ , %	$\varepsilon P_m$ , %	$\varepsilon I_{01}$ , %
#350_1	відсутнє	340	23±2	6±1	3±1	29±3	-30±5
		320	24±2	4±1	2±1	29±3	-23±5
	8,980 МГц, 0,46 Вт/см <sup>2</sup> , повздовжні	340	23±2	6±1	3±1	29±3	-29±5
		320	25±2	4±1	2±1	30±3	-23±5
	4,09 МГц, 0,53 Вт/см <sup>2</sup> , повздовжні	340	23±2	7±1	3±1	30±3	-30±5
		320	24±2	4±1	2±1	30±3	-26±5
	відсутнє	340	22±2	12±1	7±1	37±3	-27±5
		320	25±2	14±1	2±1	36±3	-28±5
#341_1	5,40 МГц, 0,33 Вт/см <sup>2</sup> , повздовжні	340	23±2	13±1	9±1	36±3	-29±5
		320	26±2	14±1	1±1	35±3	-30±5
	відсутнє	340	17±1	11±1	8±1	23±3	-28±5
		320	18±1	10±1	2±1	23±3	-11±5
#403_2	5,23 МГц, 1,0 Вт/см <sup>2</sup> , поперечні	340	18±1	11±1	8±1	23±3	-25±5
		320	18±1	10±1	2±1	23±3	-10±5

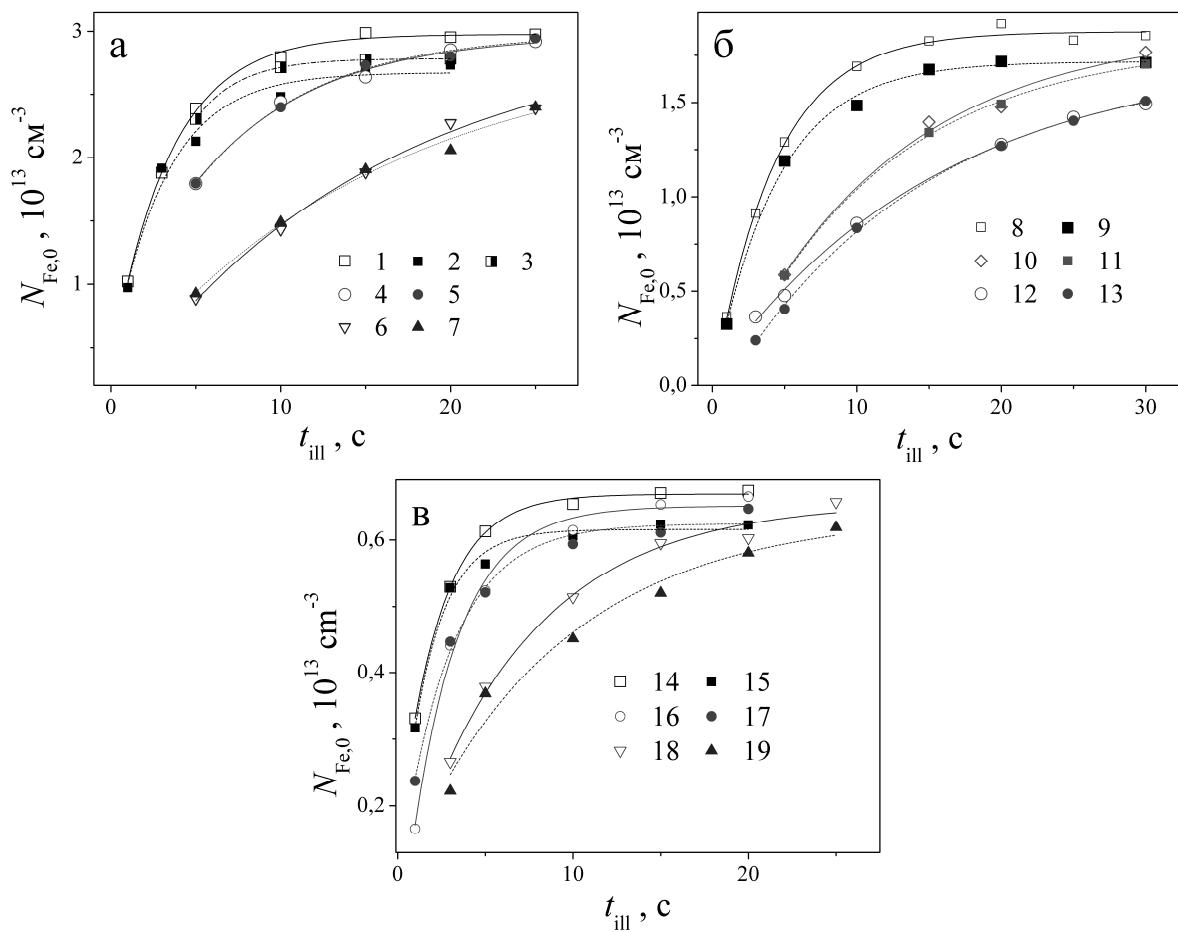


Рисунок 2.16 – Залежність кількості міжузольних атомів заліза від часу освітлення. Точки – експеримент, лінії – апроксимація відповідно до формули (2.13).  $W_{\text{ill}}$ , Вт/см<sup>2</sup>: 0,16 (криві 1-3, 8-11, 14, 15), 0,12 (4, 5, 16, 17), 0,09 (12, 13), 0,08 (6, 7, 18, 19);  $W_{\text{US}}$ , Вт/см<sup>2</sup>: 0,9 (2, 5, 7), 0,6 (3, 9, 11, 13), 0,5 (15, 17, 19);  $f_{\text{US}}$ , МГц: 8,98 (2, 3, 5, 7), 0,31 (9, 11, 13), 5,40 (15, 17, 19);  $T$ , К: 340 (1-9, 12-19), 320 (10, 11). Зразки #350\_1 (а), #350\_2 (б), #349\_1 (в)

Як видно, з підвищеннем інтенсивності деградаційного освітлення криві, отримані за умов УЗН та без нього починають відрізнятися. Отримані залежності були апроксимовані відповідно до формули (2.13), отримані результати наведено на рис.2.17 та узагальнено в таблиці 2.6.

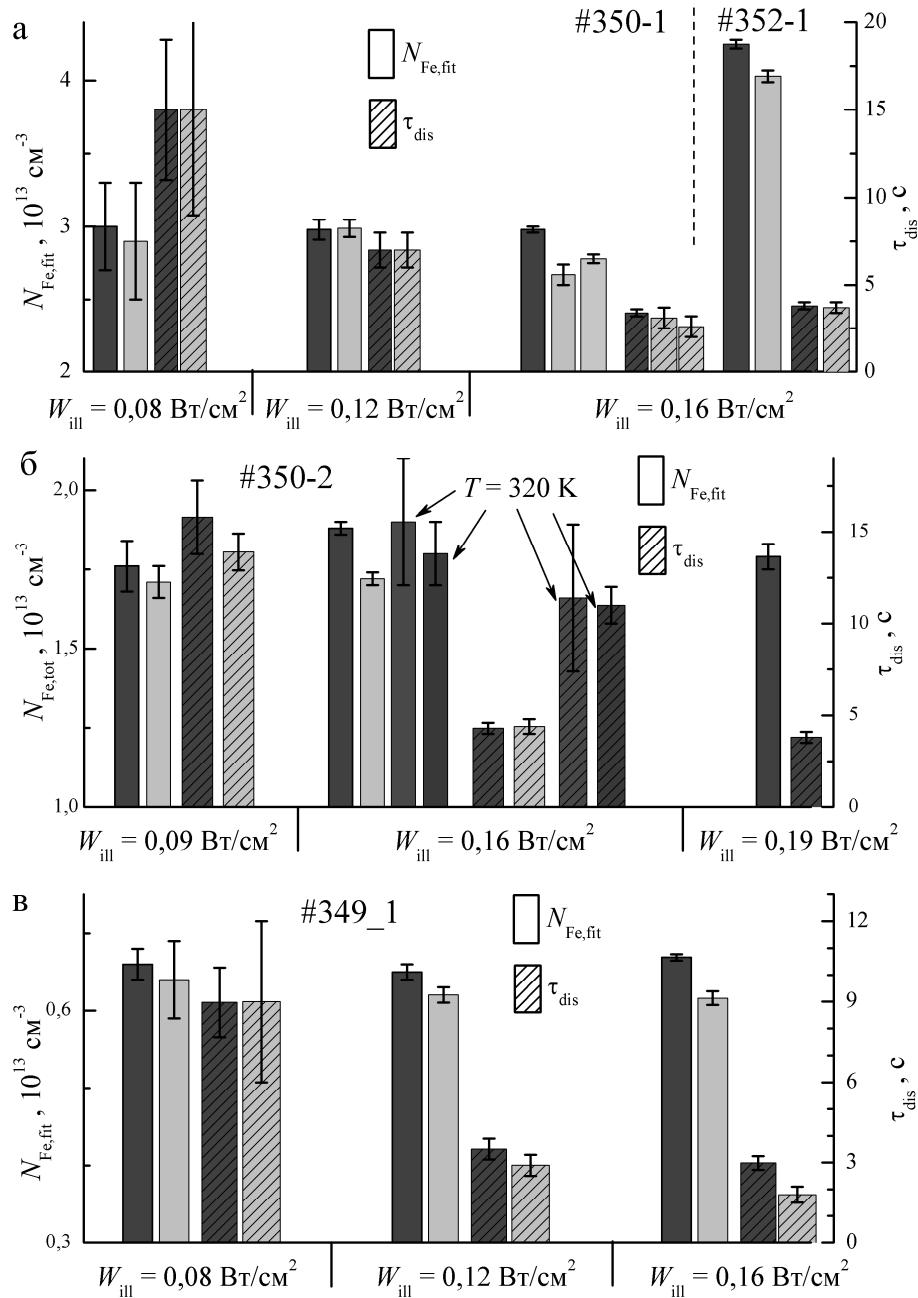


Рисунок 2.17 – Величини максимальної концентрації атомів заліза, звільнених в результаті освітлення (не штриховані стовбці) та характерний час дисоціації (заштриховані стовпці). Темні стовбці відповідають беззвуковому випадку, світлі – випадку УЗН. Умови УЗН для зразків #350\_1, #350\_2 та #349\_1 тотожні рис. 2.18. Для #352\_1  $f_{US} = 5,94 \text{ МГц}$ ,  $W_{US} = 1,0 \text{ Вт}/\text{см}^2$  (поперечні хвилі);  $T = 340 \text{ К}$  (крім вказаних випадків)

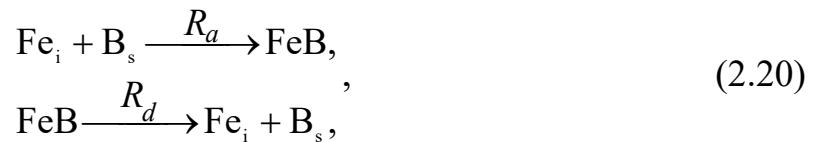
Таблиця 2.6 – Максимальна концентрація атомів заліза, звільнених в результаті освітлення та характерний час дисоціації, отримані шляхом апроксимації експериментальних залежностей відповідно до (2.13)

Зразок	$T$ , К	$W_{\text{ill}}$ , Вт/см <sup>2</sup>	$f_{\text{US}}$ , МГц	$W_{\text{US}}$ , Вт/см <sup>2</sup>	Тип хвиль	$N_{\text{Fe,fit}}$ , 10 <sup>13</sup> см <sup>-3</sup>	$\tau_{\text{dis}}$ , с
1	2	3	4	5	6	7	8
#350_1	340	0,08		-		3,0±0,3	15±4
	340	0,08	8,98	0,9	1	2,9±0,4	15±6
	340	0,12		-		2,98±0,07	7±1
	340	0,12	8,98	0,9	1	2,99±0,06	7±1
	340	0,16		-		2,98±0,02	3,4±0,2
	340	0,16	8,98	0,9	1	2,78±0,03	3,1±0,6
	340	0,16	8,98	0,6	1	2,67±0,07	2,9±0,6
#352_1	340	0,16		-		4,25±0,03	3,8±0,2
	340	0,16	5,94	1,0	t	4,03±0,04	3,7±0,2
#350_2	340	0,09		-		1,76±0,08	16±2
	340	0,09	0,31	0,6	t	1,72±0,05	14±1
	340	0,12		-		1,89±0,02	9±1
	340	0,12	0,31	0,6	t	1,86±0,03	8±2
	340	0,16		-		1,88±0,02	4,3±0,3
	340	0,16	0,31	0,6	t	1,72±0,02	4,4±0,4
	320	0,16		-		1,9±0,2	11±4
	320	0,16	0,31	0,6	t	1,8±0,2	11±1
#349_1	340	0,08				0,66±0,02	7±1
	340	0,08	5,40	0,5	1	0,64±0,05	9±3
	340	0,12				0,65±0,01	2,7±0,3
	340	0,12	5,40	0,5	1	0,62±0,01	2,9±0,4
	340	0,16				0,67±0,01	2,3±0,2
	340	0,16	5,40	0,5	1	0,61±0,01	1,8±0,3

Кінець таблиці 2.6

1	2	3	4	5	6	7	8
#341_1	340	0,08				3,8±0,2	18±4
	340	0,08	8,96	1,5	t	3,7±0,2	16±2
	340	0,12				3,9±0,1	13±1
	340	0,12	8,96	1,5	t	3,7±0,2	10±2
	340	0,16				4,00±0,04	4,5±0,3
	340	0,16	8,96	1,5	t	3,56±0,05	4,1±0,4

Кількісна умова рівноваги між концентрацією міжузольних атомів заліза та парами FeB може бути визначена за допомогою наступних реакцій



де

$R_a = \tau_{\text{ass}}^{-1}$  та  $R_d$  – темпи асоціації та дисоціації пари FeB, відповідно,  $\text{с}^{-1}$ .

Виходячи з рівнянь (2.20) та взявши до уваги, що  $N_{\text{Fe}} = N_{\text{Fe,tot}} - N_{\text{FeB}}$  та  $N_{\text{Fe}}(t_{\text{ill}} = 0) = N_{\text{Fe,eq}}$ , можна отримати часову залежність концентрації міжузольних атомів під час інтенсивного освітлення:

$$N_{\text{Fe}}(t_{\text{ill}}) = \left( N_{\text{Fe,eq}} - N_{\text{Fe,tot}} \frac{R_d}{R_d + R_a} \right) \exp[-(R_d + R_a)t_{\text{ill}}] + N_{\text{Fe,tot}} \frac{R_d}{R_d + R_a}. \quad (2.21)$$

Порівняння виразів (2.13) та (2.21) показує, що

$$\tau_{\text{dis}}^{-1} = R_d + R_a, \\ N_{\text{Fe,fit}} = N_{\text{Fe,tot}} \frac{R_d}{R_d + R_a}. \quad (2.22)$$

Зауважимо, що в нашому випадку  $\tau_{\text{ass}} > \tau_{\text{dis}}$  (без УЗН  $\tau_{\text{ass}} \approx 700$  с при 340 К та  $\tau_{\text{ass}} \approx 13000$  с при 300 К). Таким чином,  $R_d > R_a$ ,  $\tau_{\text{dis}}^{-1} \approx R_d$ ,  $N_{\text{Fe,fit}} \approx N_{\text{Fe,tot}}$ .

