

УДК 539.12;537.8
УКПП 72.19.13-00.00
№ держреєстрації 0120U105440
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 О.І. Жилінська
«15» грудня 2020 р.



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)

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

О.Я. Оліх

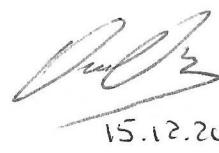
15.12.2020

2020

Результати роботи розглянуто Науково-технічною радою Київського
національного університету імені Тараса Шевченка,
протокол № 9 від 10. 12. 2020 р.

СПИСОК АВТОРІВ

Науковий керівник,
доцент, докт. фіз.-мат. наук,
доцент



15.12.2020

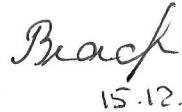
О.Я. Оліх
(вступ, висновки,
реферат, розділ 1,
підрозділи 2.1, 2.2)

Завідувач лабораторії,
докт. фіз.-мат. наук,
професор



15.12.2020 (підрозділи 2.3, 2.4; Інститут
фізики напівпровідників
ім. В.С. Лашкарьова
НАН України)

Наук. співроб.,
канд. фіз.-мат. наук



15.12.2020

Б.М. Власюк
(підрозділи 2.1, 2.3; Інститут
фізики напівпровідників
ім. В.Є. Лашкарьова
НАН України)

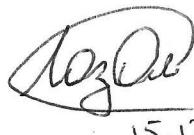
Наук. співроб.,
канд. техн. наук



15.12.2020

Р.М. Коркішко
(підрозділи 2.3, 2.4; Інститут
фізики напівпровідників
ім. В.Є. Лашкарьова
НАН України)

Аспірант



15.12.2020

О.В. Лозицький
(підрозділ 1.2)

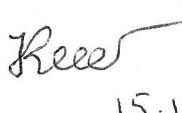
Аспірант



15.12.2020

К.О. Майко
(підрозділ 1.1)

Студент



15.12.2020

А.Р. Костина
(підрозділ 2.1)

РЕФЕРАТ

Звіт про виконання наукового дослідження і розробки за рахунок грантової підтримки: 63 с., 17 рис., 9 табл., 1 додаток, 34 джерела.

ВОЛЬТ-АМПЕРНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ, КРЕМНІЙ, ПЕРЕБУДОВА ДЕФЕКТІВ, РЕКОМБІНАЦІЙНІ ЦЕНТРИ, СОНЯЧНІ ЕЛЕМЕНТИ, ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ

Об'єкт дослідження: процеси перенесення заряду в кремнієвих сонячних елементах з різним станом дефектів, пов'язаних з атомами заліза

Мета роботи: отримання масиву вольт-амперних характеристик $n^+ \text{-} p \text{-} p^+$ структур з різними параметрами, які в подальшому будуть використані для налаштування та тренування нейронної мережі, орієнтованої на оцінку концентрації електрично-активних центрів; відпрацювання методики вимірювання кінетики світлоіндукованих процесів у кремнієвих сонячних елементах.

Методи дослідження: моделювання вольт-амперних характеристик, вимірювання вольт-амперних характеристик та спектрів внутрішнього квантового виходу.

Відповідно до розробленої розрахункової моделі кремнієвої $n^+ \text{-} p \text{-} p^+$ структури проведено моделювання більше 40 тис. вольт-амперних характеристик систем з різною товщиною бази ($150 \div 240$ мкм) та ступенем її легування ($10^{15} \div 10^{17}$ см $^{-3}$) при варіації концентрації домішкового заліза в інтервалі $10^{10} \div 10^{13}$ см $^{-3}$ для температурного діапазону $290 \div 340$ К; при цьому враховано можливість перебування домішкових атомів заліза у міжвузольному стані та у складі пари FeB. Запропоновано методику вимірювання кінетики світлоіндукованих процесів в кремнієвих сонячних елементах, яка базується на послідовному освітленні зразків та вимірюванні зміни амплітуди фотовідгуку на монохроматичний сигнал з довжиною хвилі $900 \div 980$ нм при малому рівні збудження. Показано, що особливості кінетики струму короткого замикання (закон зміни, залежності абсолютних змін від тривалості інтенсивного освітлення та характерного часу від температури) співпадають з відомими закономірностями перебудови дефектних комплексів, що містять міжвузольне залізо та заміщаючий атом бору.

ЗМІСТ

| | |
|--|----|
| Скорочення..... | 6 |
| Вступ..... | 7 |
| 1 Моделювання вольт-амперних характеристик кремнієвих $n^+ - p - p^+$ структур..... | 10 |
| 1.1 Основні характеристики розрахункової моделі кремнієвої $n^+ - p - p^+$ структури | 10 |
| 1.2 Отримання масиву вольт-амперних характеристик кремнієвих $n^+ - p - p^+$ структур з різними товщиною, ступенем легування та концентрацією домішки..... | 17 |
| 1.3 Основні результати розділу 1..... | 27 |
| 2 Тестові вимірювання кінетики світлоіндукованих процесів у кремнієвих сонячних елементах..... | 28 |
| 2.1 Експериментальні стенди та тестові зразки | 28 |
| 2.2 Розроблення методики вимірювання кінетики світлоіндукованих процесів у КСЕ | 34 |
| 2.3 Світлоіндуковані зміни вольт-амперних характеристик КСЕ та зміни внаслідок термообробки | 38 |
| 2.4 Підбір кремнієвих сонячних елементів | 46 |
| 2.5 Основні результати розділу 2..... | 49 |
| Висновки..... | 50 |
| Перелік джерел посилання..... | 51 |
| Додаток А Копія статті, підготовленої за період виконання наукового дослідження і розробки | 55 |

СКОРОЧЕННЯ

| | | |
|------|---|--|
| ВАХ | — | Вольт-амперні характеристики |
| КСЕ | — | кремнієвий сонячний елемент |
| ПЗП | — | поле задньої поверхні |
| ШРХ | — | Шоклі-Ріда-Хола |
| DLTS | — | deep level transient spectroscopy, метод спектроскопії глибоких рівнів |
| DUT | — | device under test, пристрій, що досліджується |
| LED | — | light emission diod, світловипромінюючий діод |

ВСТУП

На сьогодні сонячна фотовольтаїка характеризується найшвидшими темпами зростанням серед усіх технологій у світі, спрямованих на використання відновлюваних джерел енергії. При цьому практичне використання даного способу створення енергії переважно реалізується за допомогою кремнієвих сонячних елементів (КСЕ). Задля здешевлення кінцевої продукції, для створення використовуються кристали достатньо невисокої чистоти, причому однією з найпоширеніших і водночас з найшкідливіших домішок, є атоми заліза та інших перехідних металів. Питання щодо з'ясування поведінки дефектів та реалізації можливості їхнього керованого переведення у електрично-неактивний стан мають фундаментальне значення для покращення експлуатаційних характеристик пристройів.

Наукові дослідження, спрямовані зменшення рекомбінаційної активності дефектів у робочій області сонячних елементів активно розвиваються протягом останніх років. Зокрема, ученими Національної лабораторії відновлювальної енергетики (Колорадо, США) показано, що при цьому може бути використано створення додаткових дефектів з глибокими рівнями (Я. Ліу, П. Стредінс, С.-Н. Вей). Вказано, що підвищення ефективності фотоперетворення КСЕ може бути досягнуто при використання додаткового легування атомами нікелю (Ташкентський державний технічний університет, Узбекистан, М.К. Бахадирханов, С.Б. Ісамов, З.Т. Кенжаев, С.В. Ковешніков). Проводяться 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) та заліза (Я. Шмідт, Інститут досліджень сонячної енергетики, Хамелн, Німеччина). У роботах вказаних авторів підкреслено, що ці атоми суттєво впливають на робочі параметри КСЕ. З іншого боку, дослідження С. Остапенка та Р.Бела (Центр мікроелектронних досліджень, Тампа, США) показали, що ультразвук

може бути причиною перебудови дефектних комплексів, пов'язаних з домішкових залізом. Водночас акустостимульовані процеси під час динамічної перебудови дефектів у КСЕ залишаються поза увагою, хоча використання пружних коливань як додаткового чинника та певного фактору коригування комплексних процесів під час виготовлення сонячних елементів виглядає достатньо перспективним.

Інша частина Проєкту має на меті розробити фізичні засади неруйнівного методу оцінки концентрації домішок у напівпровідниковых структурах, зокрема в КСЕ, на основі вимірювання вольт-амперних характеристик (ВАХ) та наступного використання штучної нейронної мережі. Методи штучного інтелекту все ширше використовуються у фізичних дослідженнях. Наприклад, мова йде про застосування глибокого навчання до визначення різноманітних параметрів матеріалів (А. Джайн, Стенфордський університет, США; Б.Лі, К. Лі, Х.-П. Жао, Університет Цінхуа, Китай), вивчення радіаційних дефектів (Д. Бігмастар, А. Хамедані, Університет Гельсінкі, Фінляндія), моделювання структури аморфного кремнію (М. Комін, Л.Д. Левіс, Монреальський університет, Канада). Використовуються штучні нейронні мережі і для передбачення поведінки сонячних елементів – зокрема подібні дослідження знайшли своє відображення в роботах С. Родригес, Х. Рамос (Університет Ліссабону, Португалія) та В. Венугопала, Ю. Сан, А.Р. Брандта (Стенфордський університет, США). Новизна запропонованого підходу пов'язана з використання величини фактору неідеальності як кількісного показника концентрації рекомбінаційних центрів та застосування методів глибокого навчання для встановлення взаємозв'язку вказаних величин.

Технічне завдання виконання проекту із виконання наукових досліджень і розробок 2020.02/0036 «Розробка фізичних зasad акусто-керованої модифікації та машинно-орієнтованої характеризації кремнієвих сонячних елементів» (№ 20ДФ051-10) передбачає, що цілями етапу №1 є проведення підготовки до розрахунків та вимірювань, отримання масиву даних для вольт-

амперних характеристик n^+-p-p^+ структур з різними параметрами; відпрацювання методики вимірювання кінетики світлоіндукованих процесів в кремнієвих сонячних елементах. При цьому основними завданнями є розробка розрахункової моделі кремнієвої n^+-p-p^+ структури для симулятора сонячних елементів SCAPS 3.3.08 за реальними величинами і температурними залежностями параметрів кремнію та рекомбінаційних центрів, отриманими в результаті аналізу літературних джерел, розробка програмного забезпечення для автоматичного створення моделей з різними параметрами; підбір КСЕ з базою, легованою бором, та високою концентрацією домішкового заліза; створення програмного забезпечення для парсингу файлів, які є результатом роботи SCAPS; проведення розрахунків вольт-амперних характеристик для кремнієвих n^+-p-p^+ структур з різною товщиною (150-240 мкм) та ступенем легування ($10^{15} \div 10^{17}$ см⁻³) бази при варіації концентрації домішки в інтервалі $10^{10} \div 10^{13}$ см⁻³ для температурного діапазону 290-340 К; відпрацювання режимів вимірювання кінетики світлоіндукованих процесів в КСЕ; підготовка статті у фаховий журнал. Розраховані ВАХ в подальшому будуть використані для отримання розмічених даних, які, в свою чергу, будуть використані для налаштування та тренування нейронної мережі та розробки експрес-методу оцінки концентрації електрично-активних центрів у кремнієвих бар'єрних структурах на основі вимірювання вольт-амперних характеристик. Іншою метою Проекту в цілому є розробка фізичних зasad методу акустостимульованої деактивації дефектів, пов'язаних з атомами перехідних металів, у монокристалічних КСЕ. Відпрацювання режимів вимірювання процесів перебудови відповідних дефектів під дією світла чи інших факторів є основою для подальших експериментальних досліджень вказаних процесів.

1 МОДЕЛЮВАННЯ ВОЛЬТ-АМПЕРНИХ ХАРАКТЕРИСТИК КРЕМНІЄВИХ n^+ - p - p^+ СТРУКТУР

1.1 Основні характеристики розрахункової моделі кремнієвої n^+ - p - p^+ структури

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

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

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

цілком справедливе для діапазону температур, що розглядався в роботі.

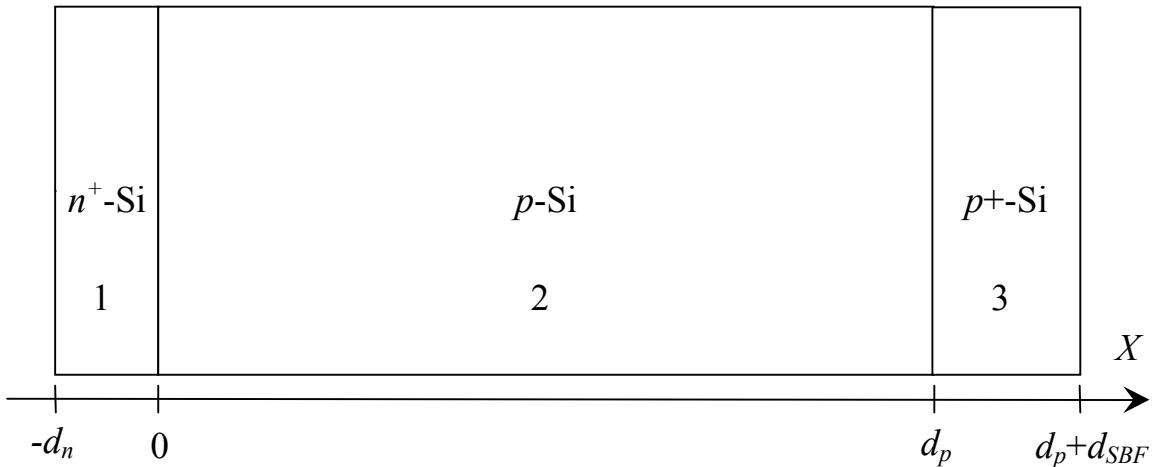


Рисунок 1.1 – Геометрія структури, використаної у розрахунковій моделі. 1 – емітер, 2 – база, 3 – шар ПЗП

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

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

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

де

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

T – температура, К,

$\alpha = 3,23 \cdot 10^{-4}$ еВ/К,

$\Theta = 446$ К,

$\Delta = 0,51$.

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

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

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

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

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

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

де

m_0 - маса вільного електрона.

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

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

де

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

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

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

$$\left(\frac{m_{dC}^*}{m_0} \right)^{1.5} = 1,094 - 1,312 \cdot 10^{-5} T + 6,753 \cdot 10^{-7} T^2 - 4,609 \cdot 10^{-10} T^3, \quad (1.6)$$

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

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

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

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

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

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

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

де

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

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

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

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

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

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

де

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

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

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

де

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

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

N_{def} – концентрація дефектів, м⁻³,

σ_n та σ_p – поперечні перерізи захоплення дефектом електронів та дірок, відповідно, м²;

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

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

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

При розрахунках вважалося, що поверхнева швидкість рекомбінації однаакова на обох поверхнях і дорівнює 10³ см/с.

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

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

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

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

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

де

E_F – положення рівня Фермі.

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

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

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

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

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

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

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

де

$E_b = 0,582$ eВ – енергія зв’язку пари.

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

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

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

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

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

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

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

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

- можливість задавати товщину та рівень легування для кожного з шарів

$n^+ - p - p^+$ структури;

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

заряду залежно від температури відповідно до (1.8).

