

УДК 537.9; 537.37; 538.935; 548.4; 004.94

УКПП 72.19.13

№ ДР 0119U100303

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  
“ \_\_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 2020 р.

ЗВІТ  
ПРО ВИКОНАННЯ НАУКОВОГО ДОСЛІДЖЕННЯ І РОЗРОБКИ ЗА  
РАХУНОК ГРАНТОВОЇ ПІДТРИМКИ

Розробка фізичних засад акусто-керованої модифікації та машинно-орієнтованої характеристики кремнієвих сонячних елементів

ФОРМУВАННЯ МАТЕРІАЛЬНОЇ ТА РОЗРАХУНКОВОЇ БАЗИ ПРОЄКТУ,  
МОДЕЛЮВАННЯ ВОЛЬТ-АМПЕРНИХ ХАРАКТЕРИСТИК

n<sup>+</sup>-p-p<sup>+</sup> СТРУКТУР

(проміжний)

№ 20ДФ051-10

Декан фізичного факультету  
докт. фіз.-мат. наук, професор

М.В. Макарець

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

О.Я. Оліх

Головний метролог

В.В. Гостєв

2020

Розглянуто та прийнято Вченою радою університету,  
протокол № \_\_\_\_ від “ \_\_\_\_ ” \_\_\_\_\_ 20 р.

## СПИСОК АВТОРІВ

Науковий керівник, доцент, докт. фіз.-мат. наук, доцент	О.Я. Оліх (вступ, висновки, реферат, розділ 1, підрозділи 2.1, 2.2)
Завідувач лабораторії, докт. фіз.-мат. наук, професор	В.П. Костильов (підрозділи 2.3, 2.4; Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України)
Наук. співроб., канд. фіз.-мат. наук	В.М. Власюк (підрозділи 2.1, 2.3; Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України)
Наук. співроб., канд. техн. наук	Р.М. Коркішко (підрозділи 2.3, 2.4; Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України)
Аспірант	О.В. Лозицький (підрозділ 1.2)
Аспірант	К.О. Майко (підрозділ 1.1)
Студент	А.Р. Костина (підрозділ 2.1)

## РЕФЕРАТ

Звіт про виконання наукового дослідження і розробки за рахунок грантової підтримки: 69 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  $n^+-p-p^+$  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  $n^+-p-p^+$  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<sup>-3</sup>) при варіації концентрації домішкового заліза в інтервалі  $10^{10}\div 10^{13}$  см<sup>-3</sup> для температурного діапазону  $290\div 340$  К; при цьому враховано можливість перебування домішкових атомів заліза у міжвузольному стані та у складі пари FeV. 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 заміщуючий 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 товщинами, 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-ампері 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 пристроїв.

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 використанні додаткового легування атомами нікелю (Ташкентський державний технічний університет, Узбекистан, М.К. Бахадирханов, С.Б. Ісамов, З.Т. Кенжаєв, 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 напівпровідникових 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. Джаїн, 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 проєкту із виконання наукових досліджень і розробок 2020.02/0036 «Розробка фізичних засад акусто-керованої модифікації та машинно-орієнтованої характеристики 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 ( $10^{15} \div 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ) бази при варіації концентрації домішки в інтервалі  $10^{10} \div 10^{13} \text{ см}^{-3}$  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 Проєкту в цілому є розробка фізичних засад 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 $n^+p\text{-}p^+$ СТРУКТУР

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

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

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

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

цілком справедливе для діапазону температур, що розглядався в роботі.