У випадку відсутності УЗН, необхідно зауважити наступне. По-перше, як випливає з наведених даних, для кожного із зразків  $N_{\text{Fe,fit}}$  залишається

постійним і не залежить від інтенсивності освітлення та температури. Це цілком очікувано, так як в цьому випадку відповідно до наших припущень дана величина має визначатися загальною концентрацією домішкового заліза у зразку. По-друге,  $\tau_{\text{dis}}$  залежить від  $W_{\text{ill}}$  та  $T$ : ці залежності та їхня відповідність літературним даним розглянуті в підрозділі 2.3.

Щодо впливу ультразвукового навантаження, то варто виділити два моменти. А Саме.

1. Ультразвукове навантаження не впливає на величину часу дисоціації: значення  $\tau_{\text{dis}}$  в межах похибок залишається однаковим у сусідніх рядках таблиці 2.6 (висота сусідніх заштрихованих стовпців на рис. 2.17 однаакова).
2. Деякі з пар не дисоціюють внаслідок освітлення у випадку, коли у КСЕ збудженні акустичні хвилі:  $N_{\text{Fe,fit}}(W_{\text{US}} > 0) < N_{\text{Fe,fit}}(W_{\text{US}} = 0)$ . Частка таких пар залежить від інтенсивності УЗ і при найвищих значеннях  $W_{\text{US}}$  досягає 10%. Зауважимо, що подібний ефект спостерігається лише у випадку, коли процес світло-індукованої дисоціації наближається до насичення; якщо ж  $W_{\text{ill}}$  (або температура) такі, що при даних часах освітлення частина атомів заліза залишається поблизу заміщаючих атомів бору, то  $N_{\text{Fe,fit}}(W_{\text{US}} > 0) \approx N_{\text{Fe,fit}}(W_{\text{US}} = 0)$ .

## 2.5 Закономірності кінетичних характеристик зміни параметрів кремнієвих сонячних елементів внаслідок відновлення пар Fe-B в умовах ультразвукового навантаження

На рис. 2.18 приведено типові часові залежності відновлення параметрів за умов УЗН та без нього. Видно, що поширення акустичних хвиль є причиною певного пришвидшення релаксаційних процесів.

У підрозділі 2.2 показано, що безпосередню інформацію щодо параметрів домішкових іонів заліза можна отримати з аналізу кінетичних характеристик СКЗ, отриманого в умовах монохроматичного освітлення. У підрозділі 2.3 продемонстровано, що найбільш зручними індикаторами зміни

стану домішкового заліза є  $I_{SC}$  та максимальна вихідна потужність (коєфіцієнт корисної дії). Проте отримання кількісних характеристик дефектів із аналізу величин  $P_m$  або  $\eta$  достатньо утруднене через їхню комплексну залежність від багатьох рекомбінаційних процесів. Тому в нашій роботі основна увага була приділена саме дослідженням кінетичних характеристик  $I_{SC}$  за умов УЗН при варіюванні як зовнішніх умов (температури), так і параметрів акустичних хвиль (частоти, інтенсивності, типу коливань) [89].

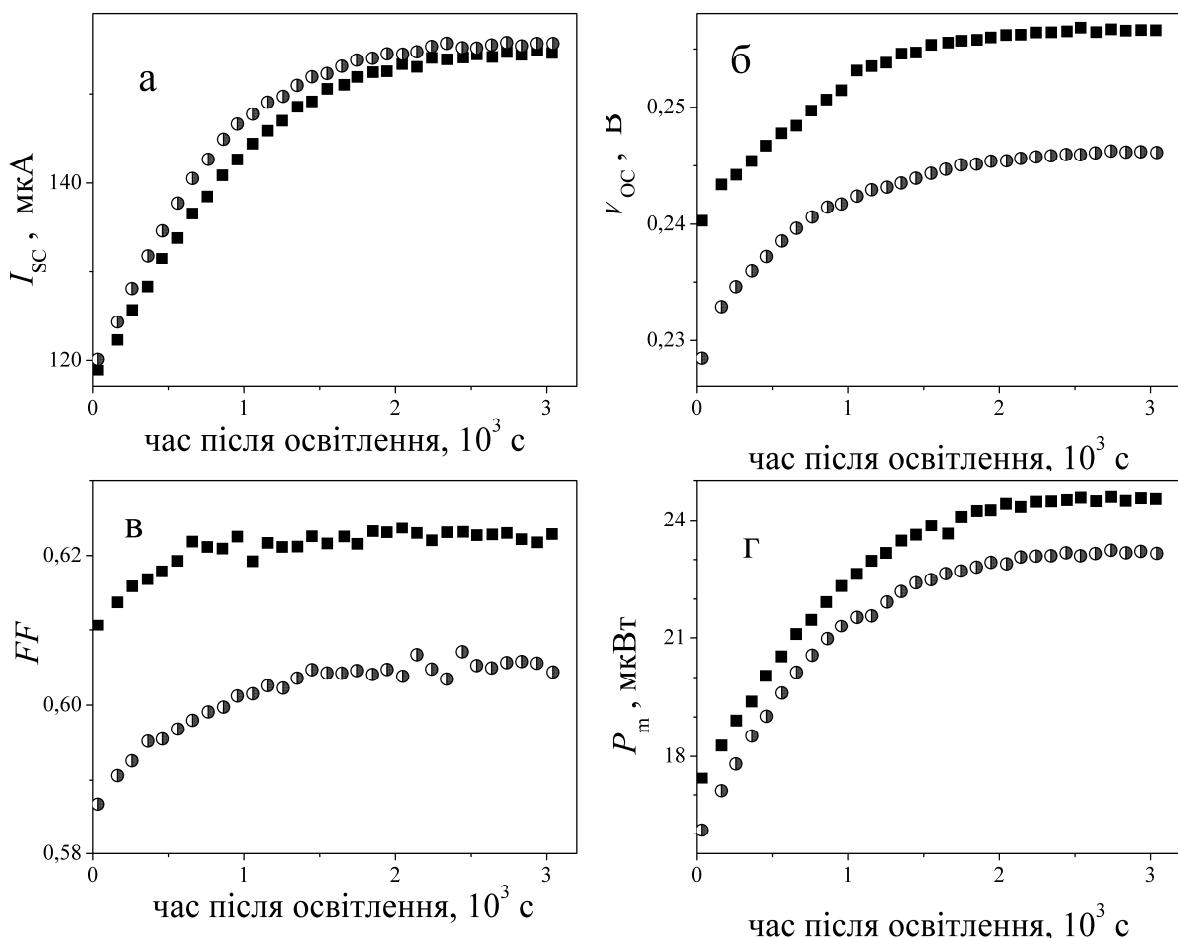


Рисунок 2.18 – Кінетика зміни струму короткого замикання (а), напруги холостого ходу (б), коєфіцієнта форми (в) та максимальної вихідної потужності (г) при УЗН (напівзаповнені точки) та без нього (заповнені точки). Зразок #350\_1.  $f_{US} = 8,98$  МГц,  $W_{US} = 0,2$  Вт/см<sup>2</sup>,  $T = 340$  К

Проведені дослідження показали, що УЗН викликає пришвидшення процесу асоціації пар FeB. Так на рис. 2.19. приведено часові залежності

струму короткого замикання у випадку, коли в КСЕ збуджені акустичні хвилі з різною інтенсивністю. Видно, що пружні коливання викликають зменшення часу відновлення СКЗ, причому ступінь зменшення залежить від інтенсивності УЗН. При апроксимації залежностей  $I_{SC}(t)$  вважалося, що передекспоненційний множник у виразі (2.11) не залежить від УЗН (визначається лише рівнем легування бази КСЕ та температурою) і тому для кількісної характеризації виявленого ефекту була використана величина зміни енергії міграції атомів заліза. Тобто вважалося, що

$$E_m \xrightarrow{\text{ультразвук}} E_{m,0} - \Delta E_{US}, \quad (2.23)$$

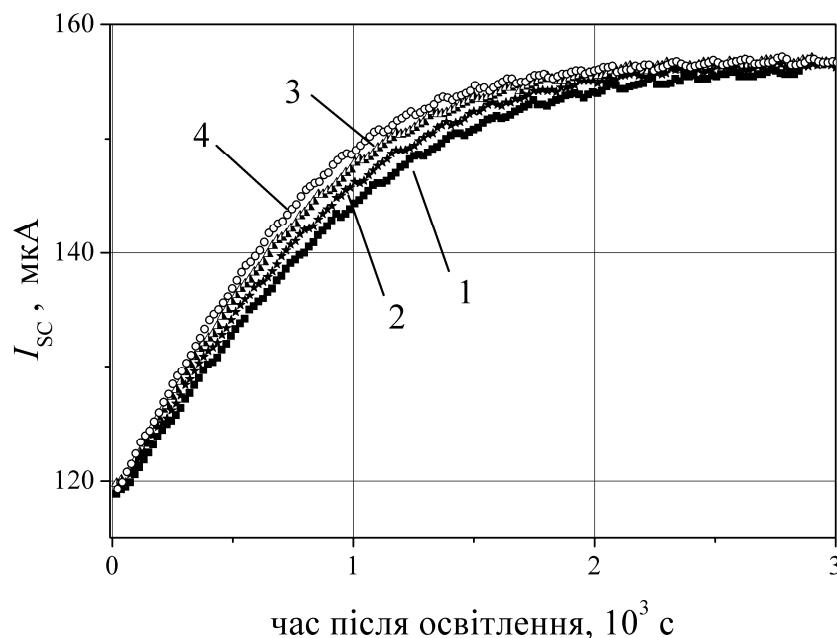


Рисунок 2.19 – Кінетика зміни величини струму короткого замикання при різних інтенсивностях УЗН.  $W_{US}$ , Вт/см<sup>2</sup>: 0 (1), 0,26 (2), 0,65(3), 0,87 (4).  $f_{US} = 8,98$  МГц.  $T=340$  К. Зразок #350\_1

де

$E_{m,0}$  – енергія міграції без наявності пружних коливань в КСЕ, еВ;

$\Delta E_{US}$  – AI зміна цієї величини, еВ. Як видно з рис. 2.19, величина  $\Delta E_{US}$  має залежати від інтенсивності УЗН. На рис. 2.20 представлена залежності  $\Delta E_{US}$  від інтенсивності введеного УЗ при різних значеннях  $f_{US}$  а також при збудженні як повздовжніх, так і поперечних пружних коливань. Крім того, на рис. 2.21

представлені типові залежності  $\Delta E_{\text{US}}(W_{\text{US}})$  для випадків збудження УЗ однакової частоти в зразках з різною концентрацією домішкового заліза (визначено за залежностями, подібними до наведених на рис. 2.16).

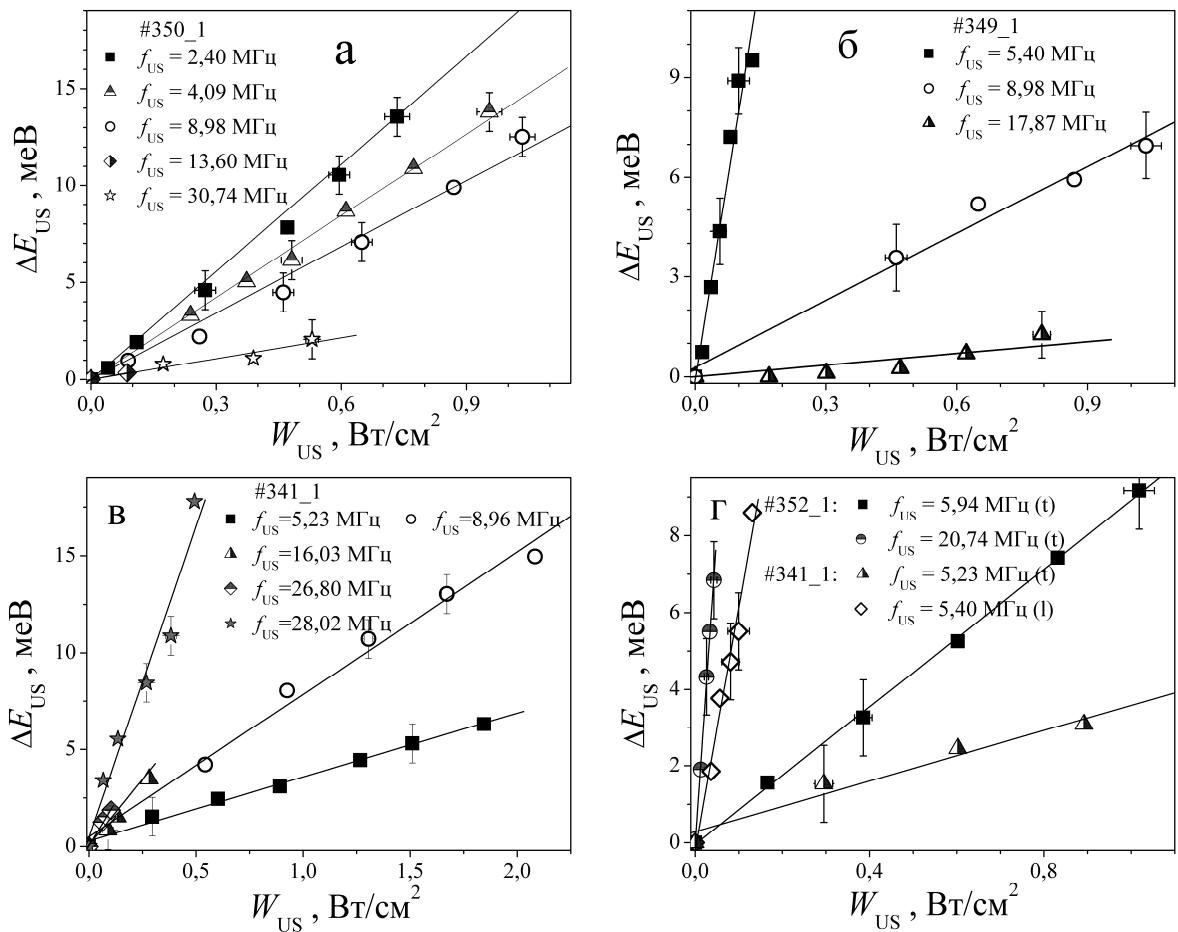


Рисунок 2.20 – Залежності акустоіндукованих змін енергії міграції іонів заліза від інтенсивності ультразвуку різної частоти.  $T=340$  К. Тип хвиль: повздовжні (а, б, г), поперечні (в, г). Точки – експеримент, прямі – лінійна апроксимація

Отримані залежності дозволяють визначити наступні закономірності впливу УЗН на процес асоціації пари залізо-бор.