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

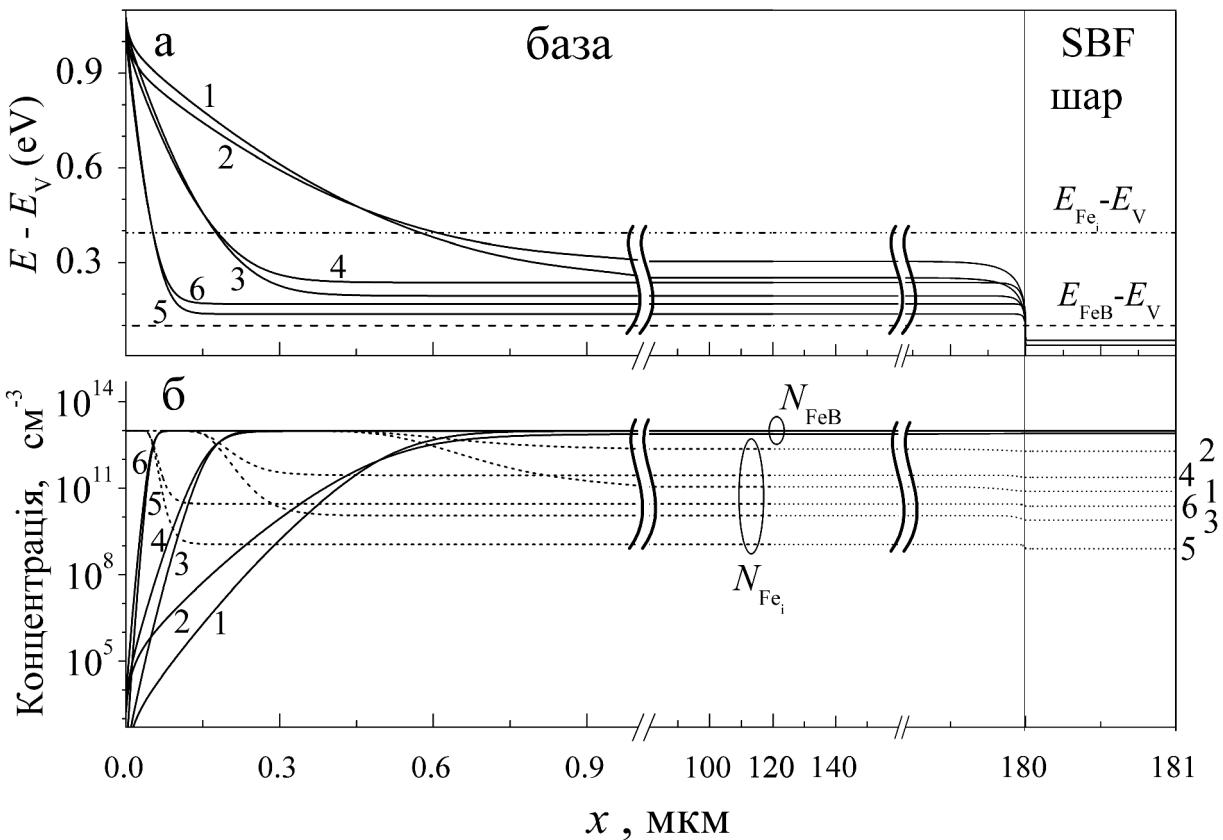
Як видно з формули (1.20), у випадку співіснування міжвузольних атомів заліза та пар Fe_iB_s, співвідношення їхніх концентрацій залежить від положення рівня Фермі. Тому для такого випадку спочатку за допомогою програмного пакету SCAPS розраховувалося положення рівня Фермі у структурі без дефектів (масиви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

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

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

В роботі проводилося моделювання прямої гілки вольт-амперної

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



Рисинок 1.2 - Розраховані залежності для бази та ПЗП шару положення рівня Фермі (а, суцільні лінії), концентрації міжузольних атомів заліза (б, суцільні лінії) та пар Fe_iB_s (б, пунктир) при нульовому зміщенні. N_A , 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). $N_{Fe} = 10^{13}$ см^{-3} . $d_p = 180$ мкм. В частині (а) також показані положення донорних рівнів, пов'язаних з міжузольним залізом (штрих-пунктирна лінія) та парою Fe_iB_s (пунктир)

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

розділити на декілька наборів.

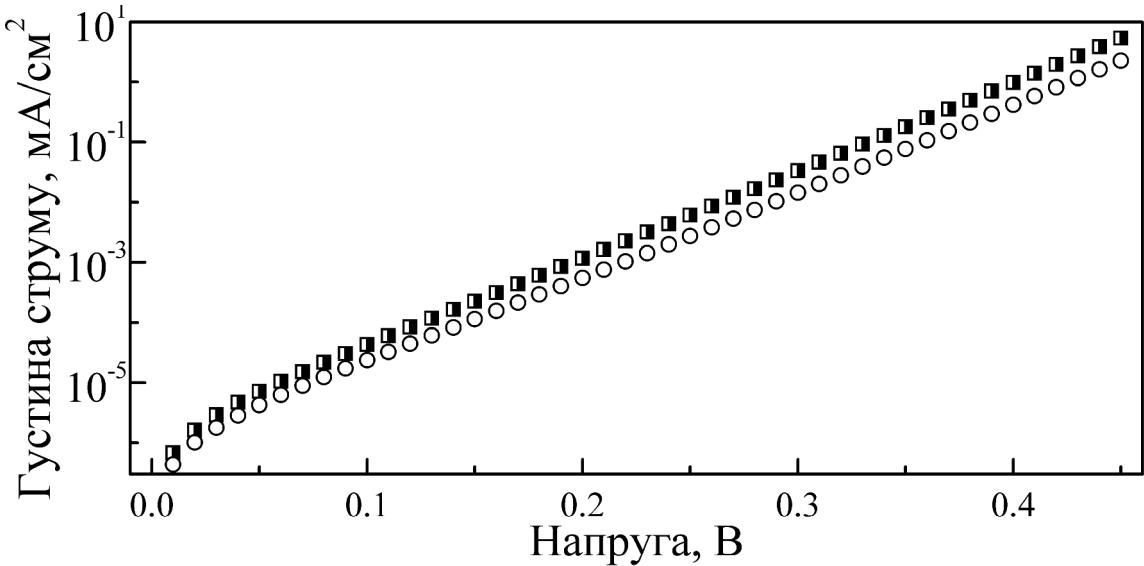


Рисунок 1.3 – Модельовані вольт-амперні характеристики кремнієвої n^+-p-p^+ структури за наявності лише неспарених міжузольних атомів заліза (кола) та одночасної присутності пар Fe_iB_s та Fe_i (квадрати). $N_A = 10^{17} \text{ см}^{-3}$, $N_{Fe} = 10^{13} \text{ см}^{-3}$, $T = 340 \text{ K}$, $d_p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

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

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

Таблиця 1.1 – Параметри структур $n^+ \text{-} p \text{-} p^+$, що використовувалися при моделюванні ВАХ основного набору

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

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

Інші набори ВАХ призначені для перевірки ефективності роботи

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

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

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

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

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

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

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

Кінець таблиці 1.4.

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

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

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

Кінець таблиці 1.5.

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

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

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

Кінець таблиці 1.6.

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

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

1.3 Основні результати розділу 1

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

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

2 ТЕСТОВІ ВИМІРЮВАННЯ КІНЕТИКИ СВІТЛОІНДУКОВАНИХ ПРОЦЕСІВ У КРЕМНІЄВИХ СОНЯЧНИХ ЕЛЕМЕНТАХ

2.1 Експериментальні стенди та тестові зразки

Одним із завдань проєкту є дослідження впливу ультразвукового навантаження на кінетику перебудови дефектних комплексів у КСЕ. Самі процеси перебудови можуть бути ініційовані, зокрема, високо інтенсивним освітленням. Зміну стану дефектів передбачається детектувати за змінами параметрів вольт-амперних характеристик КСЕ і тому одним із завдань даного етапу було створення експериментальних стендів для вимірювання кінетичних перетворень ВАХ.

При виконанні проєкту передбачається використати декілька стендів. Один з них, схема якого представлена на рис.2.1, був зібраний на фізичному факультеті Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Досліджуваний сонячний елемент (DUT, device under testing) розміщувався в термостаті. Регулятор температури термостату побудовано з використанням елементів Пельт'є, які живляться від керованого за SPI-протоколом джерела струму D30-06. Вимірювання температури DUT відбувається за допомогою цифрового датчика STS-21. Основними причинами вибору саме цього датчика були невеликий розмір (3 мм x 3 мм x 1 мм), висока роздільна здатність вимірювання температури ($0,01^{\circ}\text{C}$) та здатність програмованого переходу у режим низького енергоспоживання. Останнє дозволяє знизити електричні завади від розміщеного на сонячному елементі датчика при вимірюванні вольт-амперних характеристик первого. Датчик підтримує I2C інтерфейс. Керування температурою термостату здійснюється з використанням програмно реалізованого пропорційно-інтегрально-диференційного контролера, що

дозволяє підтримувати необхідну температуру зразка в діапазоні 280÷360 К з точністю до 0,05 К.

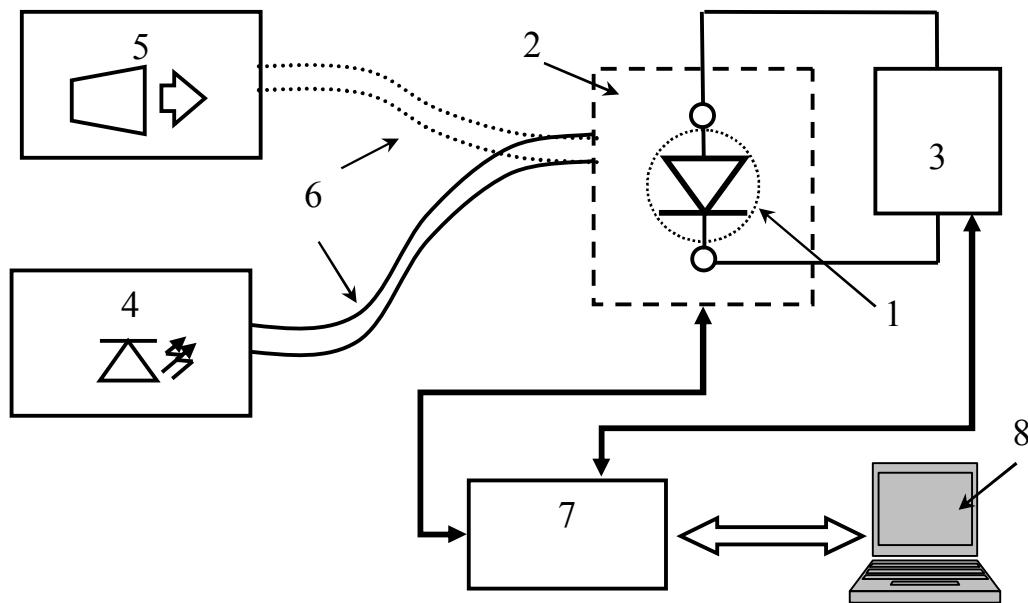


Рисунок 2.1 – Схема експериментального стенду. 1 – DUT, 2 – термостат, 3 – блок вимірювання ВАХ, 4 – джерело світла малої інтенсивності, 5 – джерело світла високої інтенсивності, 6 – світловод, 7 – комутатор сигналів, 8 – персональний комп’ютер

Схема блоку вимірювання вольт-амперних характеристик наведена на рис.2.2. Використана схема зворотного зв’язку дозволяла компенсувати падіння напруги на вимірювачі струму.

У якості джерела напруги використовувався блок на основі 16-розрядного цифроаналогово-перетворювача AD5752R, керованого по протоколу SPI. Для вимірювання струму використовувався мультиметр В7-21А або блок на базі монітора струму та потужності INA226 (16 розрядів, підтримка протоколу I2C), для вимірювання напруги – вольтметр В7-21 або блок на основі аналогово-цифрового перетворювача ADS115 (16 розрядів, інтерфейс I2C). Для пристрійв серії В7-21 організовано автоматичне зчитування показань з використанням інтерфейсу SPI.

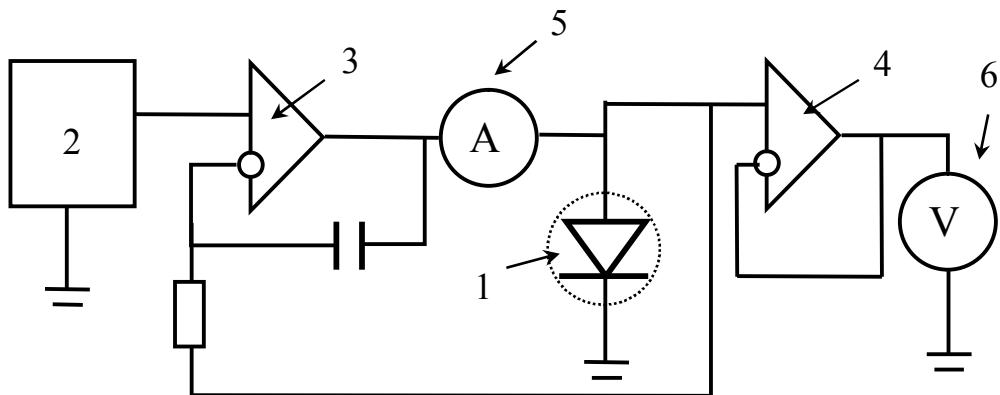


Рисунок 2.2 – Схема блоку вимірювання ВАХ. 1 – DUT, 2 – джерело напруги, 3, 4 – операційні підсилювачі, 5 – вимірювач струму, 6 – вимірювач напруги

Як видно з рис.2.1, у стенді використовується два джерела світла. Одне, низькоінтенсивне, призначене для оцінки ефективності фотоелектричного перетворення шляхом вимірювання освітлених ВАХ. У якості джерела вибрано світловипромінюючий діод HLX-P8B1WPWC-02D, теплова температура якого, згідно з паспортними даними (<https://www.rcscomponents.kiev.ua/datasheets/HLX1W.jpg>), становить величину 5000-7000 К. У зв'язку з необхідністю вимірювання вольт-амперних характеристик протягом тривалих інтервалів часу (порядку десятка годин, що відповідає характерним часам перебудови пар залізо-бор у кремнієвих сонячних елементах при кімнатній температурі) особлива увага була приділена забезпеченню стабільності освітлення. Відомо, що інтенсивність випромінювання LED (light emission diod) у першу чергу визначається температурою та струмом, що проходить через нього. Задля забезпечення сталості температури використовувалася система резистивного нагріву джерела світла на основі термостату W1209. Точність виміру температури датчиком термостату складає 0,1°C в діапазоні від -9,9°C до 99,9°C, що дозволило підтримувати температуру HLX-P8B1WPWC-02D у вказаному діапазоні з точністю $\pm 0,3^{\circ}\text{C}$.

Для стабілізації струму живлення була застосована схема, зображена на

рис.2.3. Як наслідок, вдалося досягти а) постійності струму через світловипромінюючий діод з точністю до 0,5%; б) можливості формування необхідної часової залежності інтенсивності випромінювання шляхом зміни сигналу цифро-аналогового перетворювача. У якості останнього була використана плата ET1255. Проведено калібрування системи: в діапазоні струму I_{LED} від 3 до 350 мА співвідношення з керуючим сигналом $U_{ЦАП}$ має вигляд I_{LED} (mA) = $-1,25 + 253,9 U_{ЦАП}$ (В).

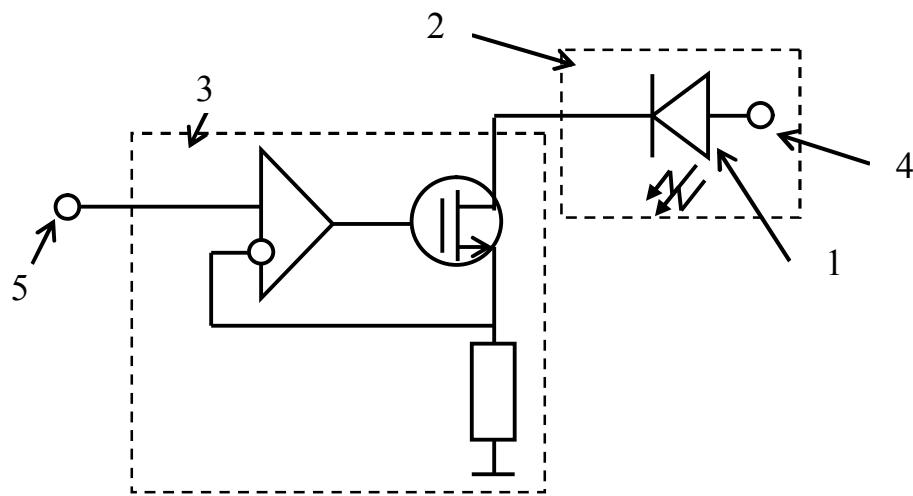


Рисунок 2.3 – Схема джерела світла низької інтенсивності.