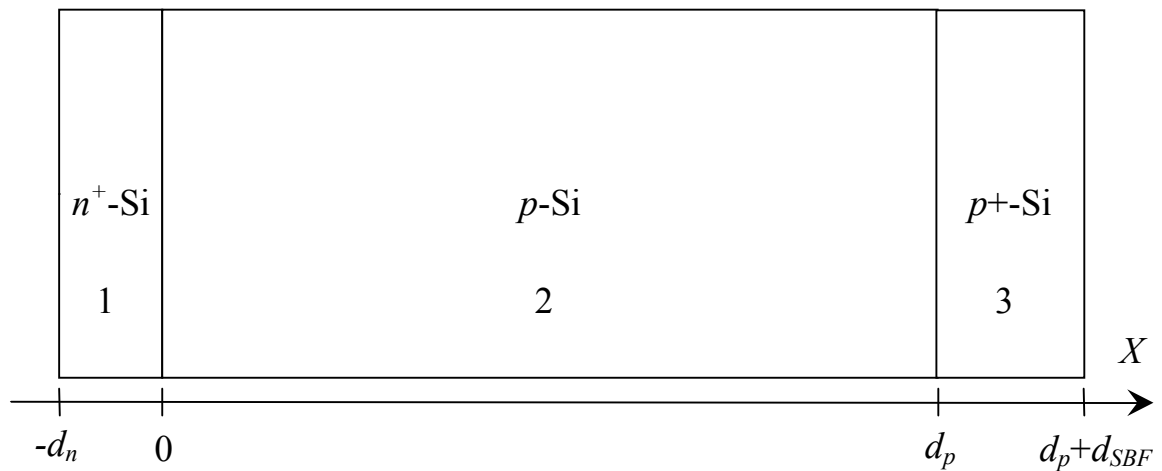


Рисунок 1.1 – Геометрія структури, використаної у розрахунковій моделі. 1 – емітер, 2 – база, 3 – шар ПЗП

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

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

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

де

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

$T$  – температура, К,

$\alpha = 3,23 \cdot 10^{-4}$  еВ/К,

$\Theta = 446$  К,

$\Delta = 0,51$ .

При цьому враховувалось звуження забороненої зони  $\Delta E_G$  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  $\text{м}^{-3}$ , 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,  $\text{м}^{-3}$ ,

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

де

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

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

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

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

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

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

де

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

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

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

де

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

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

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

$\sigma_n$  та  $\sigma_p$  – поперечні перерізи захоплення дефектом електронів та дірок, відповідно,  $\text{м}^2$ ;

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

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

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

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

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

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

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

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

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

де

$E_F$  – положення рівня Фермі.

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

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

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

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

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

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

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

де

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

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

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

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

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

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

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

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

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

- можливість задавати товщину та рівень легування для кожного з шарів



$n^+p\text{-}p^+$  структури;

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

заряду залежно від температури відповідно до (1.8).