- 1) Акустоіндукована зміна енергії міграції міжвузольного заліза практично лінійно залежить від інтенсивності збудженого ультразвуку як при використанні повздовжніх, так і поперечних хвиль.
- 2) Ефективність ультразвукового впливу (величина зміни  $\Delta E_{\text{US}}$  при постійній інтенсивності AX) при використанні повздовжніх хвиль зменшується зі

зростанням частоти коливань (рис. 2.20а, б), тоді як у випадку збудження поперечних хвиль спостерігається зворотна частотна залежність (рис. 2.20в, г).

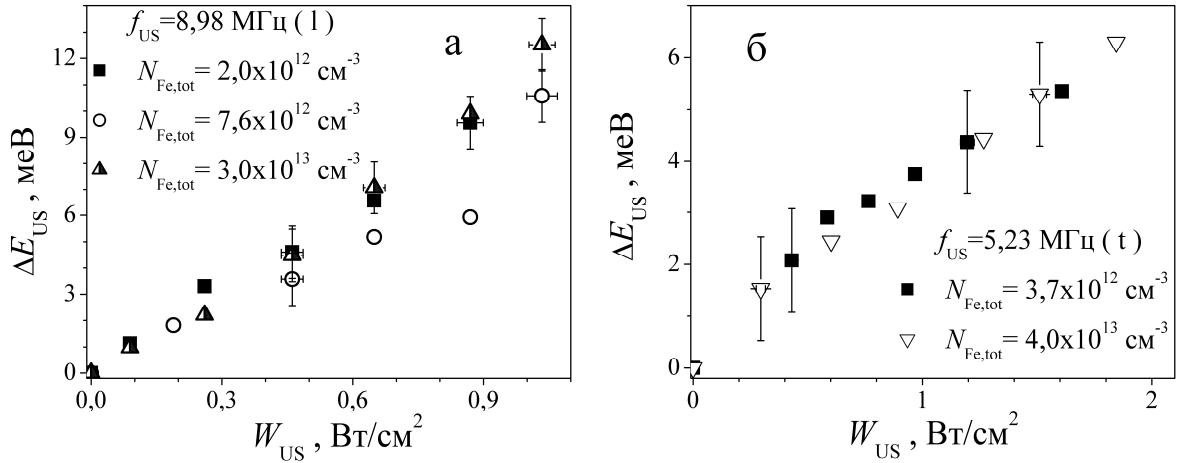


Рисунок 2.21 – Залежності акустоіндукованих змін енергії міграції від інтенсивності введеного ультразвуку в КСЕ з різним вмістом атомів заліза.  $T=340$  К.  $f_{\text{US}}$ , МГц: 5,40 (а), 8,98 (б). Тип хвиль: повздовжні (а), поперечні (б)

3) Величина AI ефекту не залежить від концентрації заліза, принаймні для діапазону  $N_{\text{Fe}} = 10^{12} \div 5 \cdot 10^{13}$  см<sup>-3</sup>, причому це твердження справедливе як для випадку повздовжніх хвиль, так і для поперечних – рис. 2.21.

4) Величина AI змін енергії міграції може досягати 18 меВ.

Зауважимо, що залежності величини  $\Delta E_{\text{US}}$  від інтенсивності освітлення ( $W_{\text{ill}}$ ) не виявлено.

Дані, представлені на рис. 2.20 та 2.21 отримані при 340 К. Дослідження показали, що з підвищенням температури, AI ефект послаблюється – див. рис. 2.22. При цьому, температурна залежність  $\Delta E_{\text{US}}$  близька до лінійної:

$$\Delta E_{\text{US}} = \Delta E_{\text{US},0} + \alpha_{\text{US}} T. \quad (2.24)$$

У виразі (2.24)  $\alpha_{\text{US}}$  – температурний коефіцієнт, еВ/К;

$\Delta E_{\text{US},0}$  - температуронезалежна частина AI зменшення енергії міграції, еВ.

З наведених даних видно, що  $\alpha_{\text{US}}$  залежить від частоти УЗ (див. рис. 2.23), зменшуючись разом зі зменшенням періоду коливань (як повздовжніх, так і поперечних хвиль). В свою чергу,  $\Delta E_{\text{US},0}$  залежить також і

від інтенсивності УЗН.

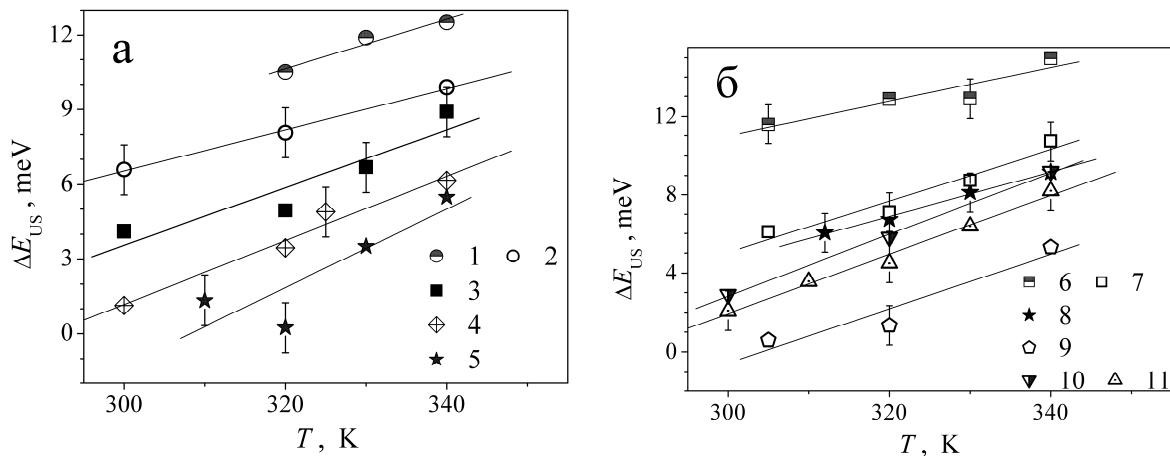


Рисунок 2.22

— Температурні

залежності акустоіндукованих змін енергії міграції іонів заліза в КСЕ з різним вмістом атомів заліза.  $f_{US}$ , МГц: 8,98 (криві 1, 2), 5,04 (3), 4,09 (4), 2,39 (5), 8,96 (6, 7), 5,94 (8), 5,23 (9), 0,31 (10, 11).  $W_{US}$ , Вт/см<sup>2</sup>: 1,0 (1, 9), 0,87 (2), 0,1 (3), 0,4 (4), 0,3 (5), 2,0 (6, 9), 1,2 (7), 0,76 (10), 0,58 (11).  $N_{Fe}$ , 10<sup>13</sup> см<sup>-3</sup>: 3,0 (1, 2, 4), 0,7 (3), 1,9 (5, 10, 11), 4,0 (6, 7, 9), 4,3 (8). Тип хвиль: повздовжні (а), поперечні (б).

Точки – експеримент, прямі – лінійна апроксимація

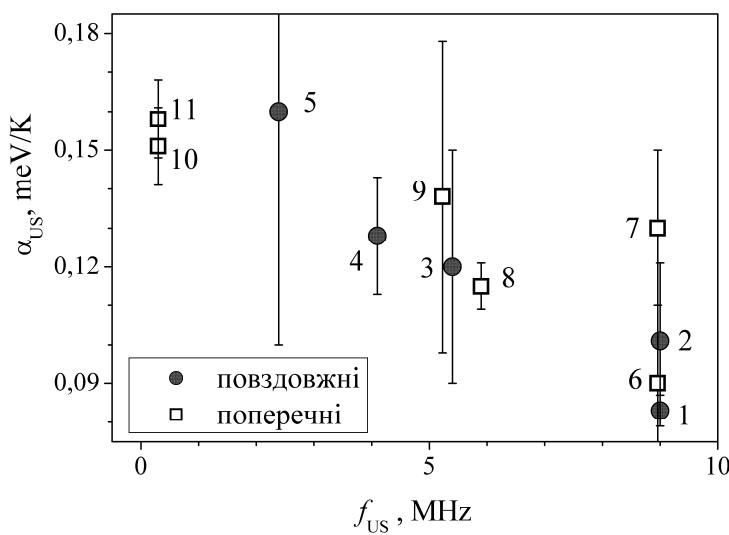


Рисунок 2.23 — Частотна залежність температурного

коєфіцієнта AI зміни енергії міграції іонів заліза в КСЕ. Цифри біля точок відповідають кривим на рис. 2.22

## 2.6 Можливі механізми взаємодії залізовмісних дефектних комплексів у КСЕ з акустичними хвилями та шляхи практичного використання ультразвукового навантаження

Очевидно, що аналіз можливих причин впливу УЗ на процеси перебудови залізо-вмісних дефектів має відштовхуватися від механізмів перебудови дефектів. Вважається [23,41,85], що дисоціація пари FeB є двостадійним процесом. На першому етапі захоплення електрону (при світлоіндукованому процесі, електрону, що з'явився внаслідок поглинання фотону) іоном заліза призводить до нейтралізації  $\text{Fe}_i^+$ , що, в свою чергу, є причиною зникнення кулонівського відштовхування між  $\text{Fe}_i^0$  та  $\text{B}_s^-$ . В результаті захоплення другого електрону відбувається подолання дифузійного бар'єру та просторове розділення домішкових атомів. Причому в літературі обговорюються дві можливості реалізації другого етапу. Або друге захоплення електрону атомом заліза перетворює його на від'ємно заряджений іон ( $\text{Fe}_i^-$ ), який внаслідок кулонівського відштовхування від заміщаючого іону бору. Або друге захоплення супроводжується рекомбінацією з діркою і енергія, необхідна для дифузії, отримується саме з цього каналу. Другий варіант відомий в літературі [41] як рекомбінаційно-підсиленна реакція дефектів (REDR-процес), причиною якої є сильна електрон-граткова взаємодія в околі порушення періодичності.

Щодо асоціації комплексу, то вона відбувається внаслідок міграції  $\text{Fe}_i^+$  до  $\text{B}_s^-$ , підсиленої електростатичною взаємодією. Тобто, характерний час асоціації залежить від коефіцієнта дифузії атомів заліза  $D_{\text{Fe}}$  і більш деталізований, порівняно з (2.11), вираз має вигляд

$$\tau_{ass} = \frac{\varepsilon \varepsilon_0 kT}{q^2 D_{\text{Fe}} N_B} = \frac{\varepsilon \varepsilon_0 kT}{q^2 D_{0,\text{Fe}} N_B} \exp\left(\frac{E_m}{kT}\right), \quad (2.25)$$

де

$$D_{\text{Fe}} = D_{0,\text{Fe}} \exp\left(-\frac{E_m}{kT}\right),$$

$D_{0,\text{Fe}}$  – температуронезалежний множник, у загальному випадку [90,91,92]

$$D_{0,\text{Fe}} = \beta_a v a_0^2 \exp\left(\frac{\delta S_{\text{Fe}}}{k}\right), \quad (2.26)$$

де

$\beta_a$  – множник, що враховує кореляцію дифузійних стрибків атомів заліза і залежить від типу кристалічної кратки,

$v$  – частота спроб стрибків, яка за величиною дорівнює частоті власних коливань атомів у міжвузіллях,  $\text{с}^{-1}$ ,

$a_0$  – відстань між сусідніми паралельними площинами які проходять через міжвузольні позиції заліза, м;

$\delta S_{\text{Fe}}$  – зміна ентропія кристалу, при переході заліза в сусіднє положення, Дж/К.

Зауважимо, що процеси підсилення дифузії домішок в ультразвуковому полі спостерігалися і раніше як в твердих розчинах [93], так і в полі- та монокристалах кремнію та арсеніду галію [94,95,96,97,98,99,100,101]. Для неп'єзоелектричних матеріалів, головним ефектом, що пов'язується з поширенням AX, є створені ними механічні напруги. В літературі [91,102,103,104,105,106,107,108] запропоновано декілька механізмів зміни дифузійної здатності домішок, пов'язаних з напругами. Наприклад, в роботах [91,102] показано, що за наявності у кристалі статичних напруг  $\sigma_{\text{stat}}$  спостерігається зменшення енергії міграції домішки на величину

$$\Delta E = \sigma_{\text{stat}} V^*, \quad (2.27)$$

де

$V^*$  - активаційний тензор,  $\text{м}^3$ .

Відомо [109], що поширення УЗ в кристалі супроводжується появою статичних напруг (окрім змінних, безпосередньо пов'язаних з періодичними процесами деформації гратки)  $u_{\text{stat}}$ :

$$u_{\text{stat}} = \frac{\beta_{an}}{8} \left( \frac{2\pi f_{\text{US}} u_{\text{US}}}{g_{\text{Si}}} \right)^2 = \frac{\beta_{an} W_{\text{US}}}{4\rho_{\text{Si}} g_{\text{Si}}^3}, \quad (2.28)$$

де

$\beta_{an}$  – параметр акустичної нелінійності. Тобто, величина зміни енергії має бути лінійною функцією щодо потужності УЗ, що і спостерігається на експерименті. Проте, кількісні оцінки суперечать отриманим результатам. Так відомо [102,110], що  $V^* = (0,01 \div 0,2) \Omega$ , де  $\Omega$  – об’єм, що припадає на один атом (для кремнію близько  $2 \cdot 10^{-29} \text{ м}^3$ ), а величина множника залежить від типу домішки. Якщо розглядати поширення повздовжніх хвиль в напрямку [100] (що відповідає експериментальним умовам), то  $\beta_{an} = 2,0003$  (згідно з даними роботи[111]),  $\sigma_{\text{stat}} = C_{11} u_{\text{stat}}$ , де  $C_{11}$  – пружний модуль, для Si його величина складає 166 ГПа. В такому випадку при  $W_{\text{US}} = 1 \text{ Вт/см}^2$ , можна отримати, що очікувана величина  $\Delta E = 5 \cdot 10^{-11} \text{ еВ}$ , що значно менше від значень, отриманих на експерименті (блізько 10 мeВ). Тобто, цей механізм не може бути причиною виявлених ефектів.

З іншого боку, відповідно до даних робіт [104,105,106], пружні деформації, що супроводжують поширення УЗ, самі по собі можуть бути причиною дифузії домішок в акустичному полі. Зокрема, енергія взаємодії між точковим дефектом та пружними полями описується виразом:

$$E_{\text{int}}(x, t) = -K \Omega_d \xi(x, t), \quad (2.29)$$

де

$K$  – об’ємний модуль пружності, 102 ГПа для Si,

$\Omega_d$  – зміна об’єму кристалу в результаті утворення точкового дефекту  $\text{м}^{-3}$ ; для міжвузольного дефекту [105]  $\Omega_d = (1,7 \div 2,2) \Omega$ ;

$\xi$  – відносна деформація гратки, спричинена АХ.