1 – LED (HLX-P8B1WPWC-02D), 2 – блок стабілізації температури, 3 – блок стабілізації струму живлення, 4 – живлення діоду (12 В), 5 – сигнал з цифро-аналогового перетворювача

Друге джерело світла, високо інтенсивне, призначене для дисоціації дефектних комплексів, пов'язаних з залізом. З літератури [26,27] відомо, що подібний результат може бути досягнутий з використанням галогенових джерел світла. У описаному стенді, випромінюючим елементом є галогенова лампа потужністю 200 Вт. Блок розроблений з врахуванням високих температур нагріву (порядку 150°C) лампи під час роботи.

У зв'язку з необхідністю швидких змін джерела освітлення сонячного елементу (низькоінтенсивне з використанням HLX-P8B1WPWC-02D для

вимірювання світлових вольт-амперних характеристик та високоінтенсивне, на основі галогенової лампи) був розроблений спеціальний блок з використанням оптоволоконного світловоду.

Комутиуючий блок, в якому реалізована підтримка різноманітних інтерфейсів розроблено з використанням мікроконтролерної плати Arduino Mega 2560. Персональний комп'ютер використовується для керування різноманітними елементами стенду та для збереження результатів вимірювань.

Також вимірювання світлових ВАХ та спектральних залежностей проводились на установці фототехнічних випробувань КСЕ і на установці для визначення відносних спектральних характеристик фотоперетворювачів в атестованому уповноваженими органами Держспоживстандарту України Центрі випробувань фотоперетворювачів та батарей фотоелектричних Інституту фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України.

Принципова схема установки для вимірювання спектральних характеристик фотоперетворювачів представлена на рисунку 3. Світло від галогенової лампи 1, пройшовши монохроматор 2, роздільник пучка світла і систему фокусування 3 спрямовується з частотою модуляції 20 Гц по черзі на еталонний фотоприймач 4 та на досліджуваний зразок 5. Сигнал з еталонного фотоприймача підсилюється системою реєстрації, оброблюється комп'ютером і подається у вигляді сигналу зворотного зв'язку на регульоване джерело живлення галогенової лампи. В залежності від математичної обробки сигналу зворотного зв'язку установка працює в режимі підтримки постійної світлової потужності (вимірюється ампер-ватна чутливість), або режимі підтримки постійного потоку фотонів (вимірюється зовнішня квантова ефективність) на досліджуваному зразку.

Відпрацювання режимів вимірювання світло індукованих кінетичних змін у КСЕ проводилося на зразках дифузійно-польового типу з геометричними розмірами $1,52 \text{ см} \times 1,52 \text{ см}$, що мають структуру $n^+ - p - p^+$ та виготовлені на основі монокристалічних пластин p -типу кремнію марки КДБ-

10 з питомим опором порядку $10 \text{ Ом}\cdot\text{см}$.

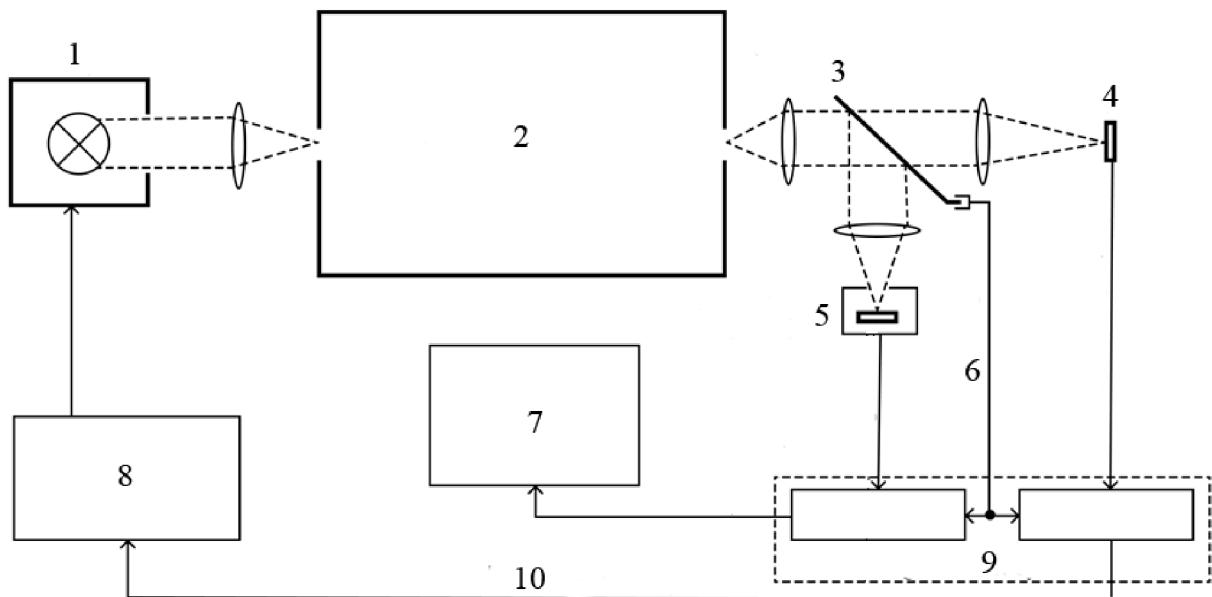


Рисунок 2.4 – Схема установки для вимірювання спектральних характеристик фотоперетворювачів. 1 – галогенова лампа; 2 – монохроматор; 3 – подільник пучка світла із системою фокусування; 4 – еталон; 5 – досліджуваний зразок; 6 – опорний сигнал; 7 – комп’ютер; 8 – блок живлення із системою зворотнього зв’язку; 9 – система реєстрації; 10 – сигнал зворотного зв’язку

Процес виготовлення КСЕ включав дифузію фосфору на фронтальну фотоприймальну поверхню для створення розділяючого бар’єра ($n^+ \text{-} p$ – перехода) та дифузію бору на тильну поверхню для формування ізотипного p - p^+ - бар’єра. Електричні контакти формувалися нанесенням суцільного шару алюмінію на тильну поверхню і шару у вигляді сітки – на фронтальну фотоприймальну поверхню. На фронтальній поверхні КСЕ мали просвітлюючі покриття з двоокису кремнію SiO_2 товщиною 30 нм і нітриду кремнію Si_3N_4 товщиною 40 нм.

2.2 Розроблення методики вимірювання кінетики світлоіндукованих процесів у КСЕ

Для розроблення методики було вивчено літературні джерела з досліджень світлоіндукованих процесів, обумовлених трансформацією структурно-домішкових станів, зокрема заліза і пар бор-кисень у кремнії та проведено їх аналіз.

Вперше методику визначення концентрації заліза в кремнії було запропоновано в роботі [28]. Авторами із застосуванням методу спектроскопії глибоких рівнів (DLTS) було показано, що при термічній обробці кремнію в темряві при температурі 210°C протягом 3 хвилин відбувається розпад пар FeB та перехід заліза у міжузольний стан Fe_i . При цьому змінюються параметри рекомбінаційного центру, обумовленого залізом. Для фіксації цих змін було запропоновано використовувати вимірювання довжини дифузії надлишкових носіїв струму методом спектральних залежностей поверхневої фотонапруги. Методику було прокалібровано за спектрами DLTS і отримано формулу для розрахунку концентрації заліза в кремнії:

$$N_{Fe} = \frac{D_n}{f} \cdot \left(\frac{1}{L_1^2} - \frac{1}{L_0^2} \right) \Bigg/ \left\{ [C_n(Fe_i)] - \frac{C_n(FeB)}{\exp[(E_{Fe} - 0.1)/k_B T]} \right\}, \quad (2.1)$$

де

D_n - коефіцієнт дифузії електронів при кімнатній температурі,

L_0, L_1 - довжини дифузії надлишкових носіїв струму до та після відпалу, відповідно,

$C_n(Fe_i), C_n(FeB)$ - коефіцієнти захоплення електронів Fe_i та FeB, відповідно,

f – коефіцієнт, який враховує неповну дисоціацію пар FeB.

Формула (2.1) є досі актуальною і використовується як при проведенні досліджень заліза в кремнії, так і в промисловості, зокрема реалізована в устаткуванні Semilab SDI PV-2000 instrument у вигляді

$$N_{Fe} = 1,06 \cdot 10^{16} \left(\frac{1}{L_1^2} - \frac{1}{L_0^2} \right), \quad (2.2)$$

де

розмірність коефіцієнту $1,06 \cdot 10^{16}$ – мкм²·см⁻³, а довжин дифузії надлишкових носіїв струму – мкм.

Згодом з'явилися роботи, де було запропоновано використовувати для розвалювання пар FeB світло з енергією кванта, що перевищує ширину забороненої зони кремнію (1,124 еВ) [29], а також комбінацію світло + термічний відпал [30]. Така комбінована обробка дозволяє дискримінувати внески в зміни часу життя КСЕ від трансформації центрів заліза і активації-деактивації пар бор-кисень. Нижче наведено таблицю 2.1, де представлено вплив різних комбінацій світло-термообробка на світло-індуковані процеси в кремнії, відповідно до роботи [31].

Для розроблення методики дослідження кінетики світлоіндукованих процесів в КСЕ і пластинах кремнію ми виконали теоретичні розрахунки залежностей ефективного часу життя нерівноважних носіїв струму від рівня збудження, зокрема, за рахунок фото генерації. Час життя ШРХ розраховувався з а відомою формулою:

$$\tau_{SRH}^p \equiv \frac{\tau_{p0}(n_1 + \Delta n) + \tau_{n0}(N_A + p_1 + \Delta n)}{(N_A + \Delta n)}, \quad (2.3)$$

де

τ_{SRH}^p – час життя ШРХ в базі p -типу,

$$\tau_{p0} = (1.19 \cdot 10^{-9} N_t)^{-1}, \quad \tau_{n0} = (8.5 \cdot 10^{-7} N_t)^{-1},$$

N_t – концентрація рекомбінаційних центрів,

n_1 та p_1 задаються виразами (1.14),

$\Delta n = \Delta p$ – концентрації надлишкових нерівноважних електронів и дірок, тобто рівень збудження.

Таблиця 2.1 – Вплив різних комбінацій світло-термообробка на світло-індуковані процеси в кремнії [31]

| Режими обробок | | | Ефект |
|---|--------------------------|-------------------------|--|
| Температура | Світло | Час | |
| Відпали | | | |
| $\geq 200^{\circ}\text{C}$ | немає | $\geq 2\text{ хв}$ | $\text{Fe}_i\text{B} \rightarrow \text{Fe}_i + \text{B}$ |
| | | | $\text{BO}_{2i} \rightarrow \text{B} + \text{O}_{2i}$ |
| Відновлення FeB | | | |
| 90°C | немає | $\geq 3\text{ хв}$ | $\text{Fe}_i + \text{B} \rightarrow \text{Fe}_i\text{B}$ |
| | | | Стан В сталій |
| Активація світло-індукованої деградації | | | |
| 120°C | 1 Сонце | $\geq 5\text{ хв.}$ | $\text{Fe}_i\text{B} \rightarrow \text{Fe}_i + \text{B}$ |
| | | | $\text{B} + \text{O}_{2i} \rightarrow \text{BO}_{2i}$ |
| Активація заліза | | | |
| 25°C | 1 Сонце, спалах (10x) | $10 \times 10\text{ с}$ | $\text{Fe}_i\text{B} \rightarrow \text{Fe}_i + \text{B}$ |
| | | | Стан В сталій |

Результати проведених розрахунків при варіюванні рівня легування і концентрації рекомбінаційних центрів заліза наведено на рисунку 2.5. Можна бачити, що із збільшенням рівня збудження час життя ШРХ для Fe_i (криві 1 і 2) швидко зростає, в той час як для FeB – залишається постійним, або слабко зменшується (криві 3 і 4). Тому вимірювання концентрації заліза в базі КСЕ на основі кремнію p -типу провідності потрібно вимірювати при рівні збудження (концентрації надлишкових нерівноважних електронів и дірок), що не перевищує $\Delta n = 10^{12} \text{ см}^{-3}$. Такі рівні фотогенерації забезпечує, зокрема, методика визначення довжини дифузії надлишкових нерівноважних носіїв заряду із спектральних залежностей фотоструму (квантової ефективності) КСЕ.

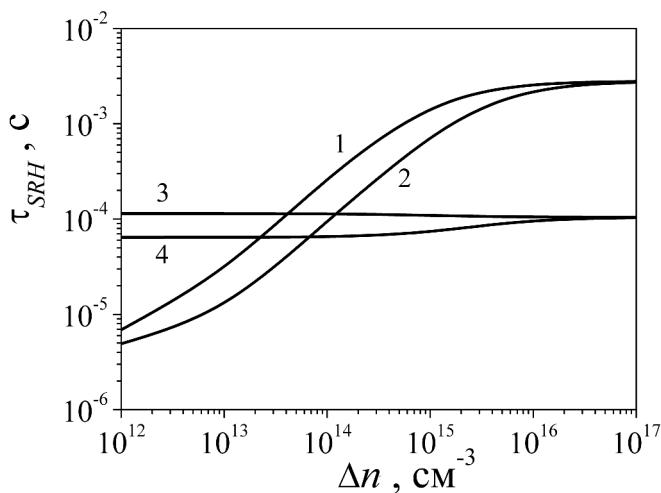


Рисунок 2.5 – Залежності часів життя ШРХ в базі КСЕ від рівня збудження, обумовлених Fe_i (1,2) і FeB (3,4). Концентрація рекомбінаційних центрів заліза $N_t = 3 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3}$, рівень легування (бор) $N_A = 10^{15}$ (1, 3) та $3 \cdot 10^{15}$ (2,4). $T = 300 \text{ K}$

Таким чином, для вимірювання кінетики світлоіндукованих процесів в КСЕ при виконанні проекту пропонується використовувати відпали 200°C протягом 2 хв та при 90°C протягом 3 хв. для відновлення максимального часу життя у КСЕ. При таких обробках відбувається зв'язування заліза у пари FeB і деактивація В-О. Далі вимірюється довжина дифузії надлишкових носіїв струму L_0 . Після проведення активних обробок, зокрема, ультразвукових навантажень і т.п. знов вимірюється довжина дифузії надлишкових носіїв струму L і визначається зміна концентрації заліза в певному стані за формулою (2.2).

Кінетику світло-індукованих процесів в КСЕ пропонується вимірювати при послідовному освітленні зразків лампою-спалахом і вимірюванні зміни амплітуди фотовідгуку на монохроматичний сигнал з довжиною хвилі 900-980 нм на малому сигналі ($\Delta n \approx 5 \cdot 10^{11} - 10^{12} \text{ см}^{-3}$), оскільки як уже згадувалося, із збільшенням рівня збудження час життя ШРХ для швидко зростає, в той час як для FeB – залишається постійним, або слабко зменшується. При освітленні імпульсом лампи-спалаху будуть призводити до послідовного розпаду пар FeB

і утворенні Fei. Внаслідок цієї перебудови дефектної структури буде зменшуватись ефективний час життя τ_{SRH} , (або довжина дифузії надлишкових носіїв струму $L = (D \cdot \tau_{SRH})^{0,5}$, де D – коефіцієнт дифузії неосновних носіїв), що буде виявлятися у зменшенні нахилу спектральної залежності і відповідному зменшенні рівня сигналу на довжині хвилі 900-980 нм.

2.3 Світлоіндуковані зміни вольт-амперних характеристик кремнієвих сонячних елементів та зміни внаслідок термообробки

Під час виконання завдань проєкту проводилися вимірювання прямих гілок ВАХ кремнієвих $n^+ - p - p^+$ структур, детальніше описаних у підрозділі 2.1. Проводилися вимірювання як у темряві, так і при освітленні після дії інтенсивного світлового потоку протягом 60-300 с. Приклади отриманих ВАХ наведено на рис.2.4. Зауважимо, що темнова ВАХ представлена вся, тоді як для світлової наведено дані лише з четвертого квадранту. Залежності апроксимувалися відповідно до дводіодної моделі [32]:

$$I = I_{01} \left[\exp\left(\frac{q(V - IR_S)}{kT}\right) - 1 \right] + I_{02} \left[\exp\left(\frac{q(V - IR_S)}{nkT}\right) - 1 \right] + \frac{(V - IR_S)}{R_{SH}} - I_{ph}, \quad (2.4)$$

де

I – струм через КСЕ, А;

V – напруга, прикладена до нього, В;

I_{01} та I_{02} – струми насичення, пов’язані з процесами рекомбінації у квазінейтральній області та в області просторового заряду, відповідно, А;

n – фактор неідеальності;

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

I_{ph} – фотострум, який для темнових ВАХ дорівнює нулеві.