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

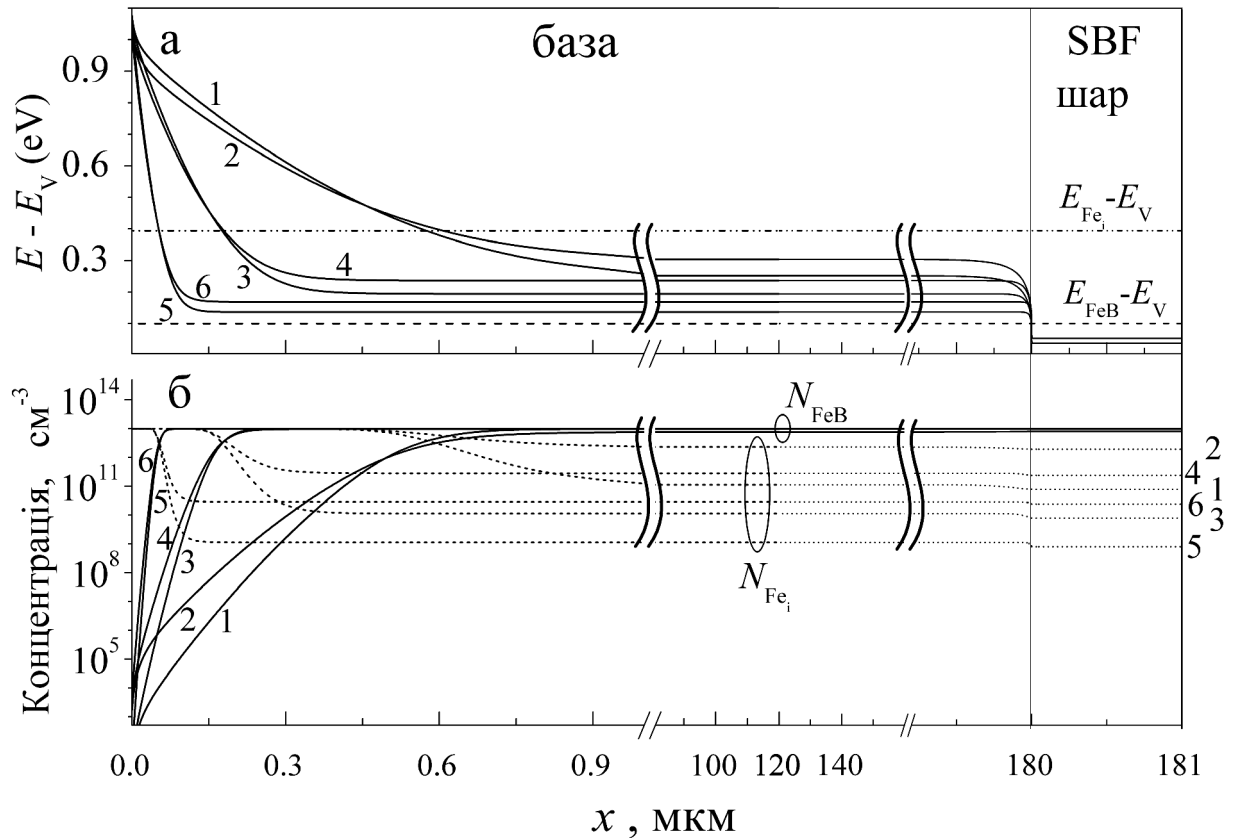
Як видно з формули (1.20), у випадку співіснування міжвузольних атомів заліза та пар  $\text{Fe}_i\text{B}_s$ , співвідношення їхніх концентрацій залежить від положення рівня Фермі. Тому для такого випадку спочатку за допомогою програмного пакету SCAPS розраховувалося положення рівня Фермі у структурі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

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

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

В роботі проводилося моделювання прямої гілки вольт-амперної

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



Рисинок 1.2 - Розраховані залежності для бази та ПЗП шару положення рівня Фермі (а, суцільні лінії), концентрації міжвузольних атомів заліза (б, суцільні лінії) та пар  $\text{Fe}_i\text{B}_s$  (б, пунктир) при нульовому зміщенні.  $N_A$ ,  $\text{cm}^{-3}$ :  $10^{15}$  (криві 1 та 2),  $10^{16}$  (3 та 4),  $10^{17}$  (5 та 6).  $T$ , К: 290 (1, 3, 5), 340 (2, 4, 6).  $N_{Fe} = 10^{13}$   $\text{cm}^{-3}$ .  $d_p = 180$   $\mu\text{m}$ . В частині (а) також показані положення донорних рівнів, пов'язаних з міжвузольним залізом (штрих-пунктирна лінія) та парою  $\text{Fe}_i\text{B}_s$  (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 елемента. У зв'язку з цим отримані в результаті моделювання ВАХ можна

розділити на декілька наборів.