Оцінки максимального значення енергії взаємодії для  $W_{\text{US}} = 1 \text{ Вт/см}^2$  дають значення  $E_{\text{int}} \approx 0,1 \text{ мeВ}$ . І хоча в роботі [112] стверджується, що у випадку кластеру, що містить  $N_t$  дефектів може спостерігатися колективний ефект, коли  $E_{\text{int}} \rightarrow N_t E_{\text{int}}$ , на нашу думку цей механізм також не може бути визначальним для виявленого в наших дослідження AI прискорення процесу асоціації пар FeB.

В свою чергу, найбільш ймовірною причиною зменшення  $\tau_{\text{ass}}$  видається

процес взаємодії домішок з нерівноважними збуреннями кристалічної гратки, описаний в [107,108], наслідком якого є зміна ймовірності дифузійних переходів. Внаслідок УЗН зразка КСЕ акустичні хвилі накладаються на фононний спектр кристалу. В результаті має місце зсув спектру фононних хвиль у більш високоенергетичну область, і всі процеси, пов'язані з фононами, полегшуються. Зокрема, ймовірність вивільнення  $Fe_i$  з локальної потенціальної ями під час дифузії зростає. Відповідно до розрахунків Pavlovich [107], вплив УЗ викликає підвищення локальної ефективної температури кристалу та зменшення ефективної поляронної енергії. Остання пов'язана з переміщенням деформованих кристалічних областей, які виникають навколо домішки, при дифузії останньої [107]. Необхідно зауважити, що відповідно до розрахунків [107], цей ефект має лінійно залежати від інтенсивності УЗН та температури, що повністю корелює з експериментально виявленими особливостями AI змін. Крім того, згідно з [108],  $\Delta E_{US} \sim t_s$ , де  $t_s$  – характерний час зіткнення фононів, що може пояснити виявлену частотну залежність ефекту при використанні повз涓ожніх хвиль. Відмінності частотної залежності при УЗН за допомогою поперечних хвиль вимагають додаткових досліджень.

Як вже було згадано раніше, попередні дослідження [69-71] виявили, що УЗ обробка може бути причиною дисоціації пар залізо-бор. На нашу думку, передні та отримані нами результати мають багато спільногого. Дійсно, відповідно до [71], під впливом УЗ  $Fe_i$  має здійснити стрибок в наступну міжвузольну позицію; ми говоримо про зменшення енергії міграції міжвузольного атому заліза та AI підсилення дифузійної здатності  $Fe_i$ . Крім того, ефективність AI дисоціації пар зростає з підвищенням температури [69-71], так само як і AI зменшення  $\tau_{ass}$ . Відмінності у прояві дії УЗ (дисоціація пари чи пришвидшення асоціації) пов'язані з різницею інтенсивностей акустичного впливу. Так, дисоціація пар в Cz-Si була результатом навантаження з акустичними деформаціями  $\xi_{US} = 10^{-5} \div 10^{-4}$  [69]. Крім того, автори роботи [69] зауважують резонансний характер переорієнтації пари (яка є першим етапом розпаду) і використовують частоти 25÷70 кГц. В нашому

випадку  $\xi_{\text{US}} < 2 \cdot 10^{-6}$  та  $f_{\text{US}} = (2 \div 30)$  МГц і такого навантаження недостатньо для ефективного подолання кулонівського притягання між  $\text{Fe}_i^+$  та  $\text{B}_s^-$ . Крім того, в нашому випадку виявлено зменшення ефективності УЗ впливу при збільшенні частоти для повздовжніх хвиль. Крім того, автори [70] стверджували, що в тому випадку, коли пари перебувають переважно в дисоційованому стані, УЗ обробка може спричинити підсилення реакції спарювання, на відміну від ситуації, коли питома частина пар висока. В нашему випадку внаслідок інтенсивного освітлення реалізуються саме перший випадок, після чого УЗН прискорює поєднання компонентів в єдиний комплекс. Тобто, фактично, отримані нами результати є експериментальним підтвердженням висловлених раніше припущень.

Водночас зауважимо і відмінність наших результатів від попередніх. В роботах [69-71] вивчалися зміни у властивостях кремнію (довжини дифузії неосновних носіїв заряду) після дії УЗ надпорогової інтенсивності. Тобто, реалізовувався так званий режим ультразвукової обробки, а отримані результати можуть бути використані для розробки нових методів модифікації властивостей напівпровідників. Наша робота присвячена дослідженню процесів (відновлення струму короткого замикання, трансформації пар FeB) під час поширення АХ допорогової інтенсивності. Тобто йде мова про режим ультразвукового навантаження, а отримані результати можуть бути використані для акусто-контрольованого налаштування стандартних технологічних процесів.

При розгляді впливу АХ на дисоціацію насамперед необхідно звернути увагу на можливі шляхи модифікації під дією УЗ процесів захоплення носіїв заряду. Наприклад, в роботі [56] показано, що при УЗН поперечний переріз захоплення носіїв комплексним дефектом має змінюватися внаслідок зміни ефективної відстані між компонентами. Зокрема очікується, що цей ефект має бути особливо відчутним, якщо компоненти комплексу характеризуються  $\Omega_d$  з протележним знаком. З одного боку, саме цей випадок і реалізується для пари FeB ( $\Omega_d(\text{Fe}_i) > 0$ ,  $\Omega_d(\text{B}_s) < 0$ ) і тому цей комплекс має бути акустоактивним з

точки зору захоплення носіїв заряду. З іншого боку, AI зміни у величині  $\sigma_{n(p)}$  мають, насамперед, впливати на характерний час дисоціації, проте подібних ефектів виявлено не було. AI зростання  $R_a$  має спричинювати зменшення  $N_{\text{Fe,fit}}$  (див. (2.13), (2.21)), але цей ефект має маскуватися суттєвою різницею між  $\tau_{\text{dis}}$  та  $\tau_{\text{ass}}$ . Таким чином, УЗ швидше за все має впливати на другу стадію дисоціації.

Наприклад, в роботі [112] показано, що завдяки зміні розташування домішки стосовно оточуючих атомів під час УЗН, термічна активаційна енергія захопленого дефектом носія зменшується (до 10 мeВ при потужностях УЗ, спів мірних з використаними в наших експериментах). Подібне підсилення емісії електронів в нашому випадку має зменшити рівноважну частину негативно заряджених іонів заліза (у складі пари), які відчувають відштовхування від  $B_s^-$ .

З іншого боку, показано [113], що УЗН низької інтенсивності може викликати перебудову частини пар у метастабільну конфігурацію з іншою (орторомбічною) симетрією, для якої характерна більша відстань між компонентами. При надпорогових інтенсивностях УЗ таке просторове розділення може привести і до повної дисоціації пари подібно до [69-71]. Проте в нашому випадку важливим є те, що збільшення відстані має послабити кулонівське відштовхування.

Нарешті, зменшення концентрації пар, що дисоціювали при освітленні за умови УЗН може бути пов'язане і з частковою AI дисоціацією. Дійсно, якщо деякі пари попередньо дисоціювали під дією AX, які були збуджені у зразку перед інтенсивним освітленням, то зрозуміло, що вони не можуть взяти участь у світло-індукованих процесах.

Зменшення температури чи кількості падаючих фотонів ( $W_{\text{ill}}$ ) зменшує множину пар FeB, які модифікуються під дією УЗ чи множину пар, які змінюються внаслідок захоплення нерівноважних світлоіндукованих електронів, відповідно. Ці множини перестають перетинатися і  $N_{\text{Fe,fit}}(W_{\text{US}} > 0) \approx N_{\text{Fe,fit}}(W_{\text{US}} = 0)$  – див. таблицю 2.6.

Нарешті, УЗН може бути причиною послаблення електрон-граткової взаємодії та REDR процесів в цілому.

Підгрунтям практичного використання УЗН під час виробництва КСЕ є загально відомий факт, що домішки та дефекти є визначальними для властивостей подібних структур [114,115]. Велика їхня кількість суттєво послаблює ефективність фотоелектричного перетворення і для боротьби з цим було розроблено різні інструменти інженерії дефектів, зокрема гетерування та пасивація. Зокрема гетерування дефектів було введено в Cz-Si-мікроелектроніці для створення кремнієвих пластин із рівнями забруднення порядку  $10^9 \text{ см}^{-3}$ . Для досягнення такого високого рівня чистоти відповідно до загальної стратегії гетерування/пасивації, використовується процес, який складається із трьох послідовних етапів. Першим кроком є вивільнення зв'язаної домішки (Fe, Cu, Cr) або атомів, що пасивують (водень), введених під час обробки пластини або приладу. На другому етапі вивільнені атоми дифундують до ділянок гетерування (стоків) або мішеням пасивації. Нарешті, третій етап - це захоплення домішок-забруднень на кристалографічних дефектах чи зв'язування їх із хімічними елементами на ділянках гетерування, тобто переведення у електрично неактивний стан. Можливість контролювати та полегшувати будь-який з етапів гетерування та пасивації може підвищити ефективність процесу і саме з цією метою може використовуватися УЗН.

Для практичного використання отриманих нами при виконанні проєкту експериментальних даних щодо впливу УЗ на процеси асоціації і дисоціації пар FeB, а також запропонованого механізму впливу акустичних УЗ хвиль на процес перебудови дефектних комплексів у КСЕ з метою покращення їхніх параметрів, розглянемо конструкції і технологічний маршрут виготовлення найбільш поширених комерційних наземних сонячних елементів. Також розглянемо конструкцію і технологічний маршрут КСЕ космічного призначення дифузійно-польового типу, розроблених у відділі «Фізико-технічних основ напівпровідникової фотоенергетики» Інституту фізики напівпровідників ім. В.Є.Лашкарьова НАН України для первого українського

космічного апарату КС5МФ2 «Мікрон».

Наше завдання полягає у аналізі конструкції і технологічного маршруту виробництва СЕ для визначення оптимального місця розташування УЗН серед технологічних операцій, в результаті чого буде мати місце позитивний ефект – зростання ефективності фотоперетворення (коєфіцієнта корисної дії КСЕ), процента виходу, світлодеградаційної стійкості тощо.

На рис. 2.24 наведено конструкції комерційного кремнієвого  $n^+ - p - p^+$  СЕ з базою  $p$ -типу і полем на тильному боці (BSF КСЕ) та комерційного кремнієвого  $n^+ - p - p^+$  КСЕ з пасивованими емітером і тильною поверхнею (PERC КСЕ). За технологією виробництва PERC КСЕ – найближче майбутнє, проте на даний час співвідношення PERC / BSF  $\sim 1:1$  [43,44]. У таблиці 2.7 показано етапи технологічного процесу виготовлення комерційного PERC КСЕ. Технологія виготовлення BSF КСЕ подібна і відрізняється тільки відсутністю діелектричної пасивації тильної поверхні.

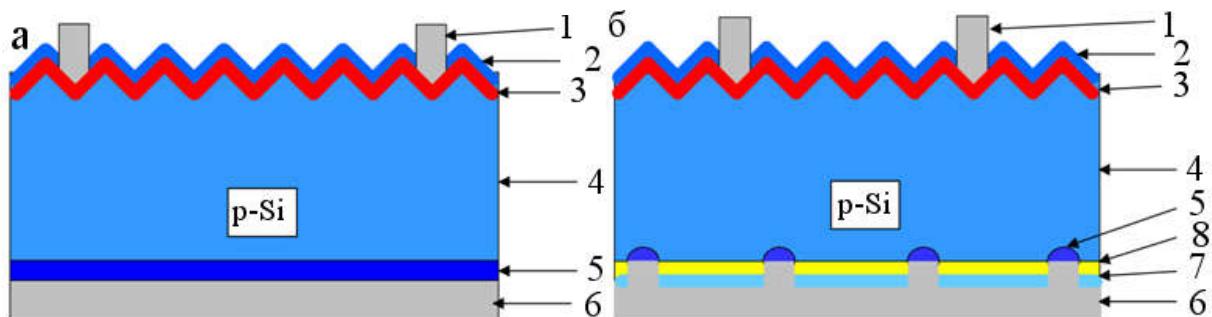


Рисунок 2.24 – Конструкції КСЕ з базою з полем на тильному боці (BSF КСЕ, а) та пасивованими емітером і тильною поверхнею (PERC КСЕ, б). 1 - фронтальний металевий гребінчатий електрод; 2 – антивідбиваючий шар нітриду кремнію (75 нм); 3 - дифузійний  $n^+$ -шар; 4 - квазінейтральна базова область ( $\sim 200$  мкм); 5 - дифузійний BSF  $p^+$ -шар (локальний для б); 6 - тиловий суцільний електрод (Al); 6 – діелектричний пасивуючий шар; 7- антивідбиваючий шар нітриду кремнію.

Таблиця 2.7 – Технологічний маршрут виготовлення  $n^+ - p - p^+$  PERC КСЕ

№ з/п	Найменування операції
1	Травлення порушеного шару
2	Хімоброка
3	Текстурування поверхні у анізотропному травнику
4	Хімоброка
5	Дифузія Р – створення розділяючого $n^+ - p$ переходу
6	Розкислення фосфорно-силікатного скла
7	Травлення
8	Хімоброка
9	Нанесення діелектричного пасивуючого шару на тильну поверхню
10	Термохімічне осадження плівок нітриду кремнію
11	Локальне видалення діелектричних покрить на тильній поверхні (відкриття «вікон»)
12	Хімоброка перед нанесенням Al пасти на тильну поверхню
13	Нанесення Al пасти на тильну поверхню
14	Відпал тильного контакту (утворення локальних $p - p^+$ переходів і контактів)
15	Хімоброка перед нанесенням контактної пасти на фронтальну поверхню
16	Друк пасти на фронтальному боці КСЕ
17	Відпал фронтального контакту (утворення контакту до $n^+$ області)

Технологія КСЕ дифузійно-польового типу космічного призначення (див. таблицю 2.8, а схему елементу - на рис. 2.4а) базується на використанні комбінованого - індуковано-дифузійного способу формування роздільних бар'єрів у КСЕ. При цьому дифузійно-польові бар'єри утворюються як за допомогою дифузії мілких легуючих домішок (фосфору для  $p$ -типу бази

кремнію), так і завдяки заряду, який вбудовано у шар термічного двоокису кремнію товщиною 30 нм, сформованого на поверхні дифузійного шару. Відносно невисокий рівень легування емітерної області КСЕ з дифузійнопольовими бар'єрами забезпечує істотно нижчий рівень генераційно-рекомбінаційних втрат в емітерній області таких структур порівняно з дифузійними КСЕ і, в той же час, дозволяє істотно зменшити опір приповерхневого шару, а існування індукованого полем вбудованого заряду бар'єру значно зменшує швидкість поверхневої рекомбінації на межі поділу SiO<sub>2</sub>-Si. Контакти до фронтального *n*<sup>+</sup> (у вигляді сітки) і тильного *p*<sup>+</sup> шарів (суцільного) створювалися шляхом магнетронного нанесення алюмінію з наступною термообробкою при 450 °C у атмосфері сухого N<sub>2</sub>.