Зазначимо, що величина фактору неідеальності для досліджених зразків достатньо велика ($3,5 \div 7$ залежно від зразка та температури), що свідчить про значний внесок дефектів у рекомбінаційні процеси.

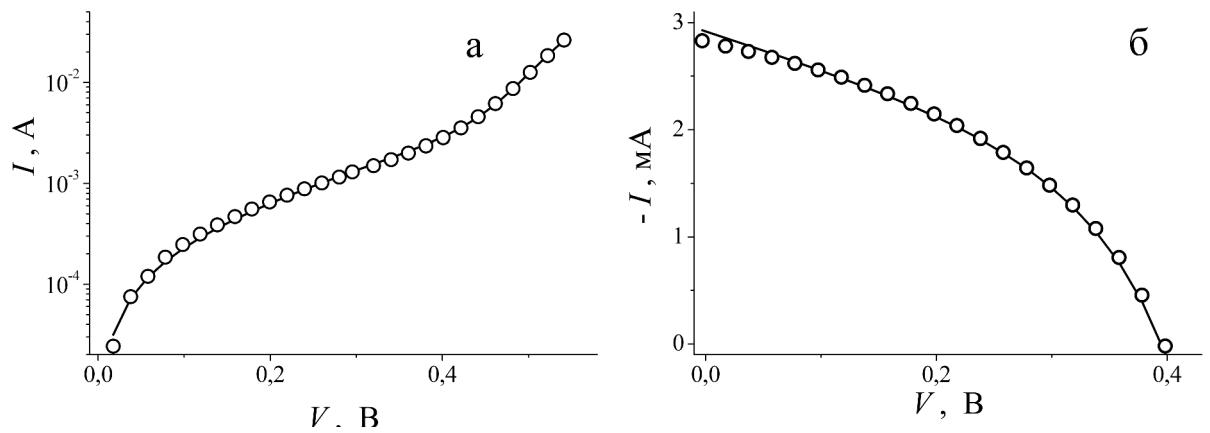


Рисунок 2.6 – Темнова (а) та світлова (б) вольт-амперні характеристики КСЕ. Точки – експеримент, ліній – апроксимація за формулою (2.4). Зразок 212. $T = 320$ К

Дослідження показали, що темнові ВАХ після інтенсивного освітлення структур залишаються незмінними – див. рис.2.7а. Тобто, можливий розпад комплексів, пов’язаних із залізом, не впливає на параметри, що визначають темнові ВАХ. Це стосується, зокрема, фактору неідеальності: з рис.2.7б видно, що після освітлення цей параметр практично не змінюється.

Водночас, світлові ВАХ після освітлення структур галогеновою лампою змінюються з часом, як це показано на рис.2.8. Основними характеристиками фотоелектричного перетворення є напруга розімкнутого кола (V_{oc}) та струм короткого замикання (I_{sc}), які зазвичай визначають як точки перетину ВАХ, вимірюної при освітленні з осями напруг та струмів, відповідно.

На рис.2.7а видно, що зміни I_{sc} після інтенсивного освітлення більші і тому для вивчення кінетики світло індукованих процесів доцільно досліджувати саме цей параметр.

З літератури моделі [33] відомо, що у випадку, коли превалюючою є рекомбінація на дефектах, пов’язаних з домішковим залізом, то час життя носіїв τ , виміряний через час t після дисоціації пар FeB (за умови, що зразок не перебуває під дією інтенсивного освітлення) має описуватися виразом

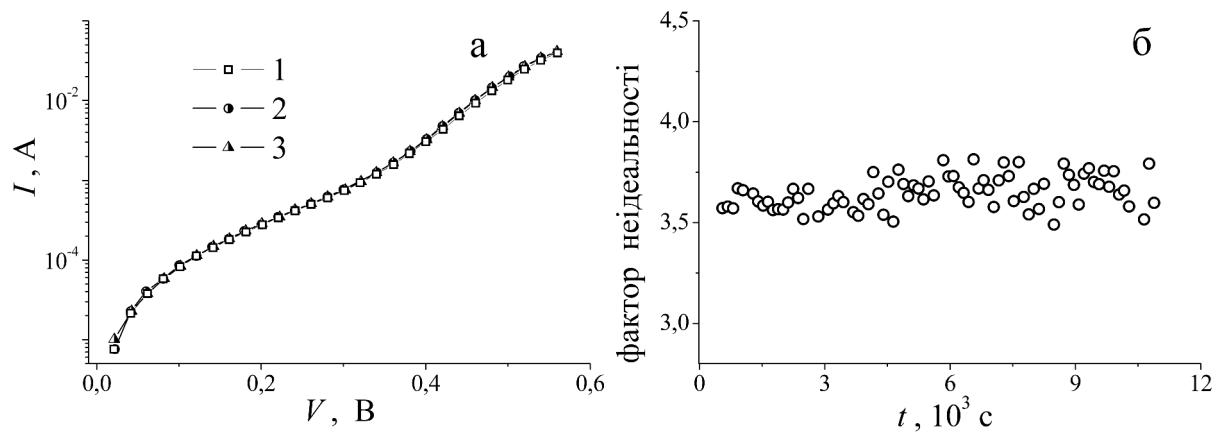


Рисунок 2.6 – Темнові ВАХ (а), виміряні через 148 (крива 1), 498 (2) та 8098 (3) с після інтенсивного освітлення та залежність фактору неідеальності від часу після освітлення (б).
Зразок 116. $T = 320$ К

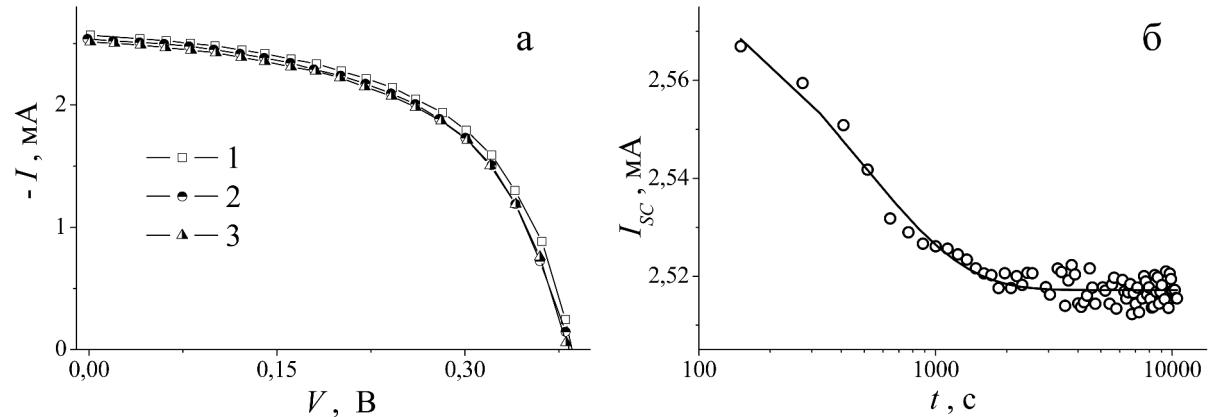


Рисунок 2.7 – Світлові ВАХ (а), виміряні через 150 (крива 1), 500 (2) та 8100 (3) с після інтенсивного освітлення та залежність струму короткого замикання від часу після освітлення (б). Зразок 116. $T = 320$ К. У частині б точки – експеримент, лінія – апроксимація за формулою (2.5)

$$\tau = A_\infty + A_1 \exp\left(-\frac{t}{t_0}\right), \quad (2.5)$$

де

A_∞ відповідає часу життя в рівноважних умовах,

A_1 - амплітуда змін,

t_0 – характерний час.

Враховуючи, що I_{SC} пропорційний $\tau^{1/2}$, то у випадку, коли зміни струму короткого замикання пов'язані з перебудовою залізовмісних комплексів, кінетика зміни цього параметра також має описуватися подібним співвідношенням. Саме це і спостерігалося на експерименті – так на рис.2.8б наведено результат відповідної апроксимації. Характерний час у даному випадку складав 490 с, що також близько до значень, наведених в літературі [26] для часу відновлення пари FeB.

Відомо, що збільшення тривалості інтенсивного освітлення спричинює зростання частки пар, які розпалися, а отже і до збільшення величини світло індукованих змін. При цьому характерний час відновлення пар t_{asos} після припинення освітлення не змінюється: відповідно до [26] він описується виразом

$$t_{asos} = B \frac{T}{N_A} \exp\left(\frac{E_m}{kT}\right), \quad (2.6)$$

де

B – певна стала,

E_m – енергія міграції міжвузольного атому заліза.

На рис.2.9 наведено часові залежності струму короткого замикання після інтенсивного освітлення зразка різної тривалості. Видно, що зростання часу освітлення викликає збільшення світло індукованої зміни I_{SC} (приблизно на 30%). Водночас, характерний час кінетики практично на міняється і становить 320 та 330 с для кожної з кривих.

Як видно з виразу (2.6), зміна температури структури має викликати модифікацію часу асоціації. На рис. 2.10 приведено кінетичні залежності струму короткого замикання після інтенсивного освітлення КСЕ при різних температурах. З наведених даних видно, що в обох випадках часова залежність I_{SC} добре описується виразом (2.5), причому при температурі 300 К визначене

шляхом апроксимації значення характерного часу дорівнює 358 с, тоді як при 320 К – 200 с. Така зміна t_0 відповідає очікуваним відповідно до виразу (2.6).

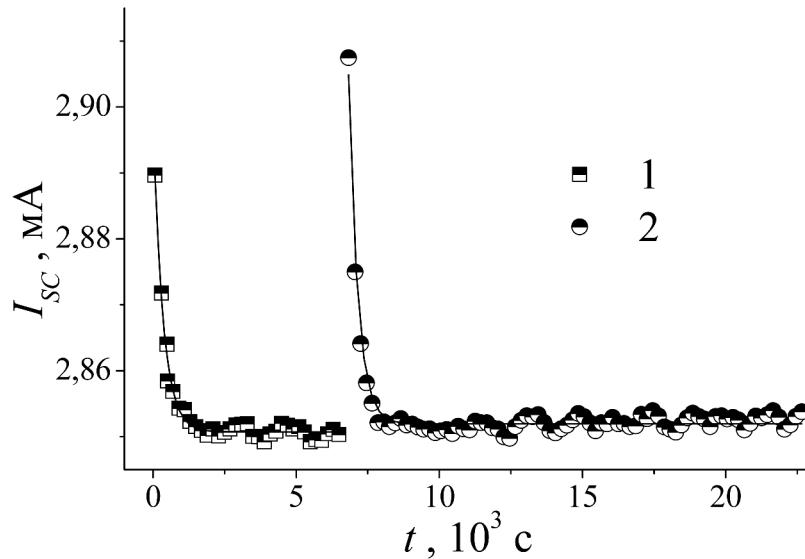


Рисунок 2.9 – Кінетичні залежності величини струму короткого замикання після припинення інтенсивного освітлення тривалістю 180 с (крива 1) та 300 с (2). Зразок 212. $T = 320$ К. Точки – експеримент, лінія апроксимація за формулою (2.5)

Таким чином, особливості кінетики струму короткого замикання (закон зміни, залежності абсолютнох змін від тривалості інтенсивного освітлення та характерного часу від температури) співпадають з відомими закономірностями перебудови дефектних комплексів, що містять міжузольне залізо та заміщаючий атом бору.

Були також проведені дослідження КСЕ до та після термообробки при температурі 210°C, яка призводить до розпаду комплексів FeB і, як наслідок, до активації рекомбінаційних центрів, пов’язаних з домішками заліза. Термічна обробка зразків проводилася на відкритому повітрі. В цьому випадку були виміряні світлові ВАХ та спектральні залежності струму короткого замикання КСЕ $I_{SC}(\lambda)$ в діапазоні довжин хвиль $\lambda = 400 \div 1200$ нм, які вимірювались в режимі автоматичної підтримки постійної потужності монохроматичного випромінювання, що падає на зразок.

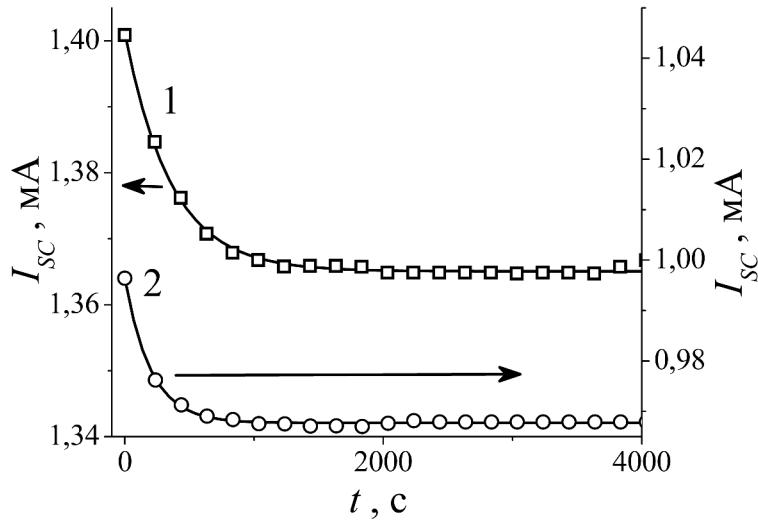


Рисунок 2.10 – Кінетичні залежності величини струму короткого замикання після припинення інтенсивного освітлення тривалістю 300 с. Зразок 115. T , К: 300 (1), 320 (2). Точки – експеримент, лінія апроксимація за формулою (2.5)

З експериментальних спектрів струму короткого замикання $I_{SC}(\lambda)$ отримано спектри внутрішнього квантового виходу $IQE(\lambda)$: (рисунки 4, 5).

$$IQE(\lambda) = \frac{I_{SC}(\lambda)}{8 \cdot 10^{-4} \cdot \lambda \cdot Tr(\lambda)}, \quad (2.7)$$

де

довжина хвилі λ визначається в нм,

спектральна залежність струму короткого замикання $I_{SC}(\lambda)$ в А/Вт,

$Tr(\lambda)$ – спектральна залежність пропускання просвітлюючих шарів, яка отримувалася розрахунковим шляхом на основі відомих значень показника заломлення плівки і її товщини.

Типові спектри $IQE(\lambda)$ представлені на рис.2.11. Як видно, термообробка викликає зменшення величини внутрішнього квантового виходу, що можна пов'язати саме з активацією міжвузольного заліза.

На рис.2.12 представлена типові світлові ВАХ, отримані в умовах AM1,5, для зразків до та після термообробки, а в таблиці 2.2 – визначені значення I_{SC} ,

V_{OC} , коефіцієнта форми ВАХ FF та ефективності фотоперетворення η .