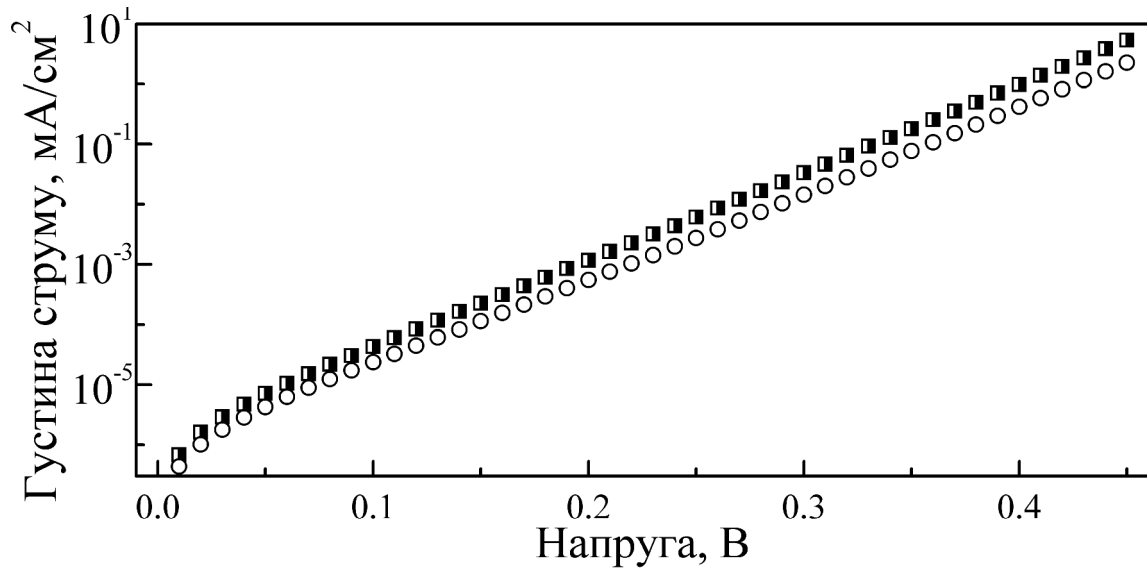


Рисунок 1.3 – Модельовані вольт-амперні характеристики кремнієвої  $n^+p-p^+$  структури за наявності лише неспарених міжвузольних атомів заліза (кола) та одночасної присутності пар  $\text{Fe}_i\text{B}_s$  та  $\text{Fe}_i$  (квадрати).  $N_A = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ,  $N_{Fe} = 10^{13} \text{ см}^{-3}$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

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

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

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

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

За результатами аналізу залежності вигляду ВАХ від параметрів структури підготовлена стаття (О.Ya. Olikh, O.V. Zavhorodnii, «Modeling of ideality factor value in  $n^+p-p^+-\text{Si}$  structure», прийнята до друку у журналі Journal of Physical Studies).

Інші набори ВАХ призначені для перевірки ефективності роботи

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

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

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

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

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

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

$N_A, \text{см}^{-3}$	$N_{\text{Fe}}$	$d_p, \text{мкм}$	$T, \text{К}$	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.

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

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

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



Кінець таблиці 1.5.

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

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

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

Кінець таблиці 1.6.

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

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

### 1.3 Основні результати розділу 1

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

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

## **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 Пельтьє, 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°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 першого. Датчик підтримує I2C інтерфейс. Керування температурою термостату здійснюється з використанням програмно реалізованого пропорційно-інтегрально-диференційного контролера, що

дозволяє підтримувати необхідну температуру зразка в діапазоні  $280 \div 360$  К з точність до 0,05 К.