Таблиця 2.8 – Технологічний маршрут виготовлення КСЕ дифузійнопольового типу

№ з/п	Найменування операції	Режим. Особливості проведення
1	2	3
1	Формування партії	
2	Хімоброка	Karo* + H <sub>2</sub> O
3	Піролітичне осадження захисного окису	$d_{\text{SiO}_2}=0,7 \text{ мкм}$ , на лицьову поверхню
4	Хімоброка	Karo* + H <sub>2</sub> O
5	Дифузія В	$T=985^{\circ}\text{C}$ , на тилову поверхню
6	Розкислення боро-силікатного скла	$T=650^{\circ}\text{C}$
7	Травлення	HF 10%, освіження поверхні
8	Хімоброка	Karo* + H <sub>2</sub> O
9	Дифузія Р	$T=985^{\circ}\text{C}$ , на лицьову поверхню
10	Розкислення фосфорно-силікатного скла	$T=650^{\circ}\text{C}$
11	Травлення	HF 40%, до повного стравлювання
12	Хімоброка	Karo* + H <sub>2</sub> O

Продовження таблиці 2.8

1	2	3
13	Відпал адгезійний	Протягом 10 хв.
14	Нанесення і сушка фоторезисту	На тилову поверхню
15	Нанесення і сушка фоторезисту	На лицьову поверхню
16	Суміщення і експонування	На лицьовій поверхні
17	Проявлення фоторезисту	
18	Задублення фоторезисту	
19	Травлення роздільної канавки	$\text{HNO}_3 + \text{HF} + \text{H}_2\text{O}$ ; $d=1\div3$ мкм
20	Видалення фоторезисту	
21	Травлення	HF 10%
22	Хімобробка	Каро + $\text{H}_2\text{O}$
23	Термічне окислення	$\text{HCl}$ : $T=800\div1050^\circ\text{C}$ ; $d=20\div30$ нм
24	Термохімічне осадження плівок нітриду кремнію	$d_{\text{Si}_3\text{N}_4}=60\div70$ нм, на лицьову поверхню
25	Нанесення і сушка фоторезисту	На лицьову поверхню
26	Суміщення і експонування	На лицьову поверхню
27	Проявлення фоторезисту	
28	Задублення фоторезисту	
29	Травлення	Термічного окису і $\text{Si}_3\text{N}_4$
30	Видалення фоторезисту	
31	Корекція товщини просвітлюючого покриття	Травлення до 20 хв., контроль візуальний (яскраво-синій колір)
32	Хімобробка перед напиленням Al	
33	Напилення Al	$d_{\text{Al}} = 2$ мкм, на лицьову поверхню
34	Напилення Al	$d_{\text{Al}} = 2$ мкм, на тилову поверхню
35	Відпал Al	$T=430^\circ\text{C}$ , протягом 30 хв.
36	Нанесення і сушка фоторезисту	На тилову поверхню
37	Нанесення і сушка фоторезисту	На лицьову поверхню
38	Суміщення і експонування	На лицьовій поверхні

Кінець таблиці 2.8

1	2	3
39	Проявлення фоторезисту	
40	Задублення фоторезисту	
41	Травлення Al	$d_{Al} = 2 \text{ мкм}$
42	Видалення фоторезисту	
43	Надрізка пластин	

\*КАРО - суміш сірчаної кислоти  $H_2SO_4$  + перекис водню  $H_2O_2$  +  
деіонізована вода  $H_2O$

Аналіз наведених стандартних технологічних маршрутів показує, що операція гетерування як така у них відсутня. В літературі [116] запропоновано використовувати додаткові етапи обробки, спрямовані на вирішення саме такого завдання. Проте нашою задачею є насамперед знайти шляхи використання УЗН саме під час стандартного промислового процесу виготовлення КСЕ. При цьому один із шляхів ефективного використання УЗН при виробництві КСЕ полягає у застосуванні такої обробки перед операцією гетерування металевих домішок. Тоді УЗН сприятиме вивільненню атомів заліза з локальних потенціальних ям і його дифузії (тобто, відбуватиметься вплив на перший з трьох етапів за рахунок попереднього звільнення дефектів), а наступна операція гетерування забезпечить транспортування Fe з об'єму і зв'язування у неактивний стан. Крім того, доцільно використовувати УЗН і під час гетерування, оскільки AI прискорення дифузійних процесів дозволить збільшити об'єм активної, з якого за той самий час обробки відбудеться екстракція рекомбінаційно активних домішок (акусто-модифікація другого етапу, переміщення домішкових атомів, насамперед заліза, до гетеруючих стоків).

Таким чином, потрібно знайти операції, у яких може мати місце ефект гетерування. Це насамперед, високотемпературні операції: дифузія легуючих домішок, окиснення, термічні відпали. Наприклад, у роботах [67, 117] було встановлено, що у процесі створення емітера КСЕ шляхом термічної дифузії

фосфору має місце ефект «самогетерування», тобто рекомбінаційно активні домішки металів видаляються з об'єму в емітерну область, очищуючи базу КСЕ. Тобто у випадку заліза воно буде переведено з бази (*p*-Si) у емітер (*n<sup>+</sup>*-Si) КСЕ, де домішка заліза не є рекомбінаційно активною (відповідний її енергетичний рівень є заповненим електроном і не може приймати участь у рекомбінаційних ШРХ процесах. Крім того, в літературі [68] виявлено, що подібні процеси відбуваються і під час створення просвітлюючого шару нітриду кремнію.

Отже, враховуючи наведене вище, ми пропонуємо проводити УЗ обробку кремнієвих підкладок безпосередньо перед дифузією фосфору для створення *n<sup>+</sup>* емітера (операція 5 у таблиці 2.7 та 9 у таблиці 2.8) та термохімічним осадженням плівок нітриду кремнію (операції 10 та 24 у таблицях 2.7 та 2.8, відповідно), що має полегшити та покращити операцію самогетерування домішок під час наступних операцій. Оскільки основною задачею такої акустичної обробки є вивільнення зв'язаних у дефектні комплекси домішок, то її доцільно проводити при підвищених температурах (хоча б близько 100°C), при цьому акустичні деформації мають перевищувати величину ( $10^{-5} \div 10^{-4}$ ) і, виходячи з даних роботи [69], бажано використовувати коливання з частотою близько 100 кГц. З літератури відомо, що характерний час акустоіндукованих змін дефектної системи кремнію як правило менше 30 хв, причому він зменшується з підвищенням температури УЗН. Тому рекомендований час запропонованих обробок – 30 хв.

Крім того самі операції дифузії фосфору та термохімічного осадження також бажано проводити в умовах акустичного навантаження. При цьому бажано, щоб збуджувався УЗ з меншою інтенсивністю, ніж під час попередніх УЗ обробок: деформації мають бути в діапазоні  $(1 \div 5) \cdot 10^{-6}$  для того щоб, з одного боку, суттєво підвищити дифузійну здатність атомів заліза, а з другого – не бути перешкодою для захоплення міжвузольних домішок на центри гетерування. При цьому, як показали наші результати, при використання повз涓ожніх акустичних хвиль доцільно збуджувати коливання на частотах

(1÷5) МГц, а при використанні поперечних – (20÷30) МГц. При цьому умова підвищеної температури УЗН для збільшення ефективності АІ впливу в даному випадку не є важливою, так як самі вказані технологічні операції відбуваються при високих температурах.

В результаті запропонованих модифікацій стандартних операцій під час виробництва КСЕ має підвищитися ступінь очищення бази елементу від рекомбінаційних комплексів, пов’язаних із залізом, що знайде прояв у збільшенні довжини дифузії неосновних носіїв струму, гомогенізації рекомбінаційних характеристик ОПЗ, а також зниженні величин зворотних струмів. Це призведе, в свою чергу, до підвищення напруги розімкненого кола і струму короткого замикання, тобто до зростання ефективності фото перетворення (коєфіцієнта корисної дії) КСЕ. Крім того, однією з основних причин світло індукованої деградації КСЕ є розпад пар залізо бор в умовах стандартної роботи фотоперетворювачів. Загальне зменшення подібних дефектів підсилить і світлодеградаційну стійкість.

## 2.7 Основні результати розділу 2

1. Створено експериментальний стенд, який дозволяє вимірювати кінетичні характеристики параметрів КСЕ в умовах ультразвукового навантаження.

2. Запропоновано методику, що базується на вимірюванні кінетики струму короткого замикання КСЕ після інтенсивного освітлення та її подальшої апроксимації та дозволяє оцінити значення енергії міграції атомів заліза та концентрацію пар FeB, що дисоціювали внаслідок освітлення.

3. Проведено дослідження впливу світло-індукованого розпаду пар FeB на величину таких параметрів КСЕ, як струми насичення, пов’язані з процесами рекомбінації у квазі-нейтральній області та в ОПЗ, фактор неідеальності, послідовний та шунтуючий опір, струм короткого замикання, напруга холостого ходу, фактор заповнення ВАХ, максимальна вихідна

потужність (коєфіцієнт корисної дії), отриманих як за умов монохроматичного освітлення, так і стандартних умов енергетичної освітленості АМ1,5. Виявлено, що найбільш чутливими до розпаду пар залізо-бор є струм короткого замикання, максимальна вихідна потужність та струм насищення в ОПЗ, тоді як відносні зміни напруги холостого ходу та коєфіцієнта форми ВАХ значно менші і суттєво спадають при зменшенні температури. Зміни фактору неідеальності та струму насищення в квазі-нейтральній області спостерігаються лише при підвищених температурах ( $\sim 340$  К).

4. Показано, що відносні світлоіндуковані зміни струму короткого замикання та максимальної вихідної потужності можуть бути використані для оцінки концентрації заліза в КСЕ.

5. Показано, що ультразвукове навантаження практично не впливає на величину відносних змін параметрів КСЕ внаслідок світло-індукованого розпаду пар FeB.

6. Виявлено, що ультразвукове навантаження не впливає на величину часу світлоіндукованої дисоціації пар залізо-бор в КСЕ, проте спостерігається ефект зменшення кількості дисоційованих при освітленні пар за умов поширення в структурах акустичних хвиль. Останній ефект послаблюється зі зниженням температури та інтенсивності освітлення.

7. Виявлено ефект акустоіндукованого прискорення процесу асоціації пар залізо-бор, пов'язаний зі зменшенням енергії міграції атомів заліза в КСЕ в умовах УЗН.

8. Вивчено закономірності AI впливу на енергію міграції при використанні повздовжніх та поперечних акустичних хвиль. Зокрема показано, що величина зміни енергії лінійно залежить від інтенсивності ультразвуку і може досягати 18 мeВ. Ефективність УЗ впливу при використанні повздовжніх хвиль зменшуються при збільшенні частоти УЗ, тоді як для поперечних хвиль має місце зворотній частотний ефект. Акустоіндуковані зміни енергії міграції практично лінійно зростають при збільшенні температури, причому температурний коєфіцієнт зменшується при збільшенні частоти пружних

коливань незалежно від їхнього типу. Залежності акустоіндукованого ефекту від концентрації заліза та від інтенсивності освітлення (ступеню попередньої дисоціації пар) не виявлено.

9. Проаналізовано можливі механізми виявленого ефекту та показано, що найбільш ймовірними причинами є акустоіндуковане підвищення локальної ефективної температури кристалу та зменшення ефективної поляронної енергії, а також зменшення кулонівського відштовхування внаслідок збільшення відстані між компонентами пари FeB та/або перезарядка іона заліза в ультразвуковому полі.

10. Проаналізовано можливості практичного використання ультразвукового навантаження під час виробництва КСЕ та визначено, що застосування акустичних хвиль є доцільним до та під час таких технологічних операцій, як дифузія фосфору та термохімічне осадження нітриду кремнію; запропоновані бажані режими ультразвукового навантаження.

## ВИСНОВКИ

1. Відповідно до розробленої з врахуванням реальних величин параметрів матеріалу та рекомбінаційних центрів розрахункової моделі кремнієвої  $n^+-p-p^+$  структури проведено моделювання більше 40 тис. вольт-амперних характеристик систем з різною товщиною бази ( $150\div240$  мкм) та ступенем її легування ( $10^{15}\div10^{17}$  см $^{-3}$ ) для температурного діапазону  $290\div340$  К при варіації концентрації домішкового заліза в інтервалі  $10^{10}\div10^{13}$  см $^{-3}$ ; враховано можливість перебування домішкових атомів заліза у міжвузольному стані та у складі пари FeB; визначені відповідні значення фактору неідеальності у межах дво-діодної моделі.
2. Вперше розроблена глибока нейронна мережа, призначена для передбачення концентрації рекомбінаційно активних домішок в кремнієвих  $n^+-p-p^+$  структурах за величинами фактору неідеальності, рівня легування та товщини бази і температури. Проведено налаштування ГНМ та вибрано раціональні значення конфігурації схованих шарів та таких гіперпараметрів як розмір пакету (32), тип активаційної функції для схованих шарів (ReLU), тип оптимізатора (Adamax), темп навчання ( $10^{-3}$ ), кількість епох (400 або 1500 залежно від мережі), метод попередньої підготовки даних (нульове середнє значенні та одиничне стандартне відхилення), тип початкової ініціалізації вагових коефіцієнтів (з використанням функції Ксав'є та розподілу Гауса); показано недоречність використання регуляризації.
3. Шляхом тестування роботи ГНМ на синтетичних та експериментальних даних, показана можливість визначення концентрації електрично-активних центрів (на прикладі заліза) у кремнієвих сонячних елементах за величиною фактора неідеальності. Виявлено, що точність прогнозування зменшується з підвищенням температури вимірювань, а також зі збільшенням концентрації легуючої домішки.