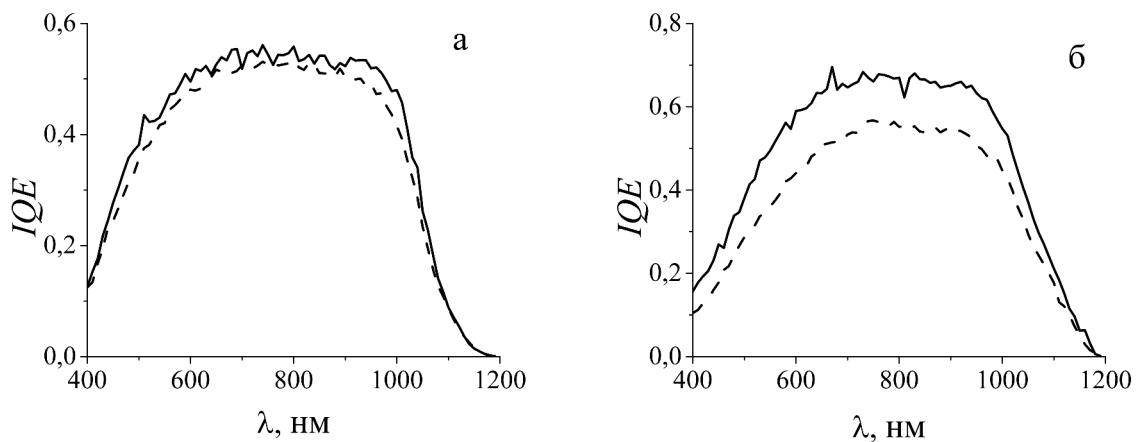


Рисунок 2.11 – Спектральні характеристики внутрішнього квантового виходу зразків 212 (а) та 100 (б). Суцільна лінія – для вихідного зразка; пунктирна лінія – після відпалу при температурі 210°C протягом 3 (а) та 10 (б) хв

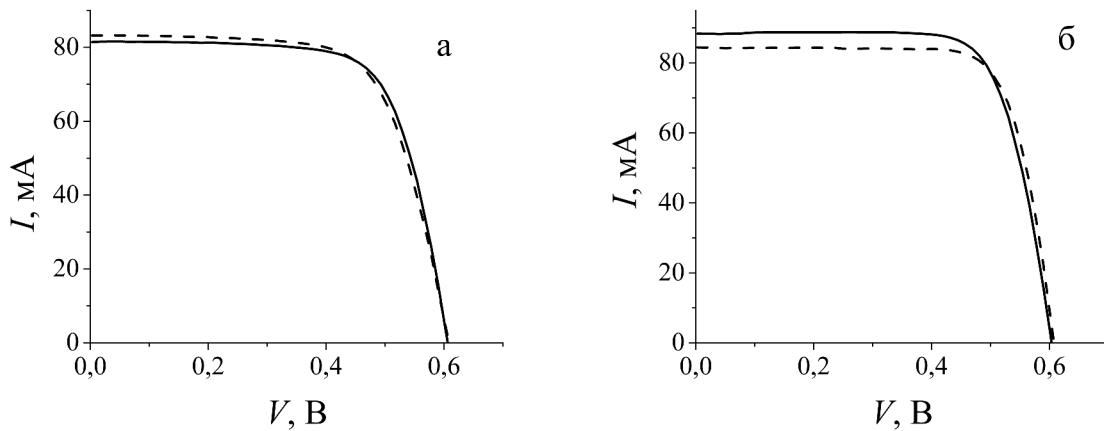


Рисунок 2.12 – Світлові ВАХ зразків 212 (а) та 100 (б). Суцільна лінія – для вихідного зразка; пунктирна лінія – після відпалу при температурі 210°C протягом 3 (а) та 10 (б) хв

Як видно з рис.2.12, термообробка майже не впливає на напругу розімкнутого кола, що збігається з результатами, отриманими при дослідженні світло індукованих процесів. Водночас, I_{SC} може як зменшуватися, так і зростати. На наш погляд, це пов’язано з величиною рівня фотозбудження.

Таблиця 2.2 – Фотоенергетичні параметри КСЕ до, та після термообробки

| Зразок | Термо- обробка | I_{SC} , мА | V_{OC} , В | FF , % | η , % |
|--------|----------------|---------------|--------------|----------|------------|
| 100 | без | 88,332 | 0,603 | 74,021 | 17,15 |
| | після | 84,419 | 0,607 | 75,836 | 16,90 |
| 108 | без | 90,91 | 0,61 | 73,117 | 17,62 |
| | після | 88,041 | 0,616 | 74,397 | 17,55 |
| 115 | без | 81,543 | 0,609 | 69,584 | 15,02 |
| | після | 83,342 | 0,609 | 70,716 | 15,61 |
| 116 | без | 85,031 | 0,612 | 72,015 | 16,07 |
| | після | 82,554 | 0,618 | 71,438 | 15,85 |
| 212 | без | 81,406 | 0,606 | 70,566 | 15,13 |
| | після | 83,191 | 0,608 | 68,093 | 14,96 |

Перший випадок реалізується, якщо рівень відповідає області, що знаходиться ліворуч точки перетину залежностей ефективного часу життя від рівня збудження для рекомбінаційних центрів FeB і Fe_i – див. рис.2.5. У цьому випадку час життя пов'язаний з рекомбінаційним центром FeB більший ніж час життя обумовлений міжвузольним рекомбінаційним центром Fe_i , а сама залежність часу життя від рівня збудження для рекомбінаційного центру FeB є слабо вираженою на відміну від залежності для рекомбінаційного центру Fe в міжвузіллі яка є досить стрімкою. Тому термообробка ініціює розпад FeB і призводить до зменшення ефективного часу життя нерівноважних носіїв заряду, і як наслідок до зменшення величини струму короткого замикання в порівнянні з її величиною на вихідних зразках. Другий випадок має місце, якщо рівень збудження відповідає знаходженню системи по інший бік від точки перетину на рис.2.5. У цьому випадку спостерігається зворотне співвідношення часів життя, пов'язаних з FeB та Fe_i , а отже і ефект

протилежний.

Варто зауважити, що вимірювання світлових ВАХ на всіх досліджуваних зразках, до та після термообробки проводилося при однакових рівнях енергетичної освітленості (умови АМ1,5), однак рівень збудження при цьому може бути різним, оскільки він залежить не лише від темпу генерації електронно діркових пар (що визначається рівнем енергетичної освітленості), а і від їх ефективного часу життя, який змінюється як в залежності від зразка, так і в результаті температурних обробок. Разом з тим, світлові ВАХ вимірюються при достатньо великих рівнях енергетичної освітленості, що також може призводити до перерозподілу концентрацій FeB і Fe_i уже в процесі вимірювання світлових ВАХ на вихідних зразках і ускладнювати тим самим аналіз кінетики змін ВАХ.

2.4. Підбір кремнієвих сонячних елементів

Експериментальна частина проекту має на меті встановити фізичні закономірності та механізми впливу акустичних хвиль на процес перебудови дефектних комплексів, пов'язаних із атомами перехідних металів, зокрема заліза, то для підбору досліджуваних експериментальних зразків був проведений літературний пошук щодо поведінки та властивостей атомів заліза в кремнії. Підбір КСЕ та пластин кремнію, необхідних для виконання запланованих досліджень, проведено з врахуванням особливостей вказаних домішок. Так, оскільки енергетичне положення відповідних дефектам рівнів знаходиться далеко від країв дозволених енергетичних зон, можна зробити висновок про те, що і міжузольне залізо Fe_i і пари FeB утворюють у кремнії рекомбінаційно активні центри, а отже, суттєво зменшують час життя нерівноважних носіїв струму в базі КСЕ і відповідно, ефективність процесів фотоелектричного перетворення енергії. В наших попередніх роботах, зокрема [34], були розраховані залежності часу життя ШРХ від рівня легування КСЕ з

базою p - та n -типу – див. рис.2.13.

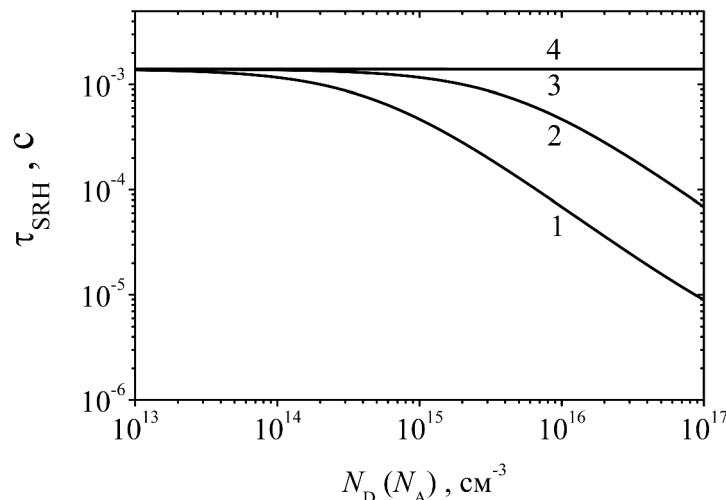


Рисунок 2.13 – Залежності часу життя ШРХ від рівня легування бази КСЕ: криві 1 і 2 – для бази p -типу, 3 і 4 – для бази n -типу. Δn , см^{-3} : $5 \cdot 10^{14}$ (криві 1 та 3), $5 \cdot 10^{15}$ (2, 4). При розрахунках вважалося, що Параметри рекомбінаційного рівня заліза: $E_C - E_{def} = 0,774$ еВ, $\sigma_p = 7,0 \cdot 10^{-17}$ см^{-2} , $\sigma_n = 5,0 \cdot 10^{-14}$ см^{-2} , $N_{Fe} = 6 \cdot 10^{11}$ см^{-3}

Насамперед, слід відзначити, що на рекомбінацію в КСЕ з базою n -типу наявність заліза, навіть з великою концентрацією не впливає – криві 3 та 4 на рис.2.13. В той же час у КСЕ з базою p -типу (легованих бором) має місце значне падіння часу життя надлишкових носіїв заряду (на два порядки) із збільшенням рівня легування. Можна також бачити, що зі збільшенням рівня збудження швидкість падіння часу життя зменшується. Відзначені рівні збудження ($5 \cdot 10^{14}$ та $5 \cdot 10^{15}$ см^{-3}) відповідають точці максимального відбору потужності і режиму розімкненого кола.

Таким чином, підбір КСЕ та пластин кремнію, необхідних для виконання експериментальних досліджень, проводився з врахуванням відзначеної вище. А саме, принциповими моментами підбору зразків були:

- матеріал бази КСЕ - кремній з p -типом провідності, легований бором;

- рівень легування бази КСЕ та пластин кремнію *p*-типу – від 10^{15} до 10^{16} см^{-3} (питомий опір $1,5 - 15 \text{ Ом}\cdot\text{см}$);
- широкий діапазон зміни параметрів КСЕ, насамперед, коефіцієнта корисної дії, що має відповідати різним рівням рекомбінаційних втрат, і відповідно, концентраціям рекомбінаційних центрів, зокрема, заліза;
- бажаний матеріал бази КСЕ - кремній від різних виробників.

В результаті було відібрано пластини кремнію марок КДБ-2; КДБ-9; КДБ-10/20 (вирощені методом Чохральського) та КБД-2 (метод зонної плавки); а також КСЕ, виготовлені на основі пластин КДБ-9 та КДБ-10.

Для ряду КСЕ було визначено концентрацію домішкового заліза. Визначення базувалося на тому, що спектри внутрішнього квантового виходу дозволяють дослідити особливості протікання рекомбінаційних процесів у приповерхневій області та в об'ємі, і зокрема визначити довжину дифузії L_d нерівноважних носіїв заряду в кремнії. Для визначення довжини дифузії нерівноважних носіїв заряду в кремнії будувалися залежності $1/IQE(\lambda) = f(1/\alpha(\lambda))$, де $\alpha(\lambda)$ - залежність коефіцієнта поглинання кремнію від довжини хвилі. Значення довжини дифузії нерівноважних носіїв заряду знаходилося по величині відсічки по осі абсцис в області довгохвильового спаду залежностей IQE(λ) - рис.2.14. Після визначення довжини дифузії до та після термооброчки, концентрація домішкових атомів заліза оцінювалась з використанням формули (2.2). Отримані результати наведені в таблиці 2.3. З представлених даних можна бачити, що для різних зразків лежать в діапазоні від $1,97 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}$ до $3,14 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$.

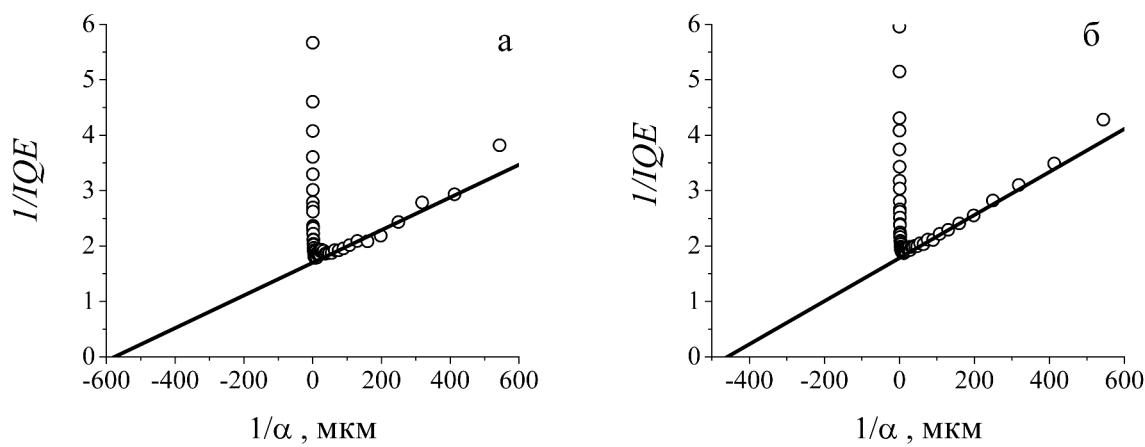


Рисунок 2.14 – Ілюстрація визначення довжини дифузії нерівноважних носіїв заряду в КСЕ. Зразок 212 до (а) та після (б) відпалу при температурі 210°C протягом 10 хв

Таблиця 2.3 – Довжина дифузії нерівноважних носіїв заряду в КСЕ до та після термообробки зразків і концентрація заліза в них

| Зразок | L_0 , мкм | L_1 , мкм | N_{Fe} , см^{-3} |
|--------|----------------|----------------|--------------------------------|
| 212 | 576 | 458 | $1,84 \cdot 10^{10}$ |
| 115 | 612 | 478 | $1,79 \cdot 10^{10}$ |
| 116 | 657 | 434 | $3,14 \cdot 10^{10}$ |
| 108 | 551 | 502 | $7,08 \cdot 10^9$ |
| 100 | 537 | 523 | $1,97 \cdot 10^9$ |

2.5 Основні результати розділу 2

- Проведено вивчення і аналіз літературних даних щодо поведінки та властивостей домішкових атомів заліза у кремнії. Проаналізовано особливості впливу зовнішніх факторів (режими термічних обробок, освітлення та їхні комбінації) на процеси перебудови дефектних комплексів, а також прикметні

риси впливу останніх на фотоелектричні процеси в КСЕ. З врахуванням отриманих результатів сформульовано вимоги до експериментальних зразків КСЕ і пластин кремнію, згідно з якими виконано підбір кремнієвих сонячних елементів.

2. Запропоновано методику вимірювання кінетики світлоіндукованих процесів в кремнієвих сонячних елементах, яка базується на послідовному освітленні зразків та вимірюванні зміни амплітуди фотовідгуку на монохроматичний сигнал з довжиною хвилі $900\div980$ нм при малому рівні збудження ($\Delta n \approx 5 \cdot 10^{11} \div 10^{12} \text{ см}^{-3}$).

3. Показано, що виявлені зміни світлових ВАХ та спектральних залежностей фотоструму після термообробки можуть бути пояснені розпадом пар FeB з врахуванням рівня фото збудження.

4. Експериментально показано, що темнові вольт-амперні характеристики КСЕ практично не змінюються внаслідок інтенсивного освітлення. Встановлено, що особливості кінетики струму короткого замикання (закон зміни, залежності абсолютнох змін від тривалості інтенсивного освітлення та характерного часу від температури) співпадають з відомими закономірностями перебудови (розпаду) дефектних комплексів, що містять міжвузольне залізо та заміщаючий атом бору. Таким чином, струм короткого замикання може слугувати індикатором дисоціації та відновлення даного комплексу.

ВИСНОВКИ

1. Проведено вивчення і аналіз літературних даних щодо властивостей, поведінки в умовах дії зовнішніх чинників та впливі на фотоелектричні процеси дефектних комплексів, пов'язаних з домішковими атомами заліза у кремнії.
2. 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 ($150 \div 240$ мкм) та ступенем її легування ($10^{15} \div 10^{17}$ см $^{-3}$) бази при варіації концентрації домішкового заліза в інтервалі $10^{10} \div 10^{13}$ см $^{-3}$ для температурного діапазону $290 \div 340$ К, а також які враховують можливість перебування домішкових атомів заліза у міжвузольному стані та у складі пари FeB.
3. Запропоновано методику вимірювання кінетики світлоіндукованих процесів в КСЕ, яка базується на послідовному освітленні зразків та вимірюванні зміни амплітуди фотовідгуку на монохроматичний сигнал з довжиною хвилі $900 \div 980$ нм при малому рівні збудження.
4. Експериментально показано, що особливості кінетики струму короткого замикання співпадають з відомими закономірностями перебудови дефектних комплексів, що містять міжвузольне залізо та заміщаючий атом бору. Таким чином, струм короткого замикання може слугувати індикатором дисоціації та відновлення даного комплексу.

ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

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

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

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

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

ДОДАТОК А

Копія статті, підготовленої за період виконання наукового дослідження і розробки “Розробка фізичних зasad акусто-керованої модифікації та машинно-орієнтованої характеризації кремнієвих сонячних елементів”

ПРОЄКТ 2020.02/0036
за договором № 180/02.2020 від 05 листопада 2020 року

MODELING OF IDEALITY FACTOR VALUE IN $n^+ - p - p^+$ -Si STRUCTURE

O. Ya. Olikh[✉], O. V. Zavhorodnii
*Taras Shevchenko National University of Kyiv,
64/13, Volodymyrska St., Kyiv, UA-01601, Ukraine*
e-mail: olikh@univ.kiev.ua

(Received 25 August 2020; in final form 19 October 2020; accepted 22 October 2020; published online 01 December 2020)

This paper presents the results of computer simulation of the ideality factor of silicon $n^+ - p - p^+$ structure with iron contamination. The Solar Cells Capacitance Simulator (SCAPS) was the tool used for numerical simulation of these devices. The iron concentration range of $10^{10} - 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, the acceptor doping level range of $10^{15} - 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, the temperature range of $290 - 340 \text{ K}$, and the base thickness range of $150 - 240 \mu\text{m}$ were used in the investigation. The double diode model was used to extract the ideality factor. The following cases were considered: (i) uniformly distributed lone interstitial iron atoms; (ii) coexistence of non-uniformly distributed Fe_i and Fe_iB_s . It has been shown that the ideality factor value is determined by a hole occurring on the Fe_i level, a trap location, and an intrinsic recombination contribution. The increase in the base thickness leads to a decrease in n value. The sign of change in the ideality factor after Fe_iB_s dissociation depends on temperature, doping level, and iron concentration.

Key words: ideality factor, silicon, $n^+ - p - p^+$ structure, SCAPS, iron concentration.

DOI: <https://doi.org/10.30970/jps.24.4701>

I. INTRODUCTION

In literature, there are several models that describe the current–voltage ($I - V$) characteristics of the solar cells (SCs). These models contain some parameters which reflect the processes within the structures and are related to the main characteristics of the photovoltaic conversion. So the single diode model with three parameters has been used to represent the SC static characteristic because of simplicity:

$$I = I_0 \left[\exp \left(-\frac{qV}{nkT} \right) - 1 \right] - I_{\text{ph}}, \quad (1)$$

where I_0 is the saturation current, n is the diode ideality factor, I_{ph} is the total current generated by a solar cell. The ideality factor value indicates a defect related recombination and directly determines open-circuit magnitude:

$$V_{\text{oc}} = \frac{nkT}{q} \ln \left(\frac{I_{\text{ph}}}{I_0} + 1 \right). \quad (2)$$

Equation (1) does not take into account a leakage current and a series of losses of load current. Besides, the widely used double diode model is developed by considering the effect of the recombination current loss in the depletion region [1–3]:

$$\begin{aligned} I &= I_{01} \left[\exp \left(-\frac{q(V - R_s I)}{kT} \right) - 1 \right] \\ &+ I_{02} \left[\exp \left(-\frac{q(V - R_s I)}{nkT} \right) - 1 \right] + \frac{V - R_s I}{R_{\text{sh}}} - I_{\text{ph}}, \end{aligned} \quad (3)$$

where the first term is closely related to the recombination in the quasi-neutral region, the second term describes the overall space charge region (SCR) recombination, R_s and R_{sh} are the series and shunt resistance,

respectively. In this case the relationship between the ideality factor and SC characteristics is more complicated. Some examples of the relationship between n and open-circuit voltage and the fill factor in the two-diode model can be found in [4]. Typically, the value of the ideality factor ranges from 1 to 2 for real devices and depends on ambient conditions and recombination center parameters, including the concentration of traps [5–9]. This makes the ideality factor an important parameter that can be used to describe the electrical behavior of photovoltaic devices and characterize the recombination in SCs [10].

A major obstacle to the development of such a convenient and express method is the multiparameter relationship between the n value and the concentration of recombination centers. This paper attempts to resolve these difficulties by the simulation of $I - V$ characteristic of silicon solar cells, the determination of ideality factor, and the study of n value depending on simulation parameters. In contrast to the previous paper [11], in this case the $n^+ - p - p^+$ -structure, which is closer to the real SC, is under consideration. Additionally, the base thickness is known [12, 13] to affect SC efficiency; therefore, the paper considers the influence of this parameter on the ideality factor value.

The paper focuses on the case when the main recombination centers are the iron related defects. On the one hand, iron atoms are among the most common as well as the most harmful impurities in a silicon solar cell. On the other hand, the Fe_iB_s pairs can be readily dissociated by illumination [13]; the association reaction can take place when exposed in darkness for ten minutes [14]. Such a change in the recombination center state should lead to a change in an ideality factor value, which is easy to obtain experimentally and to use for the SC characterization. Therefore, the paper also pays attention to dependencies of n value change.



II. SIMULATION DETAILS

The calculation presented here uses $n^+ - p - p^+$ structure shown in inset in Fig. 1. Its main parts are the emitter layer with thickness d_n , the base with the hole conductivity and thickness d_p and the p^+ layer with thickness d_{BSF} intended for the back surface field (BSF) creation. BSF-layer is designed to increase the photovoltaic converter efficiency by reducing the losses concerned with the surface recombination and such structure is widely used for both manufacturing of real solar cells and modeling [15–17].

The material of all layers was assumed to be monocrystalline silicon. The temperature dependencies of the bandgap were calculated using the Pässler equations [18]. The bandgap narrowing, thermal carrier velocities, and free carrier effective mass were taken from Yan and Cuevas [19], Green [20], and O'Mara *et al.* [21], respectively. Data from Couderc *et al.* [22] were used to evaluate intrinsic carrier density and density of states effective masses. The temperature dependencies carrier mobilities were described by Klaassen's theory [23, 24].

Uniform doping with phosphorus (the emitter layer, concentration N_D) and boron (base and BSF-layer, concentrations N_A and N_{BSF} , respectively) was assumed.

The following recombination processes were taken into account: i) the outside surface recombination with electron and hole velocities 10^3 cm/s; ii) the intrinsic recombination (radiative band-to-band and Auger with coefficients, which depend on temperature and doping level according to Nguyen *et al.* [25] and Altermatt *et al.* [26]); iii) the Shockley–Read–Hall (SRH) recombination.

In the last case, as the base and BSF-layer uniform contaminant, iron is assumed to be in concentration N_{Fe} . It is well known that an iron atom is locates in the lone interstitial lattice position in silicon (Fe_i) or interacts with ionized acceptors and combines into a Fe_iB_s pair. The two cases were under consideration. In the first one, uniformly distributed Fe_i with concentration N_{Fe} was assumed. This happens under constant illumination or immediately after its termination. The temperature independent donor level $E_{Fe_i} = E_V + 0.394$ eV [27–29] and electron $\sigma_{n,Fe} = 3.47 \times 10^{-15} T^{-1.48}$ m² and hole $\sigma_{p,Fe} = 4.54 \times 10^{-20} \exp(-\frac{0.05}{kT})$ m² capture cross-sections [30, 31] are associated with Fe_i . In the second one, Fe_i and Fe_iB_s coexisted. They were non-uniformly distributed through the base and BSF-layer. More details are presented elsewhere [11] and representative examples of the calculation are shown in Fig. 2. This happen under dark equilibrium condition. The Fe_iB_s is amphoteric defect and donor level $E_{FeB}^D = E_V + 0.10$ eV, $\sigma_{n,FeB}^D = 4 \times 10^{-17}$ m², $\sigma_{p,FeB}^D = 2 \times 10^{-18}$ m² and acceptor level $E_{FeB}^A = E_C - 0.26$ eV, $\sigma_{n,FeB}^A = 5.1 \times 10^{-13} T^{-2.5}$ m², $\sigma_{p,FeB}^A = 3.32 \times 10^{-14} \exp(-\frac{0.262}{kT})$ m² [14, 27, 28, 30–32] are used in the simulation.

The dark forward dark $I - V$ characteristics were generated by one-dimensional code SCAPS 3.3.08 [33, 34] over a voltage range up to 0.45 V with step 0.01 V. This software is widely applied in modeling various

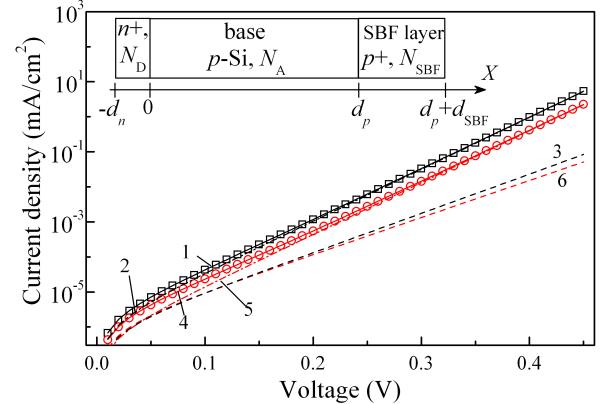


Fig. 1. Simulated $I - V$ characteristic (marks) and its fitting by Eq. (4) (solid lines 1 and 4). The dashed (3, 6) and dotted-dashed (2, 5) lines represent the diffusion and recombination currents, respectively. $N_A = 10^{17}$ cm⁻³, $N_{Fe} = 10^{13}$ cm⁻³, $T = 340$ K, $d_p = 180$ μm. The results for lone unpaired Fe_i (circles, curves 4–6, red) as well as for Fe_iB_s and Fe_i coexistence (squares, curves 1–3, black) are presented.

Inset: Structures, which are used in the simulation

solar cells [15, 16, 35–39], silicon based devices including [15, 16, 39]. The used parameters are listed in Table 1. Thus, the varied parameters were the boron concentrations in the base, iron concentration, base thickness and temperature. Taking into account two defect configuration, 15048 structures were simulated. The examples of $I - V$ curve are shown in Fig. 1.

| Parameter | Range | Number of values |
|------------------------------|---------------------|------------------|
| d_n , μm | 0.5 | 1 |
| d_p , μm | 150 – 240 | 4 |
| d_{BSF} , μm | 1 | 1 |
| N_D , cm ⁻³ | 10^{19} | 1 |
| N_A , cm ⁻³ | $10^{15} - 10^{17}$ | 9 |
| N_{BSF} , cm ⁻³ | $5 \cdot 10^{18}$ | 1 |
| N_{Fe} , cm ⁻³ | $10^{10} - 10^{13}$ | 19 |
| T , K | 290 – 340 | 11 |

Table 1

The simulated $I - V$ characteristics were fitted by the following equation:

$$I = I_{01} \left[\exp \left(-\frac{qV}{kT} \right) - 1 \right] + I_{02} \left[\exp \left(-\frac{qV}{nkT} \right) - 1 \right]. \quad (4)$$

Equation (4) corresponds to the dark double diode model with both series and shunt resistances neglected. The first diode represents the “ideal” diode, describing the so-called diffusion current characterized by the saturation current I_{01} , and the second diode is the so-called

recombination current, characterized by the saturation current I_{02} and ideality factor n [3]. n , I_{01} , and I_{02} were taken as fitting parameters and the meta-heuristic method IJAVA [40] was used. The representative results of the fitting are shown in Fig. 1 as well.

In the case of lone unpaired Fe_i the following values were calculated: $n_{\text{Fe}}^{\text{srh}}$ is the ideality factor if the SRH recombination is taken into account only; n_{Fe} is the

ideality factor if both the SRH recombination and the intrinsic recombination are allowed; $\delta n_{\text{Fe}}^{\text{srh}} = n_{\text{Fe}}^{\text{srh}} - n_{\text{Fe}}$ characterizes the influence of the intrinsic recombination on the ideality factor value. In the case of Fe_iB_s and Fe_i coexistence, the $n_{\text{FeB}}^{\text{srh}}$, n_{FeB} , $\delta n_{\text{FeB}}^{\text{srh}} = n_{\text{FeB}}^{\text{srh}} - n_{\text{FeB}}$ were calculated (indices had the same meaning). Besides, the change of the ideality factor after Fe_iB_s association $\delta n_{\text{Fe}-\text{FeB}} = n_{\text{Fe}} - n_{\text{FeB}}$ was calculated as well.

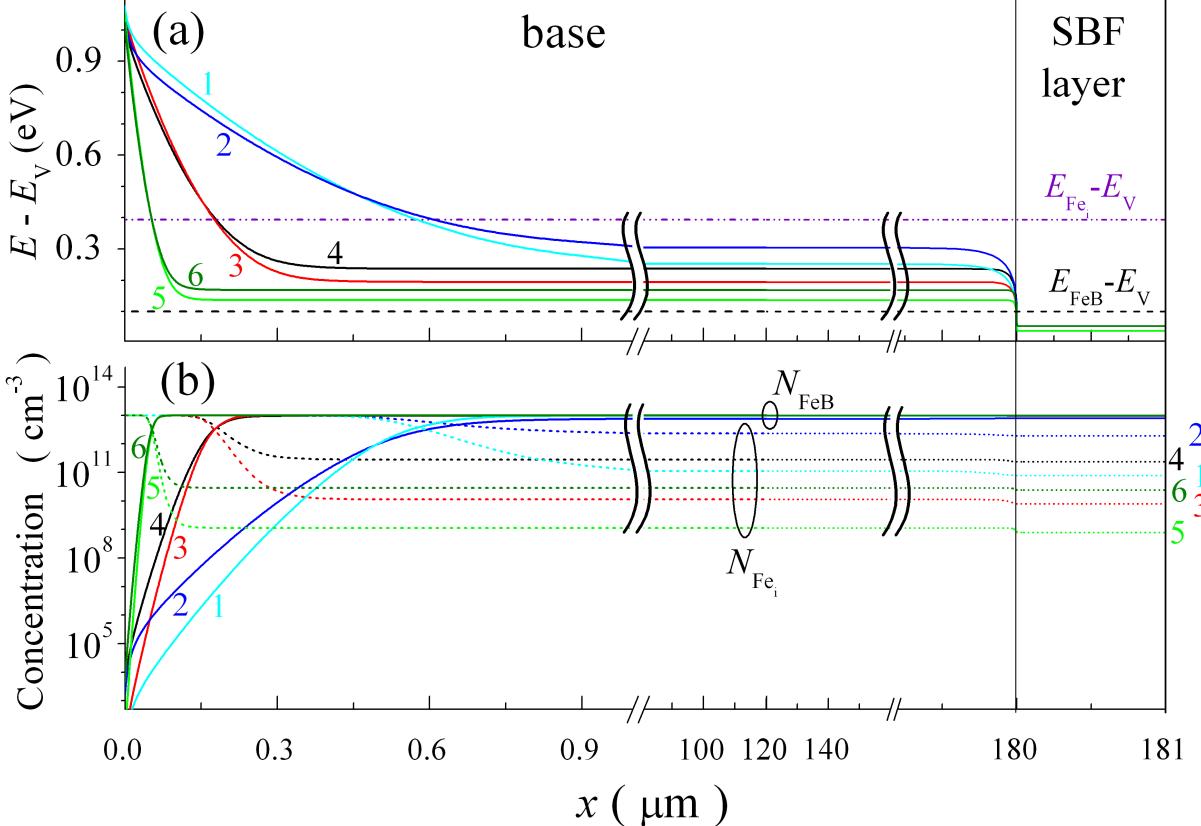


Fig. 2. (Color online). The calculated base and SBF-layer distribution of the Fermi level position (a, solid lines), unpaired interstitial iron concentration (b, dotted lines), and Fe_iB_s pair concentration (b, solid lines) at $V = 0$. N_A , cm^{-3} : 10^{15} (curves 1, 2), 10^{16} (3, 4), 10^{17} (5, 6); T , K: 290 (1, 3, 5), 340 (2, 4, 6); $N_{\text{Fe}} = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$; $d_p = 180 \mu\text{m}$. The positions of Fe_i donor level (dotted-dashed line) and Fe_iB_s donor level (dashed line) are shown in the panel (a) as well

III. RESULTS AND DISCUSSION

Figures 3–5 show the typical simulated dependencies of the ideality factor value on temperature and both iron and boron concentrations. Note that the $\delta n_{\text{FeB}}^{\text{srh}}$ surfaces (number 5, orange) are not shown if they practically coincide with the $\delta n_{\text{FeB}}^{\text{srh}}$ surfaces (4, yellow).