4. Показано, що для ефективної роботи ГНМ а) необхідне тренування мережі з використанням значень рівня легування, які збігаються з відповідними величинами в структурах, які надалі досліджуються; б) використання двох значень величини фактору неідеальності, які відповідають випадкам наявності лише міжвузольних атомів заліза та рівноважного співіснування пар FeB та  $Fe_i$ , потенційно дозволяє суттєво підвищити прогностичні властивості нейронної мережі, але практична реалізація подібного підходу є ускладненою.
5. Шляхом аналізу особливостей формування величини фактору неідеальності показано, що створені глибокі нейронні мережі можуть бути застосовані для визначення концентрації домішкового заліза як в BSF, так і PERC сонячних елементах, виготовлених з пластин кремнію, легованих бором.
6. Запропоновано методику, що базується на вимірюванні кінетики струму короткого замикання КСЕ після інтенсивного освітлення та дозволяє оцінити значення енергії міграції атомів заліза та концентрацію пар FeB, які дисоціювали внаслідок освітлення.
7. Виявлено, що для кремнієвих сонячних елементів найбільш чутливими до розпаду пар залізо-бор є струм короткого замикання, максимальна вихідна потужність та струм насичення в ОПЗ, тоді як відносні зміни напруги холостого ходу та коефіцієнта форми ВАХ значно менші і суттєво спадають при зменшенні температури.
8. Показано, що відносні світлоіндуковані зміни струму короткого замикання та максимальної вихідної потужності можуть бути використані для оцінки концентрації заліза в КСЕ.
9. Вперше виявлено акустокеровані ефекти зменшення частки пар FeB, які дисоціювали внаслідок освітлення, та зменшення енергії міграції атомів заліза в кремнієвих сонячних елементах. Показано, що ефективність ультразвукового (частота 0,3-30 МГц, інтенсивність до 2 Вт/см<sup>2</sup>) впливу

на енергію міграції зростає при підвищенні температури, тоді як частотна залежність визначається типом коливань.

- 10.Проаналізовано можливі механізми виявлених ефектів та показано, що найбільш ймовірними причинами є акустоіндуковане підвищення локальної ефективної температури кристалу та зменшення ефективної поляронної енергії, а також зменшення кулонівського відштовхування внаслідок збільшення відстані між компонентами пари FeB та/або перезарядка іона заліза в ультразвуковому полі.
- 11.Проаналізовано можливості практичного використання ультразвукового навантаження під час виробництва КСЕ та визначено, що застосування акустичних хвиль є доцільним до та під час таких технологічних операцій, як дифузія фосфору та термохімічне осадження нітриду кремнію; запропоновані бажані режими ультразвукового навантаження.

## РЕКОМЕНДАЦІЇ

Рекомендації щодо застосування методу кількісної оцінки електрично-активних дефектів у бар'єрних структурах за величиною фактору неідеальності з використанням глибоких нейронних мереж.

1. При проектуванні глибокої нейронної мережі, яка призначена для передбачення концентрації рекомбінаційно активних домішок в кремнієвих  $n^+$ - $p-p^+$  структурах за величинами фактору неідеальності, рівня легування та товщини бази і температури використовувати наступні значення гіперпараметрів: розмір пакету - 32, тип активаційної функції для схованих шарів - ReLu, тип оптимізатора - Adamax, темп навчання -  $10^{-3}$ , кількість епох - не більше 1500, метод попередньої підготовки даних - нульове середнє значенні та одиничне стандартне відхилення, тип початкової ініціалізації вагових коефіцієнтів - з використанням функції Ксав'є чи розподілу Гауса), тип регуляризації – не застосовувати.
2. При підготовці тренувального набору даних обов'язково використовувати значення легування бази  $n^+$ - $p-p^+$  структури, які збігаються з відповідними величинами в структурах, які надалі плануються до дослідження
3. Проводити визначення концентрації електрично-активних дефектів за величиною фактору неідеальності, отриманого для вольт-амперних характеристик, вимірюваних поблизу кімнатної температури (менше 320 К).

Рекомендації щодо практичного використання ультразвукового навантаження під час виробництва кремнієвих сонячних елементів з метою підвищення ступеню гетерування домішкових атомів заліза.

1. Проводити ультразвукову обробку кремнієвих підкладок безпосередньо перед дифузією фосфору для створення  $n^+$  емітера та термохімічним осадженням плівок нітриду кремнію. Температура обробки – не менше  $100^\circ\text{C}$ , акустичні деформації - ( $10^{-5} \div 10^{-4}$ ), частота – близько 100 кГц, час - 30 хв.
2. Проводити операції дифузії фосфору та термохімічного осадження в умовах акустичного навантаження кремнієвих структур. Температура та час

відповідають стандартним умовам технологічних операцій, акустичні деформації -  $(1\div5)\cdot10^{-6}$ ; частота –  $(1\div5)$  МГц при використанні повздовжніх хвиль,  $(20\div30)$  МГц при використанні поперечних хвиль.

## ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

- 1 Explanation of High Solar Cell Diode Factors by Nonuniform Contact Resistance / A. S. H. van der Heide, A. Schonecker, J. H. Bultman, W. C. Sinke // Progress in Photovoltaics: Research and Applications. — 2005. — Vol. 13. — P. 3–16.
- 2 Relationship Between the Diode Ideality Factor and the Carrier Recombination Resistance in Organic Solar Cells / L. Duan, H. Yi, C. Xu et al. // IEEE Journal of Photovoltaics. — 2018. — Vol. 8. — P. 1701–1709.
- 3 Electrical characterization of GaN Schottky barrier diode at cryogenic temperatures / J. Chen, M. Zhu, X. Lu, X. Zou // Appl. Phys. Lett. — 2020. — Vol. 116 — P. 062102.
- 4 Dalapati, P. Analysis of the Temperature Dependence of Diode Ideality Factor in InGaN-Based UV-A Light-Emitting Diode / P. Dalapati, N.B. Manik, A.N. Basu // Semiconductors. — 2020. — Vol. 54. — P. 1284–1289.
- 5 Identifying Dominant Recombination Mechanisms in Perovskite Solar Cells by Measuring the Transient Ideality Factor / P. Calado, D. Burkitt, J. Yao et al. // Phys. Rev. Applied. — 2019. — Vol. 11. — P. 044005.
- 6 Olikh, O.Ya. Relationship between the ideality factor and the iron concentration in silicon solar cells / O.Ya. Olikh // Superlattices Microstruct. — 2019. — Vol. 136. — P. 106309.
- 7 Ju, S. Designing thermal functional materials by coupling thermal transport calculations and machine learning / S. Ju, S. Shimizu, J. Shiomi // J. Appl. Phys. — 2020. — Vol. 128. — P. 161102.
- 8 Rodrigues, S. Machine learning PV system performance analyser / S. Rodrigues, H. G. Ramos, F. Morgado-Dias // Prog. Photovoltaics Res. Appl. — 2018. — Vol. 26. — P. 675–687.
- 9 Machine learning and the physical sciences / G. Carleo, I. Cirac, K. Cranmer et al. // Rev. Mod. Phys. — 2019. — Vol. 91. — P. 045002.

- 10 Pathways for solar photovoltaics / J. Jean, P.R. Brown, R.L. Jaffe et al. // Energy Environ Sci. — 2015. — Vol. 8. — P. 1200–1219.
- 11 A review of photovoltaic performance of organic/inorganic solar cells for future renewable and sustainable energy technologies / J. Ajayan, D. Nirmal, P. Mohankumar et al. // Superlattices Microstruct. — 2020. — Vol. 143. — P. 106549.
- 12 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.
- 13 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.
- 14 Iron related solar cell instability: Imaging analysis and impact on cell performance / M.C. Schubert, M. Padilla, B. Michl et al. // Sol. Energy Mater. Sol. Cells. — 2015. — Vol. 138. — P. 96–101.
- 15 Passler R. Dispersion-related description of temperature dependencies of band gaps in semiconductors / R. Passler // Phys. Rev. B. – 2002. – Vol. 66. – P. 085201.
- 16 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.
- 17 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.
- 18 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.

- 19 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
- 20 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.
- 21 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.
- 22 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.
- 23 Geerligs, L. J. Dynamics of light-induced FeB pair dissociation in crystalline silicon / L. J. Geerligs, Daniel Macdonald // Appl. Phys. Lett. — 2004.— Vol. 85. — P. 5227–5229.
- 24 Zoth, G. A fast, preperation-free method to detect irpn in silicon / G. Zoth, W. Bergholz // J. Appl. Phys. — 1990. — Vol. 67. — P. 6764–6771.
- 25 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.
- 26 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.
- 27 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 // Sol. Energy Mater. Sol. Cells. — 2018. — Vol. 187. — P. 263–272.

- 28 Burgelman M. Modelling polycrystalline semiconductor solar cells / M. Burgelman, P. Nollet, S. Degrave // Thin Solid Films. – 2000. – Vol. 361-362. – P. 527-532.
- 29 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.
- 30 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.
- 31 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.
- 32 Sinke W.C. Development of photovoltaic technologies for global impact / W.C. Sinke // Renewable Energy. – 2019. – Vol. 138. – P. 911-914.
- 33 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.
- 34 Ishaque K. Simple, fast and accurate two-diode model for photovoltaic modules / K. Ishaque, Z. Salam, H. Taheri // Sol. Energy Mater. Sol. Cells. — 2011. — Vol. 95. — P. 586–594.
- 35 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.
- 36 Parameters identification of photovoltaic models using an improved JAYA optimization algorithm / K. Yu, J.J. Liang, B.Y. Qu et al. // Energy Conversion and Management. — 2017. — Vol. 150. — P. 742–753.

- 37 Olikh, O. Ya. Modeling of ideality factor value in  $n+$ - $p$ - $p+$ -Si structure / O. Ya. Olikh, O. V. Zavhorodnii // Journal of Physical Studies. — 2020. — Vol. 24. — P. 4701-1-4701-8.
- 38 Olikh, O. Deep-learning approach to the iron concentration evaluation in silicon solar cell / O. Olikh, O. Lozitsky, O. Zavhorodnii // 9 European conference on renewable energy systems. Proceedings. Istanbul, Turkey. / Ed. by Erol Kurt. — Istanbul: 2021. — P. 22.
- 39 Chollet, F. Deep Learning with Python / F. Chollet. — Second edition. — Manning, 2017. — 361 c.
- 40 Estimation of Iron Concentration in Silicon Solar Cell by Kinetics of Light-Induced Change in Short-Circuit Current / O. Olikh, V. Kostylyov, V. Vlasiuk, R. Korkishko // II International Advanced Study Conference Condensed Matter and Low Temperature Physics CM&LTP 2021. Book of Abstracts. Kharkiv, Ukraine. — Kharkiv: 2021. — P. 191.
- 41 Iron-boron pairing kinetics in illuminated p-type and in boron/phosphorus co-doped n-type silicon / C. Moller, T. Bartel, F. Gibaja, K. Lauer // J. Appl. Phys. — 2014. — Vol. 116. — P. 024503.
- 42 Dissociation and Formation Kinetics of Iron–Boron Pairs in Silicon after Phosphorus Implantation Gettering / N. Khelifati, H.S. Laine, V. Vahanissi et al. // Phys Status Solidi A. — 2019. — Vol. 216. — P. 1900253.
- 43 Green, M. A. Photovoltaic technology and visions for the future / M. A. Green // Prog. Energy. — 2019. — Vol. 1. — P. 013001.
- 44 The 2020 photovoltaic technologies roadmap / G.M. Wilson, M. AlJassim, W. K. Metzger et al. // J. Phys. D: Appl. Phys. — 2020. — Vol. 53. — P. 493001.
- 45 McIntosh, K. Depletion–region recombination in silicon solar cells. When does  $m_{DR} = 2$ ? / K. McIntosh, P. Altermatt, G. Heiser // 16th European Photovoltaic Solar Energy Conference: Proceedings of the International

- Conference and Exhibition. — Publisher:James and James (Science Publishers) Ltd, 2000. — P. 250–253.
- 46 Method of Extracting Solar Cell Parameters From Derivatives of Dark I–V Curves / B. J. Hallam, P. G. Hamer, R. S. Bonilla et al. // IEEE Journal of Photovoltaics. — 2017. — Vol. 7. — P. 1304–1312.
- 47 Experimental analysis and theoretical model for anomalously high ideality factors ( $n >> 2:0$ ) in AlGaN/GaN p–n junction diodes / J. M. Shah, Y.-L. Li, Th. Gessmann, E. F. Schubert // J. Appl. Phys. — 2003. — Vol. 94. — P. 2627–2630.
- 48 Lindroos, J. Review of light-induced degradation in crystalline silicon solar cells / J. Lindroos, H. Savin // Sol. Energy Mater. Sol. Cells. — 2016. — Vol. 147. — P. 115–126.
- 49 Degradation of Crystalline Silicon Due to Boron–Oxygen Defects / T. Niewelt, J. Schoon, W. Warta et al. // IEEE Journal of Photovoltaics. — 2017. — Vol. 7. — P. 383–398.
- 50 Minority carrier lifetime in silicon photovoltaics: The effect of oxygen precipitation / J.D. Murphy, J.D. McGuire, K. Bothe et al. // Sol. Energy Mater. Sol. Cells. — 2014. — Vol. 120. — P. 402–411.
- 51 Effect of oxygen precipitation on the performance of Czochralski silicon solar cells / L. Chen, X. Yu, P. Chen et al. // Sol. Energy Mater. Sol. Cells. — 2011. — Vol. 95. — P. 3148–3151.
- 52 Silicon solar cells with boron back surface field formed by using boric acid / D. S. Kim, K. Nakayashiki, B. Rounsville at al. // 22th European Photovoltaic Solar Energy Conference: Proceedings of the International Conference and Exhibition. — 2007. — P. 1730–1733.
- 53 Efficient Boron Doping in the Back Surface Field of Crystalline Silicon Solar Cells via Alloyed-Aluminum–Boron Paste / G. Du, B. Chen, N. Chen, R. Hu // IEEE Electron Device Letters. — 2012. — Vol. 33. — P. 573–575.

- 54 Ostapenko, Sergei S. Ultrasound Stimulated Defect Reactions in Semiconductors / S.S. Ostapenko, N.E. Korsunskaya, M.K. Sheinkman // Defect Interaction and Clustering in Semiconductors. — Vol. 85 of Solid State Phenomena. — Trans Tech Publications Ltd, 2001. — P. 317–336.
- 55 Savkina, R.K. Recent Progress in Semiconductor Properties Engineering by Ultrasonication / R.K. Savkina // Recent Patents on Electrical & Electronic Engineering. — 2013. — Vol. 6. — P. 157–172.
- 56 Acousto-defect interaction in irradiated and non-irradiated silicon n<sup>+</sup>-p structure / O. Ya. Olikh, A. M. Gorb, R. G. Chupryna, O. V. Pristay-Fenenkov // J. Appl. Phys. — 2018. — Vol. 123. — P. 161573.
- 57 Davletova, A. Open-circuit voltage decay transient in dislocation-engineered Si p-n junction / A. Davletova, S. Zh. Karazhanov // Journal of Physics D: Applied Physics. — 2008. — Vol. 41. — P. 165107.
- 58 Olikh, Y. Mechanisms of Two-Stage Conductivity Relaxation in CdTe:Cl with Ultrasound / Y. Olikh, M. Tymochko, O. Olikh // J. Electron. Mater. — 2020. — Vol. 49. — P. 4524–453.
- 59 Olikh, O. Reversible influence of ultrasound on irradiated Mo/n-Si Schottky barrier structure / O. Olikh // Ultrasonics. — 2015. — Vol. 56. — P. 545–550.
- 60 Olikh, O. Ya. Ultrasound influence on I–V–T characteristics of silicon Schottky barrier structure / O. Ya. Olikh, K. V. Voytenko, R. M. Burbelo // J. Appl. Phys. — 2015. — Vol. 117. — P. 044505.
- 61 Sukach, A.V. Ultrasonic treatment-induced modification of the electrical properties of InAs p–n junctions / A.V. Sukach, V.V. Teterkin // Tech. Phys. Lett. — 2009. — Vol. 35. — P. 514–517.
- 62 Influence of in situ ultrasound treatment during ion implantation on amorphization and junction formation in silicon / D. Kruger, B. Romanyuk, V. Melnik et al. // J. Vac. Sci. Technol. B. — 2002. — Vol. 20. — P. 1448–1451.