One should pay attention to Fig. 2 before a discussion of the obtained dependencies. Firstly, the presented data testify to the primary role of unpaired interstitial iron in recombination even in the case of Fe_iB_s and Fe_i coexistence. In fact, the donor E_{FeB}^D level is below the Fermi level and, therefore, the probability of capturing of a non-equilibrium electron is small. Additionally, the ideality factor value above all associated with a SCR recombination and the Fe_i concentration exceeds the Fe_iB_s concentration in the 2/3 thickness of the space

charge region. And it is confirmed by the similarity between the dependencies of n_{FeB} (surfaces 1, red) and n_{Fe} (surfaces 2, cyan) in Figs. 3–5. Secondly, the unpaired iron atom concentration can be big enough in the case of Fe_iB_s and Fe_i coexistence as well and it increases with the temperature rise and a decrease in the doping level. For example, the Fe_i concentration in the quasi-neutral region of the base reaches 23 (or 3) percent of N_{Fe} at $T = 340$ K and $N_A = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (or 10^{16} cm^{-3}). That is, under these conditions, the concentration of unpaired iron atoms in the dark and $N_{\text{Fe}} = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ is larger than the one under illumination and $N_{\text{Fe}} = 10^{11} \text{ cm}^{-3}$. Finally, as only ionized iron Fe_i^+ (unlike to neutral iron Fe_i^0) actively takes part in the SRH recombination, these processes efficiently occur at $x \geq 0.6W_p$ (where W_p is the SCR depth). And the area of processes, which determines the ideality factor value, shifts away from the $p - n$ junction with an increase in the doping level.

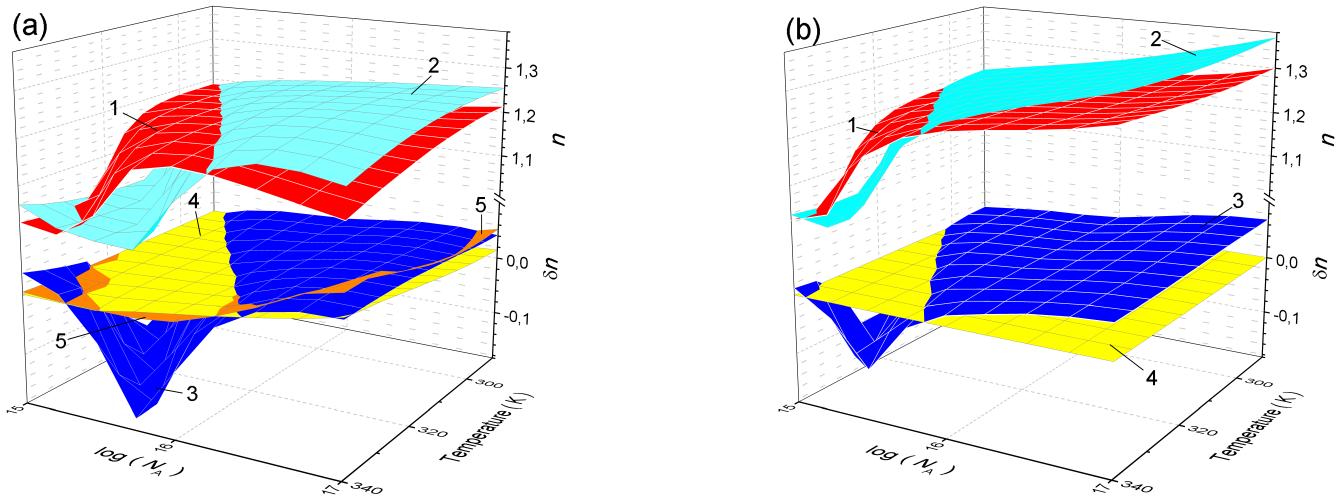


Fig. 3. (Color online). Ideality factor and its change as a function of the temperature and acceptor (boron) concentration. N_{Fe} , cm^{-3} : 10^{10} (a), 10^{13} (b); $d_p = 240 \mu\text{m}$. Surface 1 (red) reflects the n_{FeB} dependence, 2 (cyan) — n_{Fe} , 3 (blue) — δn_{Fe-FeB} , 4 (yellow) — δn_{FeB} , 5 (orange) — δn_{Fe}

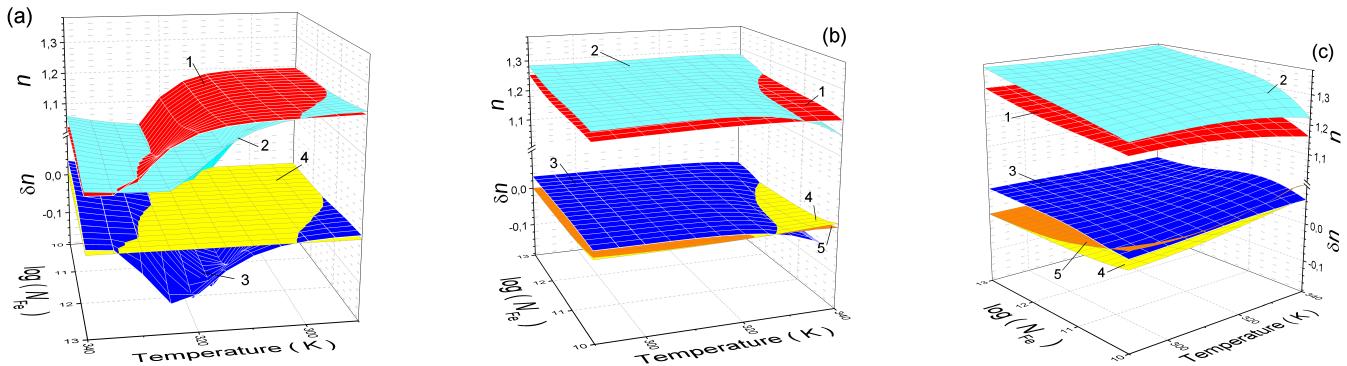


Fig. 4. (Color online). Ideality factor and its change as a function of the temperature and iron concentration. N_A , cm^{-3} : 10^{15} (a), 10^{16} (b), 10^{17} (c); $d_p = 150 \mu\text{m}$. Surface numbers are the same as in Fig. 3

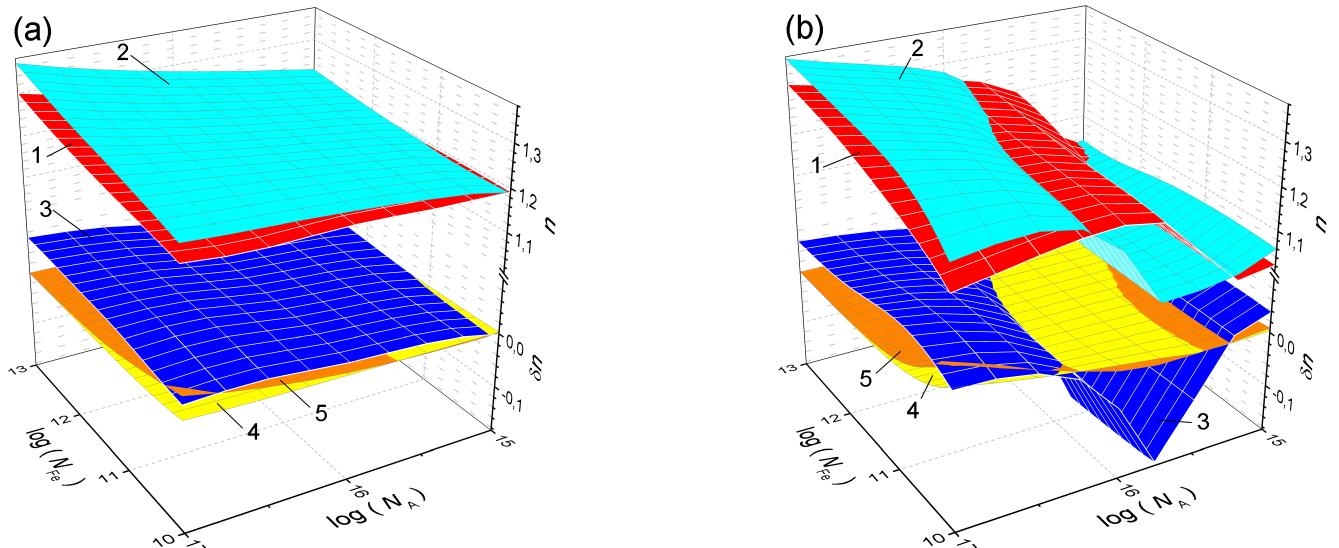


Fig. 5. (Color online). Ideality factor and its change as a function of the acceptor (boron) concentration and iron concentration. T , K: 290 (a), 340 (b); $d_p = 180 \mu\text{m}$. Surface numbers are the same to Fig. 3

Several determinants must be taken into account when analyzing the dependencies of the ideality factor on temperature and the concentration of boron. Namely:

i) the occurrence of a hole on the Fe_i level, which determines the recombination efficiency. Accordingly to the Fermi-Dirac statistics, the probability of a hole occupation in a non-degenerate p -type semiconductor with full acceptor depletion can be expressed as

$$f_p = \frac{1}{1 + \frac{N_V(T)}{N_A} \exp\left(\frac{E_V - E_{\text{Fe}_i}}{kT}\right)}. \quad (5)$$

It has been shown earlier [4] that the $f_p(T, N_A)$ dependence is generally similar to the observed dependence of the ideality factor dependence. In particular, if f_p is close to one (high N_A value and low temperature), this dependence changes slowly, n does not depend on temperature and slowly rises with an increase in the doping level — see Figs. 4(b),(c); 5,(a). If N_A decreases or (and) T increases, the level is filled with an electron in a sufficiently narrow range of arguments, the SRH recombination ceases, and the ideality factor value sharply reduces — Figs. 3, 4(a); 5(b).

ii) the balance of the defect related recombination and the intrinsic recombination. SRH recombination generally causes an increase in the ideality factor value; if the defect related recombination is dominant, the value often reported in publications is $n = 2$. The radiative band-to-band and Auger recombinations are enhanced by the increase in both free charge carrier concentration (doping level) and temperature [25, 26]). In this case, the ideality factor reduces and the values $\delta n_{\text{Fe}}^{\text{srh}}$ and $\delta n_{\text{FeB}}^{\text{srh}}$ become nonzero. This effect is observed in the corners of surfaces in Figs. 3(a); 4(b),(c); 5.

The change in the impurity iron concentration has almost no effect on the nature of the n dependence on other parameters. However, the N_{Fe} rise is expectedly accompanied by an increase in the ideality factor value (see Figs. 4, 5), which is almost linear with respect to $\ln(N_{\text{Fe}})$. An exception is observed only when the level Fe_i is filled with an electron ($n < 1.06$). At the same time, the intrinsic recombination has a greater contribution at a low iron concentration and same other parameters; and a sharp decrease in the ideality factor value is observed in the wake of the low impurity concentration. The striking examples are shown in Figs. 4(b),(c).

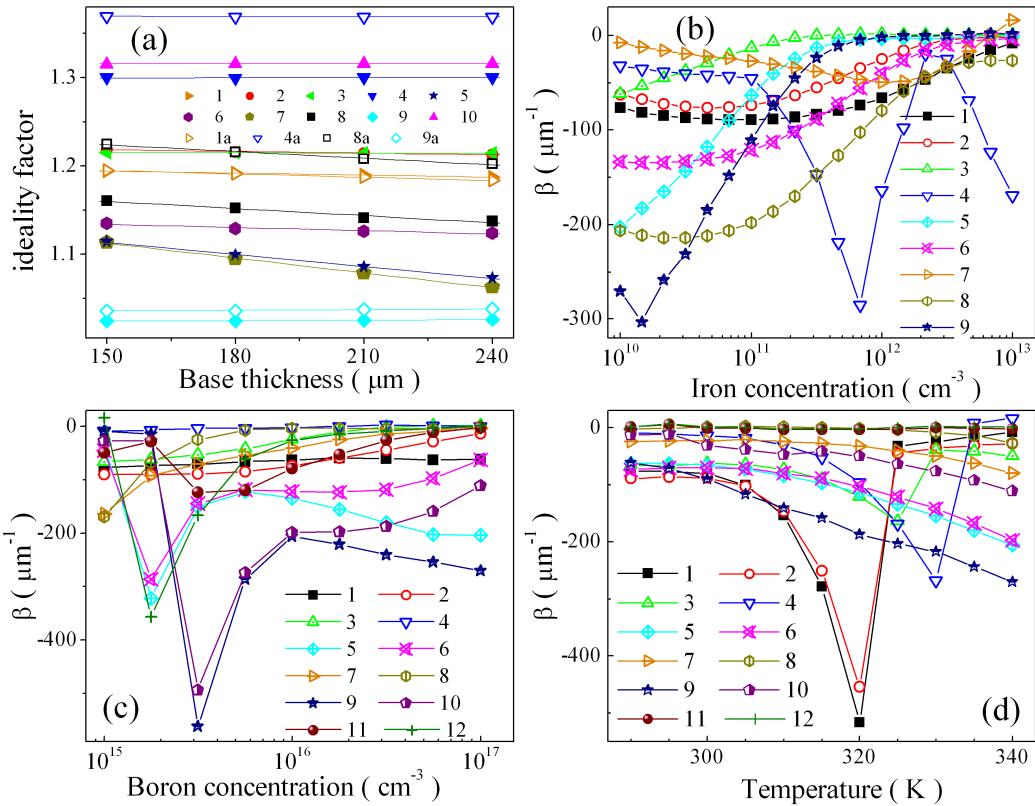


Fig. 6. (a) Typical dependencies of the ideality factor on the base thickness. The results for Fe_iB_s and Fe_i coexistence (curves 1–6, filled marks) as well as for unpaired Fe_i sole (2a, 5a, 6a, empty marks) are presented. T, K : 290 (1, 2, 2a), 320 (3), 340 (4–6, 5a, 6a); $N_{\text{Fe}}, \text{cm}^{-3}$: 10^{10} (4, 5, 5a), 10^{12} (3), 10^{13} (1, 2, 2a, 6, 6a); N_A, cm^{-3} : 10^{15} (1, 3, 6, 6a), $3.162 \cdot 10^{15}$ (4), 10^{17} (2, 2a, 5, 5a). The marks are the simulation result, the lines are fitted curves using Eq. (6). (b) Ideality factor thickness coefficient vs iron concentration. T, K : 290 (1, 2), 325 (3), 340 (4–6); N_A, cm^{-3} : 10^{15} (4), 10^{16} (1, 5), 10^{17} (2, 3, 6). (c) Ideality factor thickness coefficient vs boron concentration. T, K : 290 (1, 2), 325 (2–5), 340 (6); $N_{\text{Fe}}, \text{cm}^{-3}$: 10^{10} (3, 6), 10^{11} (1, 4), 10^{12} (5), 10^{13} (2). (d) Ideality factor thickness coefficient vs temperature. N_A, cm^{-3} : 10^{15} (1, 2), 10^{16} (3, 4), 10^{17} (5, 6). $N_{\text{Fe}}, \text{cm}^{-3}$: 10^{10} (3, 5), 10^{12} (2, 4, 6). Panels (b)–(d) present results in the case of Fe_iB_s and Fe_i coexistence

Taking into account Eq. (3), one can see that the ideality factor appears in the item connected to the SCR recombination. Therefore, seemingly, n should not depend on the thickness of the $n^+ - p - p^+$ structure base. However, such a dependence is observed (see Fig. 6(a)) and the ideality factor decreases with an increase in thickness. This is evidence that the n value is influenced by processes in the quasi-neutral region as well. The ideality factor changes in a similar way in both lone unpaired Fe_i and Fe_iB_s and Fe_i coexistence cases and described well by a linear dependence

$$n = n_0 - \beta d_p. \quad (6)$$

where β is the ideality factor thickness coefficient. The maximum effect of thickness is observed at the middle $1.05 < n < 1.25$ value. Figures. 6(b)–(d) show the dependencies of β on the other simulation parameters. One can see that the d_p influence on n generally intensifies with an increase in temperature as well as a decreasing of the concentrations of both boron and iron. The decrease in the relative contribution of SRH recombination due to the electron filling of Fe_i level as well as due to the intensification of the intrinsic recombination causes a decrease in the β module. In addition, Fig. 7 shows the dependencies of the electron diffusion length (L_n) in the base on the concentration of lone unpaired Fe_i , calculated by using SCAPS. Apparently, the influence of the base thickness is observed in the $L_n > d_p$ case only, and this is the reason why $\beta \approx 0$ at $n > 1.3$.

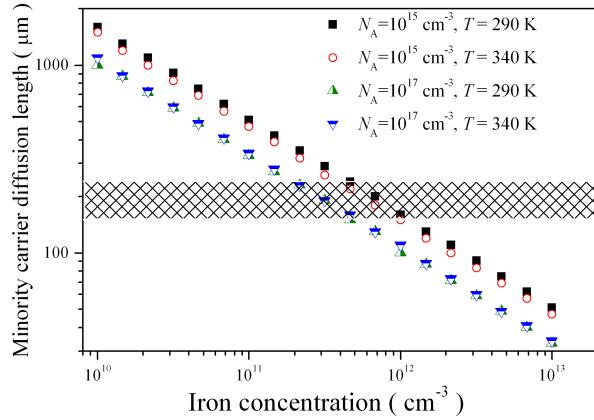


Fig. 7. The calculated dependencies of the electron diffusion length in the structure base in the case of unpaired Fe_i sole. The shaded area represents values of base thickness, were used in the simulation

Also Figs. 3–5 show dependencies of the ideality factor change after the pairing of interstitial iron $\delta n_{\text{Fe}-\text{FeB}}$ — see surfaces 3, blue. Since the association reaction leads to the depression of SRH recombination, it was expected that $n_{\text{FeB}} < n_{\text{Fe}}$ and $\delta n_{\text{Fe}-\text{FeB}} > 0$ at all the parameters values. The examples of such anticipated dependencies are shown in Figs. 4(b),(c) and 5(a). In this case, $\delta n_{\text{Fe}-\text{FeB}}$ increases with an increase in the boron concentration and does not practically depend on temperature and the iron concentration. Exceptions are only observed if the contribution of intrinsic recombination increases and the $\delta n_{\text{Fe}-\text{FeB}}$ decreases: see Fig. 4(b),(c)

at high temperature and low iron concentration or Fig. 5(a) at high doping level and slight concentration of trap.

However, it turned out that the case of $n_{\text{FeB}} > n_{\text{Fe}}$ is also possible — see Figs. 3, 4(a), 5(b). The regions of negative $\delta n_{\text{Fe}-\text{FeB}}$ value are observed in the vicinity of the ideality factor decrease, which is induced by the occupation of Fe_i level. The reason for $n_{\text{FeB}} > n_{\text{Fe}}$ could be the difference in the Fermi level location in the cases of lone unpaired Fe_i and Fe_iB_s and Fe_i coexistence. However, calculations have shown that such difference does not exceed 5×10^{-6} eV and cannot be the cause of the detected effect.

Figure 8 presents the spatial distributions of recombinantly active interstitial iron atoms before and after the pairs formation and transition to the dark equilibrium state. It is evident that the degree of decrease in the Fe_i^+ concentration depends on the distance to the pn -junction. In our opinion, the change in the $N_{\text{Fe}_i^+}$ profile is the reason for the rise of the ideality factor resistance to temperature and doping level in the case of Fe_iB_s and Fe_i coexistence. Note that the effect depends on the total iron concentration: the increase in N_{Fe} value leads to the n decay at a higher temperature (Fig. 4(a)) as well as at a lower boron concentration (Fig. 5(b)).

In turn, the $\delta n_{\text{Fe}-\text{FeB}}$ the value also depends on the iron concentration in the vicinity of $n_{\text{FeB}} > n_{\text{Fe}}$. As a result, $\delta n_{\text{Fe}-\text{FeB}}$, along with n_{Fe} and n_{FeB} , can be used to estimate the impurity concentration by the parameters of $I - V$ characteristic.

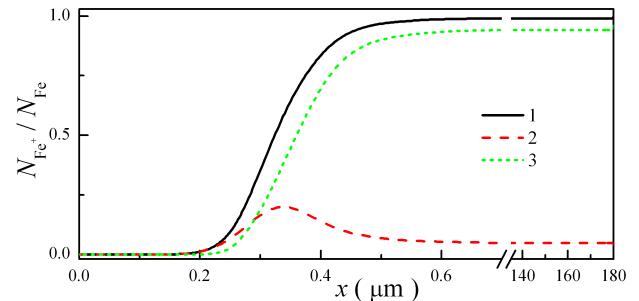


Fig. 8. The distribution of the fraction of positively charged interstitial iron $N_{\text{Fe}_i^+}$ to the total impurity number N_{Fe} in the structure base. Curves 1 and 2 correspond to the cases of lone unpaired Fe_i and Fe_iB_s and Fe_i coexistence, respectively. Curve 3 is the difference between 1 and 2. $T = 330$ K, $N_A = 3.162 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $d_p = 180 \mu\text{m}$

IV. CONCLUSION

The diode ideality factor of silicon $n^+ - p - p^+$ structure with iron contamination has been studied via computer simulation. The data used in the simulations were the following. The iron concentration ranged from 10^{10} to 10^{13} cm^{-3} , the acceptor doping level — from 10^{15} to 10^{17} cm^{-3} , the temperature — from 290 to 340 K, and the base thickness — from 150 to 240 μm . It has been shown that the temperature and doping level dependencies of

the ideality factor value are mainly determined by a hole occurring on the Fe_i level. The n dependence on iron concentration is a monotonic function. Additionally, not only the concentration of the defect but also its location influences the ideality factor value. The intrinsic recombination causes a decrease in the ideality factor value at a high temperature and doping level as well as at a low iron concentration. It has also been found that the base thickness influences the ideality factor if it exceeds the minority carrier diffusion length. An increase in the base thickness leads to a decrease in n value. The investigation has revealed that the ideality factor in the Fe_iB_s and Fe_i coexistence case can exceed the one in the lone unpai-

red Fe_i case. The ideality factor change after Fe_iB_s dissociation can be used for the contaminant concentration evaluation.

V. ACKNOWLEDGEMENTS

The work was supported by the National Research Foundation of Ukraine by the state budget finance (project 2020.02/0036 “Development of physical base of both acoustically controlled modification and machine learning-oriented characterization for silicon solar cells”).

-
- [1] K. Ishaque, Z. Salam, H. Taheri, Sol. Energy Mater. Sol. Cells **95**, 586 (2011); <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2010.09.023>.
 - [2] A. J. Bühler, A. Krenzinger, Prog. Photovoltaics Res. Appl. **21**, 884 (2013); <https://doi.org/10.1002/pip.2170>.
 - [3] O. Breitenstein, Opto-Electron. Rev. **21**, 259 (2013); <https://doi.org/10.2478/s11772-013-0095-5>.
 - [4] O. Olikh, Superlattices Microstruct. **117**, 173 (2018); <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2018.03.027>.
 - [5] J. Beier, B. Voss, in *Conference Record of the Twenty Third IEEE Photovoltaic Specialists Conference* (1993), p. 321; <https://doi.org/10.1109/PVSC.1993.347163>.
 - [6] K. McIntosh, P. Altermatt, G. Heiser, in *16th European Photovoltaic Solar Energy Conference: Proceedings of the International Conference and Exhibition* (Glasgow, 2000), p. 250.
 - [7] A. Kaminski *et al.*, in *Conference Record of the Twenty Fifth IEEE Photovoltaic Specialists Conference* (1996), p. 573; <https://doi.org/10.1109/PVSC.1996.564071>.
 - [8] Z. Hameiri, K. McIntosh, G. Xu, Sol. Energy Mater. Sol. Cells **117**, 251 (2013); <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2013.05.040>.
 - [9] A. S. H. van der Heide, A. Schonecker, J. H. Bultman, W. C. Sinke, Prog. Photovoltaics Res. Appl. **13**, 3 (2005); <https://doi.org/10.1002/pip.556>.
 - [10] L. Duan *et al.*, IEEE J. Photovoltaics **8**, 1701 (2018); <https://doi.org/10.1109/JPHOTOV.2018.2870722>.
 - [11] O. Olikh, Superlattices Microstruct. **136**, 106309 (2019); <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2019.106309>.
 - [12] A. V. Sachenko *et al.*, Tech. Phys. Lett. **44**, 873 (2018); <https://doi.org/10.1134/S1063785018100139>.
 - [13] J. Schmidt, Prog. Photovoltaics Res. Appl. **13**, 325 (2005); <https://doi.org/10.1002/pip.594>.
 - [14] W. Wijaranakula, J. Electrochem. Soc. **140**, 275 (1993); <https://doi.org/10.1149/1.2056102>.
 - [15] E. Hu *et al.*, Renew. Energy **77**, 442 (2015); <https://doi.org/10.1016/j.renene.2014.12.049>.
 - [16] A. Hamache, N. Sengouga, A. Meftah, M. Henini, Radiat. Phys. Chem. **123**, 103 (2016); <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2016.02.025>.
 - [17] G. Azzouzi, W. Tazibt, Energy Procedia **41**, 40 (2013); <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2013.09.005>.
 - [18] R. Pässler, Phys. Rev. B **66**, 085201 (2002); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.085201>.
 - [19] D. Yan, A. Cuevas, J. Appl. Phys. **116**, 194505 (2014); <https://doi.org/10.1063/1.4902066>.
 - [20] M. A. Green, J. Appl. Phys. **67**, 2944 (1990); <https://doi.org/10.1063/1.345414>.
 - [21] W. O’Mara, R. Herring, L. Hant, *Handbook of Semiconductor Silicon Technology* (Noyes Publications, New Jersey, 1990).
 - [22] R. Couderc, M. Amara, M. Lemiti, J. Appl. Phys. **115**, 093705 (2014); <https://doi.org/10.1063/1.4867776>.
 - [23] D. Klaassen, Solid-State Electron. **35**, 953 (1992); [https://doi.org/10.1016/0038-1101\(92\)90325-7](https://doi.org/10.1016/0038-1101(92)90325-7).
 - [24] R. Hull, *Properties of Crystalline Silicon* (Institution of Engineering and Technology, London, 1999).
 - [25] H. T. Nguyen, S. C. Baker-Finch, D. Macdonald, Appl. Phys. Lett. **104**, 112105 (2014); <https://doi.org/10.1063/1.4869295>.
 - [26] P. P. Altermatt, J. Schmidt, G. Heiser, A. G. Aberle, J. Appl. Phys. **82**, 4938 (1997); <https://doi.org/10.1063/1.366360>.
 - [27] S. Rein, S. W. Glunz, J. Appl. Phys. **98**, 113711 (2005); <https://doi.org/10.1063/1.2106017>.
 - [28] J. D. Murphy, K. Bothe, M. Olmo, V. V. Voronkov, R. J. Falster, J. Appl. Phys. **110**, 053713 (2011); <https://doi.org/10.1063/1.3632067>.
 - [29] H. Kohno, H. Hieslmair, A. A. Istratov, E. R. Weber, Appl. Phys. Lett. **76**, 2734 (2000); <https://doi.org/10.1063/1.126459>.
 - [30] F. E. Rougier, C. Sun, D. Macdonald, Sol. Energy Mater. Sol. Cells **187**, 263 (2018); <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2018.07.029>.
 - [31] B. B. Paudyal, K. R. McIntosh, D. H. Macdonald, in *34th IEEE Photovoltaic Specialists Conference (PVSC)* (2009), p. 1588.
 - [32] A. A. Istratov, H. Hieslmair, E. Weber, Appl. Phys. A Mater. Sci. Proc. **69**, 13 (1999); <https://doi.org/10.1007/s003390050968>.
 - [33] M. Burgelman, P. Nollet, S. Degrave, Thin Solid Films **361–362**, 527 (2000); [https://doi.org/10.1016/S0040-6090\(99\)00825-1](https://doi.org/10.1016/S0040-6090(99)00825-1).
 - [34] K. Decock, S. Khelifi, M. Burgelman, Thin Solid Films **519**, 7481 (2011); <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2010.12.039>.
 - [35] M. Cappelletti, G. Casas, A. Cédola, E. Peltzer y Blancá, B. M. Soucase, Superlattices Microstruct. **123**, 338 (2018); <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2018.09.023>.
 - [36] M. Mostefaoui, H. Mazari, S. Khelifi, A. Bouraiou, R. Dabou, Energy Procedia **74**, 736 (2015); <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2015.07.809>.

- [37] C.-H. Huang, W.-J. Chuang, Vacuum **118**, 32 (2015); <https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2015.03.008>.
- [38] F. Azri, A. Meftah, N. Sengouga, A. Meftah, Solar Energy **181**, 372 (2019); <https://doi.org/10.1016/j.solener.2019.02.017>.
- [39] B. Zhao, J. Zhou, Y. Chen, Physica B Cond. Mat. **405**, 3834 (2010); <https://doi.org/10.1016/j.physb.2010.06.012>.
- [40] K. Yu, J. Liang, B. Qu, X. Chen, H. Wang, Energy Convers. Manag. **150**, 742 (2017); <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2017.08.063>.

МОДЕЛЮВАННЯ ФАКТОРА НЕІДЕАЛЬНОСТІ В $n^+ - p - p^+$ -Si-СТРУКТУРАХ

О. Я. Оліх, О. В. Завгородній

*Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
вул. Володимирська, 64/13, Київ, 01601, Україна*

У цій роботі подано результати моделювання величини фактора неідеальності кремнієвих $n^+ - p - p^+$ -структур. При цьому вважалося, що основні рекомбінаційні центри в базі структури пов'язані з домішковими атомами заліза. Для моделювання вольт-амперних характеристик таких структур використано Solar Cells Capacitance Simulator (SCAPS). При цьому додатково враховували температурні залежності параметрів як матеріалу, так і дефектів. Під час розрахунків варіювалися величини рівня легування ($10^{15} \div 10^{17}$ см $^{-3}$ атомів бору) та товщини (150 \div 240 мкм) бази, температура (290 \div 340 К) та концентрації домішки заліза ($10^{10} \div 10^{13}$ см $^{-3}$). окремо розглядали випадки, коли всі атоми заліза перебували в міжвузольному положенні Fe_i та коли переважна частина з них утворювала пари з легуючою домішкою Fe_iB_s . Останній випадок відповідає стану рівноваги за відсутності освітлення і при цьому співвідношення між концентраціями Fe_i та Fe_iB_s визначалося положенням рівня Фермі та температурою. Визначення величини фактора неідеальності (n) відбувалося апроксимацією (з використанням метаєвристичного методу IJAVA) отриманих вольт-амперних характеристик.

Показано, що навіть за наявності Fe_iB_s основну роль у формуванні величини n відіграють процеси рекомбінації за участю рівнів, пов'язаних з Fe_i . Залежності n від температури та рівня легування визначають, насамперед, заселеністю рівня Fe_i . Коли підсилюється відносний внесок процесів власної рекомбінації (високі температури та рівень легування, низькі концентрації домішки), відбувається зменшення фактора неідеальності. На величину n , окрім концентрації дефектів, впливає також їх просторове розташування щодо $p - p^+$ -переходу. Зі збільшенням товщини бази структури (коли вона перевищує довжину дифузії неосновних носіїв та коли переважає рекомбінація Шоклі–Ріда–Голла) відбувається незначне зменшення фактора неідеальності. Показано, що можуть реалізуватися випадки, коли n після розпаду Fe_iB_s зменшується. Запропоновано, що зміна фактора неідеальності після розпаду Fe_iB_s , поряд з абсолютним значенням n , може бути використана для оцінки концентрації домішок.

Ключові слова: фактор неідеальності, кремній, $n^+ - p - p^+$ -структура, SCAPS, концентрація заліза.