- 63 Modification of the Si amorphization process by in situ ultrasonic treatment during ion implantation / B. Romanyuk, V. Melnik, Ya. Olikh et al. // Semicond. Sci. Technol. — 2001. — Vol. 16. — Pp. 397–401.
- 64 Kalem, S. Effect of Light Exposure and Ultrasound on the Formation of Porous Silicon / S. Kalem, O. Yavuzcetin, C. Altineller // Journal of Porous Materials. — 2000. — Vol. 7. — P. 381–383.
- 65 Ultrasonic-assisted mist chemical vapor deposition of II–oxide and related oxide compounds / Shizuo Fujita, Kentaro Kaneko, Takumi Ikenoue et al. // Phys. Status Solidi C. — 2014. — Vol. 11. — P. 1225–1228.
- 66 Impact of Iron Precipitation on Phosphorus-Implanted Silicon Solar Cells / H.S. Laine, V. Vahanissi, A.E. Morishige et al. // IEEE Journal of Photovoltaics. — 2016. — Vol. 6. — P. 1094–1102.
- 67 Impact of phosphorus gettering parameters and initial iron level on silicon solar cell properties / V. Vahanissi, A. Haarahiltunen, H. Talvitie et al. // Progress in Photovoltaics: Research and Applications. — 2013. — Vol. 21. — P. 1127–1135.
- 68 Evolution of iron-containing defects during processing of Si solar cells / T. Mchedlidze, C. Moller, K. Lauer, J. Weber // J. Appl. Phys. — 2014. — Vol. 116. — P. 245701.
- 69 Ostapenko, S. Ultrasound stimulated dissociation of Fe–B pairs in silicon / S. Ostapenko, R. Bell // J. Appl. Phys. — 1995. — Vol. 77. — P. 5458–5460.
- 70 Increasing short minority carrier diffusion lengths in solar-grade polycrystalline silicon by ultrasound treatment / S. S. Ostapenko, L. Jastrzebski, J. Lagowski, B. Sopori // Appl. Phys. Lett. — 1994. — Vol. 65. — P. 1555–1557.
- 71 Ostapenko, S. S. Change of minority carrier diffusion length in polycrystalline silicon by ultrasound treatment / S. S. Ostapenko, L. Jastrzebski, B. Sopori // Semicond. Sci. Technol. — 1995. — Vol. 10. — P. 1494–1500.

- 72 Solar Cells. Materials, Manufacture and Operation / Ed. by A. McEvoy, T. Markvart, L. Castaner. — Second edition. — Oxford: Academic Press, 2013. — 641 p.
- 73 Green, M.A. Optical properties of intrinsic silicon at 300 K / M.A. Green, M.J. Keevers // Progress in Photovoltaics: Research and Applications. — 1995. — Vol. 3. — P. 189–192.
- 74 Дъелисан, Э. Упругие волны в твёрдых телах. Применение для обработки сигналов / Э. Дъелисан, Д. Руайе. — М.: Наука, 1982. — 424 с.
- 75 Temperature dependence of photoconversion efficiency in silicon heterojunction solar cells: Theory vs experiment / A.V. Sachenko, Yu.V. Kryuchenko, V. P. Kostylyov et al. // J. Appl. Phys. — 2016. — Vol. 119. — P. 225702.
- 76 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.
- 77 Фаренбрух, А. Солнечные элементы. Теория и эксперимент / А. Фаренбрух, Р. Бьюб. — М.: Энергоатомиздат, 1987. — 280 с.
- 78 Razeghi, M. Semiconductor ultraviolet detectors / M. Razeghi, A. Rogalski // J. Appl. Phys. — 1996. — Vol. 79. — P. 7433–7473.
- 79 Silicon solar cells with antireflecting and protective coatings based on diamondlike carbon and silicon carbide films / N.I. Klyui, V.P. Kostylyov, A.G. Rozhin et al. // Opto-Electr. Rev. — 2000. — Vol. 8. — P. 402–405.
- 80 Mohamed, A. W. Novel mutation strategy for enhancing SHADE and LSHADE algorithms for global numerical optimization / A. W. Mohamed, A. A. Hadi, K. M. Jambi // Swarm Evol. Comput. — 2019. — Vol. 50. — P. 100455.
- 81 Stokes, E.D. Diffusion lengths in solar cells from short-circuit current measurements / E. D. Stokes, T. L. Chu // Appl. Phys. Lett. — 1977. — Vol. 30. — P. 425–426.

- 82 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.
- 83 Accurate measurement of the formation rate of iron–boron pairs in silicon / J. Tan, D. Macdonald, F. Rougieux, A. Cuevas // *Semicond Sci. Technol.* — 2011. — Vol. 26. — P. 055019.
- 84 Fast and Slow Stages of Lifetime Degradation by Boron–Oxygen Centers in Crystalline Silicon / J. Schmidt, K. Bothe, V. V. Voronkov, R. Falster // *physica status solidi (b)*. — 2020. Vol. 257. — P. 1900167.
- 85 Iron detection in the part per quadrillion range in silicon using surface photovoltage and photodissociation of iron-boron pairs / J. Lagowski, P. Edelman, A. M. Kontkiewicz et al. // *Appl. Phys. Lett.* — 1993. — Vol. 63. — P. 3043–3045.
- 86 Estimation of Iron Concentration in Silicon Solar Cell by Kinetics of Light-Induced Change in Short-Circuit Current / O. Olikh, V. Kostylyov, V. Vlasiuk, R. Korkishko // II International Advanced Study Conference Condensed Matter and Low Temperature Physics CM&LTP 2021. Book of Abstracts. Kharkiv, Ukraine. — Kharkiv: 2021. — P. 191.
- 87 New guidelines for a more accurate extraction of solar cells and modules key data from their current–voltage curves / B. Paviet-Salomon, J. Levrat, V. Fakhfouri et al. // *Prog. Photovoltaics Res. Appl.* — 2017. — Vol. 25. — P. 623–635.
- 88 Olikh, O.Ya. Acoustically driven degradation in single crystalline silicon solar cell / O.Ya. Olikh // *Superlattices Microstruct.* — 2018. — Vol. 117. —P. 173–188.
- 89 Acoustically Induced Acceleration of Iron Migration in Silicon Solar Cells / O. Olikh, V. Kostylyov, V. Vlasiuk, R. Korkishko // Ultrasonics 2021, 5th International Caparica Conference on Ultrasonic based Applications: from

- analysis to synthesis. Proceedings Book. Caparica, Portugal. — Caparica: 2021. — P. 109.
- 90 Оліх, О.Я. Дефекти у напівпровідникових та діелектричних кристалах / О.Я. Оліх. — Вінниця: ФОП Корзун Д.Ю., 2016. — 152 с.
- 91 Aziz, M. J. Stress effects on defects and dopant diffusion in Si / M. J. Aziz // Mater. Sci. Semicond. Process. — 2001. — Vol. 4. — P. 397–403.
- 92 Weber, E.R. Transition metals in silicon / E.R. Weber // Appl. Phys. A. — 1983. — Vol. 30. — P. 1–22.
- 93 Механизм изменения подвижности носителей заряда при ультразвуковой обработке полупроводниковых твердых растворов / П.И. Баранский, А.Е. Беляев, С.М. Комиренко, Шевченко Н.В. // Физика твердого тела. — 1990. — Т. 32 — С. 2159–2161.
- 94 Ostapenko, S. Defect passivation using ultrasound treatment: fundamentals and application / S. Ostapenko // Applied Physics A: Materials Science & Processing. — 1999. — Vol. 69. — P. 225–232.
- 95 Activation of luminescence in polycrystalline silicon thin films by ultrasound treatment / J. Koshka, S. Ostapenko, T. Ruf, J. M. Zhang // Appl. Phys. Lett. — 1996. — Vol. 69. — P. 2537–2539.
- 96 Ostapenko, S.S. Mechanism of Ultrasonic Enhanced Hydrogenation in Poly–Si Thin Films / S.S. Ostapenko // Defects in Semiconductors 19. — Vol. 258 of Materials Science Forum. — Trans Tech Publications, 1997. — P. 197–202.
- 97 Заверюхин, Б.Н. Изменение коэффициента отражения излучения от поверхности полупроводников в спектральном диапазоне  $\lambda = 0.2 \div 20$   $\mu\text{m}$  под воздействием ультразвуковых волн / Б.Н. Заверюхин, Н.Н. Заверюхина, О.М. Турсункулов // Письма в журнал технической физики. — 2002. — Т. 28. — С. 1–12.

- 98 Акустостимулированное изменение плотности и энергетического спектра поверхностных состояний в монокристаллах р–кремния / Н.Н. Заверюхина, Е.Б. Заверюхина, С.И. Власов, Б.Н. Заверюхин // Письма в журнал технической физики. — 2008. — Т. 34. — С. 36–42.
- 99 Акустостимулированная адгезия медных пленок к кремнию / Б.Н. Заверюхин, Х.Х. Исмаилов, Р.А. Муминов и др. // Письма в журнал технической физики. — 1996. — Т. 22. — С. 25–27.
- 100 Островский, И.В. Стимулированное ультразвуком низкотемпературное перераспределение примесей в кремнии / И.В. Островский, А.Б. Надточий, А.А. Подолян // Физика и техника полупроводников. — 2002. — Т. 36. — С. 389–391.
- 101 Influence of  $\gamma$ -irradiation and ultrasound treatment on current mechanism in Au-SiO<sub>2</sub>-Si structure / A.M. Gorb, O.A. Korotchenkov, O.Ya. Olikh et al. // Solid-State Electron. — 2020. — Vol. 165. — P. 107712.
- 102 Pressure and stress effects on the diffusion of B and Sb in Si and Si-Ge alloys / M. J. Aziz, Y. Zhao, H.-J. Gossman et al. // Phys. Rev. B. — 2006. — Vol. 73. — P. 054101.
- 103 Influence of dislocation strain fields on the diffusion of interstitial iron impurities in silicon / B. Ziebarth, M. Mrovec, C. Elsasser, P. Gumbsch // Phys. Rev. B. — 2015. — Vol. 92. — P. 115309.
- 104 Mirzade, F. Elastic wave propagation in a solid layer with laser-induced point defects / F. Mirzade // J. Appl. Phys. — 2011. — Vol. 110. — P. 064906.
- 105 Mirzade, F. Kh. A model for the propagation of strain solitary waves in solids with relaxing atomic defects / F. Kh. Mirzade // J. Appl. Phys. — 2008. — Vol. 103. — P. 044904.
- 106 Peleshchak, R.M. Formation of Periodic Structures under the Influence of an Acoustic Wave in Semiconductors with a Two-Component Defect Subsystem /

- R.M. Peleshchak, O.V. Kuzyk, O.O. Dan'kiv // Ukr. J. Phys. — 2016. — Vol. 61. — P. 741–746.
- 107 Pavlovich, V. N. Enhanced Diffusion of Impurities and Defects in Crystals in Conditions of Ultrasonic and Radiative Excitation of the Crystal Lattice / V. N. Pavlovich // Phys. Status Solidi B. — 1993. — Vol. 180. — P. 97–105.
- 108 Krevchik, V. D. Influence of ultrasound on ionic diffusion process in semiconductors / V. D. Krevchik, R. A. Muminov, A. Ya. Yafasov // Phys. Status Solidi A. — 1981. — Vol. 632. — P. K159–K162.
- 109 Yost, W. T. Acoustic-radiation stress in solids. II. Experiment / W. T. Yost, J.H. Cantrell // Phys. Rev. B. — 1984. — Vol. 30. — P. 3221–3227.
- 110 Chen, M.-J. Effect of uniaxial strain on anisotropic diffusion in silicon / M.-J. Chen, Y.-M. Sheu // Appl. Phys. Lett. — 2006. — Vol. 89. — P. 161908.
- 111 Philip, J. Temperature variation of some combinations of third-order elastic constants of silicon between 300 and 3 K / J. Philip, M. A. Breazeale // J. Appl. Phys. — 1981. — Vol. 52. — P. 3383–3387.
- 112 Korotchenkov, O.A. Long-wavelength acoustic-mode-enhanced electron emission from Se and Te donors in silicon / O.A. Korotchenkov, H.G. Grimmeiss // Phys. Rev. B. — 1995. — Vol. 52. — P. 14598–14606.
- 113 Olikh, O. Ya. Ultrasound-Stimulated Increase in the Electron Diffusion Length in p-Si Crystals / O. Ya. Olikh, I. V. Ostrovskii // Phys. Solid State. — 2002. — Vol. 44. — P. 1249–1253.
- 114 The influences of the properties of impurities and defects on the dark I-V characteristic curve and output parameters of c-Si solar cells / X. Lu, Y. Song, J. Gao et al. // Phys. B: Condens. Matter. — 2017. — Vol. 520. — P. 28–36.
- 115 Recombination via point defects and their complexes in solar silicon / A. R. Peaker, V. P. Markevich, B. Hamilton et al. // Phys Status Solidi A. — 2012. — Vol. 209. — P. 1884–1893.

- 116 Effect of internal gettering of iron on electrical characteristics of devices /  
H. Talvitie, A. Haarahiltunen, H. Savin et al. // Materials Science and  
Engineering: B. — 2009. — Vol. 159-160. — P. 269–273.
- 117 Macdonald, D. Effect of gettered iron on recombination in diffused regions of  
crystalline silicon wafers / D. Macdonald, H. Mackel, A. Cuevas // Appl.  
Phys. Lett. — 2006. — Vol. 88. — P. 092105.

## ДОДАТОК А

### Перелік підготованих доповідей на конференції

Таблиця А.1

№ з/п	Назва конференції	Місце, дата проведення	Назва доповіді, автори
1	2	3	4
1	9 European conference on renewable energy systems	Istanbul, Turkey, 21-23 April, 2021	Deep-learning approach to the iron concentration evaluation in silicon solar cell / O. Olikh, O. Lozitsky, O. Zavhorodnii
2	Ultrasonics 2021, 5th International Caparica Conference on Ultrasonic based Applications: from analysis to synthesis	Caparica, Portugal, 31 May – 3 June, 2021	Acoustically Induced Acceleration of Iron Migration in Silicon Solar Cells / O. Olikh, V. Kostylyov, V. Vlasiuk, R. Korkishko
3	II International Advanced Study Conference Condensed Matter and Low Temperature Physics CM&LTP 2021	Kharkiv, Ukraine, 6-12 June, 2021	Estimation of Iron Concentration in Silicon Solar Cell by Kinetics of Light-Induced Change in Short-Circuit Current / O. Olikh, V. Kostylyov, V. Vlasiuk, R. Korkishko
4	IEEE 48th Photovoltaic Specialists Conference (PVSC)	Fort Lauderdale, USA, 20-25 June, 2021	Modeling of the key characteristics of high-efficiency silicon solar cells with planar surfaces / A. Sachenko, V. Kostylyov, V. Vlasiuk, I. Sokolovskyi, M. Evstigneev

## Продовження таблиці А.1

1	2	3	4
5	IEEE 48th Photovoltaic Specialists Conference (PVSC)	Fort Lauderdale, USA, 20-25 June, 2021	Analysis of the recombination mechanisms in silicon solar cells with the record 26.6% photoconversion efficiency / A. Sachenko, V. Kostylyov, V. Vlasiuk, I. Sokolovskyi, M. Evstigneev
6	IEEE 48th Photovoltaic Specialists Conference (PVSC)	Fort Lauderdale, USA, 20-25 June, 2021	Characterization and Optimization of Highly Efficient Silicon-Based Textured Solar Cells: Theory and Experiment / A. Sachenko, V. Kostylyov, V. Vlasiuk, I. Sokolovskyi, M. Evstigneev, A.I. Shkrebtii, D. Johnston, P. ichael, T. Missimer
7	3 <sup>rd</sup> AAAFM-UCLA International Conference on Advances in Functional Materials	Los Angeles, USA, 18-20 August, 2021	Ultrasound as Functional Influence Tool on FeB pair Association in Silicon Solar Cells / O. Olikh, V. Kostylyov, V. Vlasiuk, R. Korkishko,
8	38 European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition	Online, 06-10 September, 2021	Development and implementation of a refined model for comprehensive characterization and optimization of highly efficient silicon solar cells / A.V. Sachenko, V.P. Kostylyov, V.M. Vlasiuk, I. Sokolovskyi, G. Perinparajah, A.I. Shkrebtii

## Кінець таблиці А.1

1	2	3	4
9	XII International Scientific Conference Functional Basis of Nanoelectronics	Kharkiv – Odesa, Ukraine, 20-24 September, 2021	Iron-impurities-activated kinetics of the light-induced processes in silicon solar cells / V. Vlasiuk, R. Korkishko, V. Kostylyov, O. Olikh
10	International Conference on Electrical, Computer, Communications and Mechatronics Engineering (ICECCMЕ)	Mauritius, Mauritius, 07-08 October, 2021	Kinetics of Light-Induced Processes Due to Iron Impurities in Silicon Solar Cells / V. Vlasiuk, R. Korkishko, V. Kostylyov, O. Olikh

## ДОДАТОК Б

### Перелік підготованих наукових праць

Тези доповідей:

1. Olikh, O. Deep-learning approach to the iron concentration evaluation in silicon solar cell / O. Olikh, O. Lozitsky, O. Zavhorodnii // 9 European conference on renewable energy systems. Proceedings. Istanbul, Turkey. / Ed. by Erol Kurt. — Istanbul: 2021. — P. 22.

Особистий внесок авторів проєкту:

O. Olikh: постановка задачі, розробка розрахункової моделі та архітектури нейронної мережі, аналіз, інтерпретація і обговорення отриманих результатів, корекція тексту рукопису

O. Lozitsky: налаштування нейронної мережі, участь у проведенні розрахунків, графічна візуалізація отриманих даних, участь у обговоренні отриманих результатів, участь у підготовці рукопису

2. Acoustically Induced Acceleration of Iron Migration in Silicon Solar Cells / O. Olikh, V. Kostylyov, V. Vlasiuk, R. Korkishko // Ultrasonics 2021, 5th International Caparica Conference on Ultrasonic based Applications: from analysis to synthesis. Proceedings Book. Caparica, Portugal. — Caparica: 2021. — P. 109.

3. Estimation of Iron Concentration in Silicon Solar Cell by Kinetics of Light-Induced Change in Short-Circuit Current / O. Olikh, V. Kostylyov, V. Vlasiuk, R. Korkishko // II International Advanced Study Conference Condensed Matter and Low Temperature Physics CM&LTP 2021. Book of Abstracts. Kharkiv, Ukraine. — Kharkiv: 2021. — P. 191.

4. Ultrasound as Functional Influence Tool on FeB pair Association in Silicon Solar Cells / O. Olikh, V. Kostylyov, V. Vlasiuk, R. Korkishko // 3<sup>rd</sup> AAAFM-UCLA International Conference on Advances in Functional Materials. Los Angeles, USA. — Los Angeles: 2021. — P. 40.

Наукові статті у матеріалах конференцій, що не індексуються у SCOPUS:

5. Iron-impurities-activated kinetics of the light-induced processes in silicon solar cells / V. Vlasiuk, R. Korkishko, V. Kostylyov, O. Olikh // XII International Scientific Conference Functional Basis of Nanoelectronics. — Kharkiv – Odesa: 2021. — P. 27–31.

6. Development and implementation of a refined model for comprehensive characterization and optimization of highly efficient silicon solar cells / A.V. Sachenko, V.P. Kostylyov, V.M. Vlasiuk et al. // Proceedings 38 European Photovoltaic Solar Energy Conf. and Exhib. — 2021. — P. 261–264.

Особистий внесок авторів проєкту:

V.P. Kostylyov - постановка задачі, аналіз, інтерпретація і обговорення отриманих результатів, корекція тексту рукопису статті.

V.M. Vlasiuk – графічна візуалізація отриманих даних, участь у обговоренні отриманих результатів, участь у підготовці рукопису статті.

Наукові статті у журналах, що не індексуються у SCOPUS:

7. Acoustically Induced Acceleration of Iron Migration in Silicon Solar Cells / O. Olikh, V. Kostylyov, V. Vlasiuk, Korkishko R. // Journal of integrated OMICS. — 2021. — Vol. 11. — P. 1–2; <https://doi.org/10.5584/jomics.v11i1.199>.

Квартиль журналу – Q4

(<https://www.scimagojr.com/journalsearch.php?q=21100818513&tip=sid&clean=0>).

Наукові статті у матеріалах конференцій, що індексуються у SCOPUS:

8. Kinetics of Light-Induced Processes Due to Iron Impurities in Silicon Solar Cells / V. Vlasiuk, R. Korkishko, V. Kostylyov, Oleg Olikh // 2021 International Conference on Electrical, Computer, Communications and Mechatronics Engineering (ICECCME). — Mauritius: 2021. — P. 1–6; <https://doi.org/10.1109/ICECCME52200.2021.9591025>.

9. Modeling of the key characteristics of high-efficiency silicon solar cells with planar surfaces / A. Sachenko, V. Kostylyov, V. Vlasiuk et al. // 2021 IEEE 48th Photovoltaic Specialists Conference (PVSC). — 2021. — Р. 0590–0595; <https://doi.org/10.1109/PVSC43889.2021.9518502>.

Особистий внесок авторів проекту:

V.P. Kostylyov - постановка задачі, участь у проведенні теоретичних розрахунків, аналіз, інтерпретація і обговорення отриманих результатів, участь у підготовці рукопису статті.

V.M. Vlasiuk – графічна візуалізація отриманих даних, участь у обговоренні отриманих результатів, участь у підготовці рукопису статті.

10. Analysis of the recombination mechanisms in silicon solar cells with the record 26.6% photoconversion efficiency / Anatoliy Sachenko, Vitaliy Kostylyov, Viktor Vlasiuk et al. // 2021 IEEE 48th Photovoltaic Specialists Conference (PVSC). — 2021. — Р. 0532–0539; <https://doi.org/10.1109/PVSC43889.2021.9519055>.

Особистий внесок авторів проекту:

V.P. Kostylyov - постановка задачі, участь у проведенні теоретичних розрахунків, аналіз, інтерпретація і обговорення отриманих результатів, участь у підготовці рукопису статті.

V.M. Vlasiuk – графічна візуалізація отриманих даних, участь у обговоренні отриманих результатів, участь у підготовці рукопису статті.

11. Characterization and Optimization of Highly Efficient Silicon-Based Textured Solar Cells: Theory and Experiment / A.V. Sachenko, V. P. Kostylyov, V. M. Vlasiuk et al. // 2021 IEEE 48th Photovoltaic Specialists Conference (PVSC). — 2021. — Р. 0544–0550; <https://doi.org/10.1109/PVSC43889.2021.9518764>.

Особистий внесок авторів проекту:

V.P. Kostylyov - постановка задачі, участь у проведенні теоретичних розрахунків, аналіз, інтерпретація і обговорення отриманих результатів, участь у підготовці рукопису статті.

V.M. Vlasiuk – планування і проведення експериментів, обробка і систематизація експериментальних даних, участь у обговоренні отриманих результатів, участь у підготовці рукопису статті.

Наукові статті у журналах, що індексуються у SCOPUS:

12. Olikh, O. Ya. Modeling of ideality factor value in  $n+-p-p+-Si$  structure / O. Ya. Olikh, O. V. Zavhorodnii // Journal of Physical Studies. — 2020. — Vol. 24. — P. 4701-1-4701-8; <https://doi.org/10.30970/jps.24.4701>.

Квартиль журналу – Q4

(<https://www.scimagojr.com/journalsearch.php?q=145506&tip=sid&clean=0>).

Особистий внесок авторів проєкту:

O. Olikh: постановка задачі, розробка розрахункової моделі, аналіз, інтерпретація і обговорення отриманих результатів, підготовка тексту рукопису.

13. Simulation and characterization of planar high-efficiency back contact silicon solar cells / A.V. Sachenko, V.P. Kostylyov, R.M. Korkishko et al. // Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics. — 2021. — Vol. 24. — P. 319–327; <https://doi.org/10.15407/spqeo24.03.319>.

Квартиль журналу – Q3 (Electrical and Electronic Engineering)

(<https://www.scimagojr.com/journalsearch.php?q=21100911934&tip=sid&clean=0>).

Особистий внесок авторів проєкту:

V.P. Kostylyov - постановка задачі, аналіз, інтерпретація і обговорення отриманих результатів, участь у підготовці тексту рукопису статті.

V.M. Vlasiuk – графічна візуалізація отриманих даних, участь у обговоренні отриманих результатів, участь у підготовці рукопису статті.

R.M. Korkishko - участь у обговоренні отриманих результатів, участь у підготовці рукопису статті.

14. Features of FeB pair light-induced dissociation and repair in silicon  $n+-p-p+$  structures under ultrasound loading / O. Olikh, V. Kostylyov, V. Vlasiuk et al. // J. Appl. Phys. – стаття прийнята до друку.

Квартиль журналу – Q2

(<https://www.scimagojr.com/journalsearch.php?q=28132&tip=sid&clean=0>).

Особистий внесок авторів проекту:

O. Olikh: постановка задачі, участь у проведенні теоретичних розрахунків, аналіз, інтерпретація і обговорення отриманих результатів, графічна візуалізація отриманих даних, участь у підготовці тексту рукопису статті.

V. Kostylyov - участь у проведенні теоретичних розрахунків, аналіз, інтерпретація і обговорення отриманих результатів, участь у підготовці тексту рукопису статті.

V. Vlasiuk – планування і проведення експериментів, систематизація експериментальних даних, участь у обговоренні отриманих результатів, участь у підготовці рукопису статті.

R. Korkishko - планування і проведення експериментів, участь у обговоренні отриманих результатів, участь у обговоренні рукопису статті.

15. Olikh, O. Estimation for iron contamination in Si solar cell by ideality factor: deep neural network approach / O. Olikh, O. Lozitsky, O. Zavhorodnii // Prog. Photovoltaics Res. Appl. - публікація знаходиться на стадії рецензування.

Квартиль журналу – Q1

(<https://www.scimagojr.com/journalsearch.php?q=27540&tip=sid&clean=0>).

Особистий внесок авторів проекту:

O. Olikh: постановка задачі, розробка розрахункової моделі та архітектури нейронної мережі, аналіз, інтерпретація і обговорення отриманих результатів, корекція тексту рукопису

O. Lozitsky: налаштування нейронної мережі, участь у проведенні розрахунків, графічна візуалізація отриманих даних, участь у обговоренні

отриманих результатів, участь у підготовці рукопису

16. Intensification of iron-boron complex association in silicon solar cells under acoustic wave action / O. Olikh, V. Kostylyov, V. Vlasiuk et al. // Applied Physics A - публікація знаходиться на стадії рецензування.

Квартиль журналу – Q2

(<https://www.scimagojr.com/journalsearch.php?q=27027&tip=sid&clean=0>).

Особистий внесок авторів проекту:

O. Olikh: постановка задачі, участь у проведенні теоретичних розрахунків, аналіз, інтерпретація і обговорення отриманих результатів, графічна візуалізація отриманих даних, участь у підготовці тексту рукопису статті.

V. Kostylyov - участь у проведенні теоретичних розрахунків, аналіз, інтерпретація і обговорення отриманих результатів, участь у підготовці тексту рукопису статті.

V. Vlasiuk – планування і проведення експериментів, систематизація експериментальних даних, участь у обговоренні отриманих результатів, участь у підготовці рукопису статті.

R. Korkishko - планування і проведення експериментів, участь у обговоренні отриманих результатів, участь у обговоренні рукопису статті.

17. Experimental investigation and theoretical modeling of textured silicon solar cells with rear metallization / A.V. Sachenko, V.P. Kostylyov, R.M. Korkishko et al. // Journal of Photonics for Energy - публікація знаходиться на стадії рецензування.

Квартиль журналу – Q2

(<https://www.scimagojr.com/journalsearch.php?q=21100206268&tip=sid&clean=0>).

Особистий внесок авторів проекту:

V.P. Kostylyov - постановка задачі, участь у проведенні теоретичних розрахунків, аналіз, інтерпретація і обговорення отриманих результатів, участь

у підготовці тексту рукопису статті.

V.M. Vlasiuk – планування і проведення експериментів, обробка і систематизація експериментальних даних з спектрів зовнішнього квантового виходу, участь у обговоренні отриманих результатів.

R.M. Korkishko - планування і проведення експериментів, обробка і систематизація експериментальних даних з світлових вольт-амперних характеристик СЕ, участь у обговоренні отриманих результатів.

O.Ya. Olikh – узагальнення отриманих даних, участь у інтерпретації і обговоренні отриманих результатів, участь у обговоренні рукопису статті.