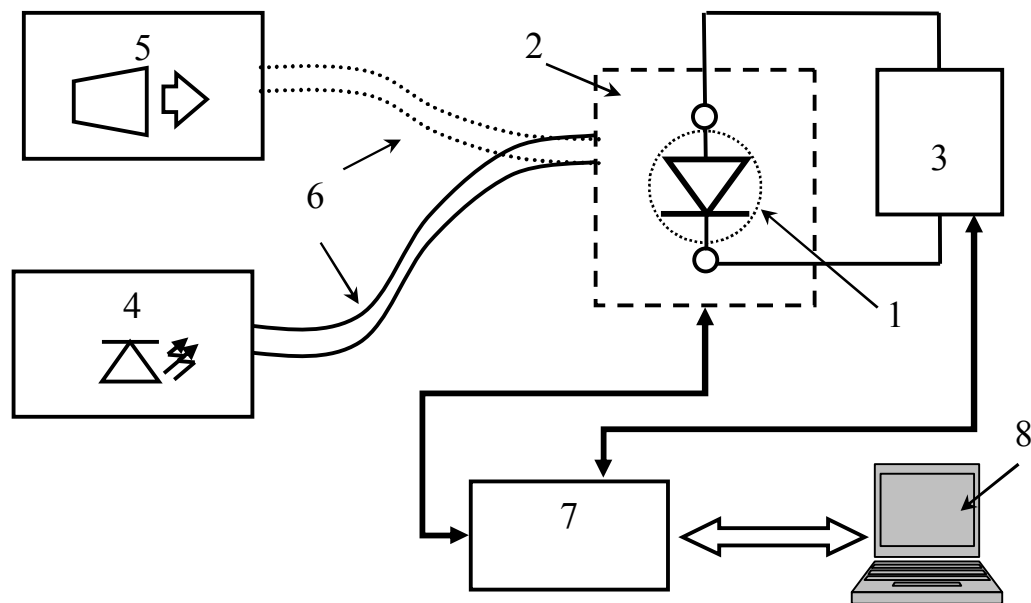


Рисунок 2.1 – Схема експериментального стенду. 1 – DUT, 2 – термостат, 3 – блок вимірювання ВАХ, 4 – джерело світла малої інтенсивності, 5 – джерело світла високої інтенсивності, 6 – світловід, 7 – комутатор сигналів, 8 – персональний комп'ютер

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 B7-21A або блок на базі монітора струму та потужності INA226 (16 розрядів, підтримка протоколу I2C), для вимірювання напруги – вольтметр B7-21 або блок на основі аналогово-цифрового перетворювача ADS115 (16 розрядів, інтерфейс I2C). Для пристроїв серії B7-21 організовано автоматичне зчитування показань з використанням інтерфейсу SPI.

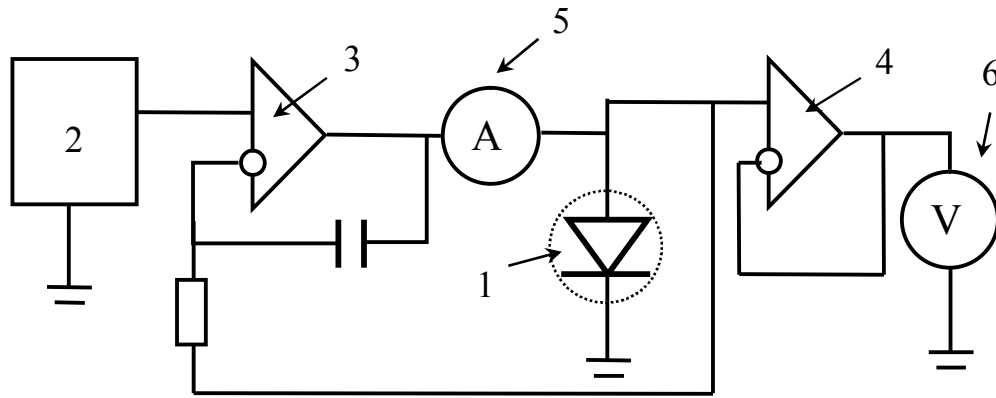


Рисунок 2.2 – Схема блоку вимірювання ВАХ. 1 – DUT, 2 – джерело напруги, 3, 4 – операційні підсилювачі, 5 – вимірювач струму, 6 – вимірювач напруги

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, спектр якого, згідно з паспортними даними, наближається до спектру абсолютно чорного тіла з температурою 5000-7000 K, тобто достатньо близький до спектру Сонця. 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  $0,1^{\circ}\text{C}$  в діапазоні від  $-9,9^{\circ}\text{C}$  до  $99,9^{\circ}\text{C}$ , 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  $I_{LED} \text{ (мА)} = -1,25 + 253,9 U_{ЦАП} \text{ (В)}$ .

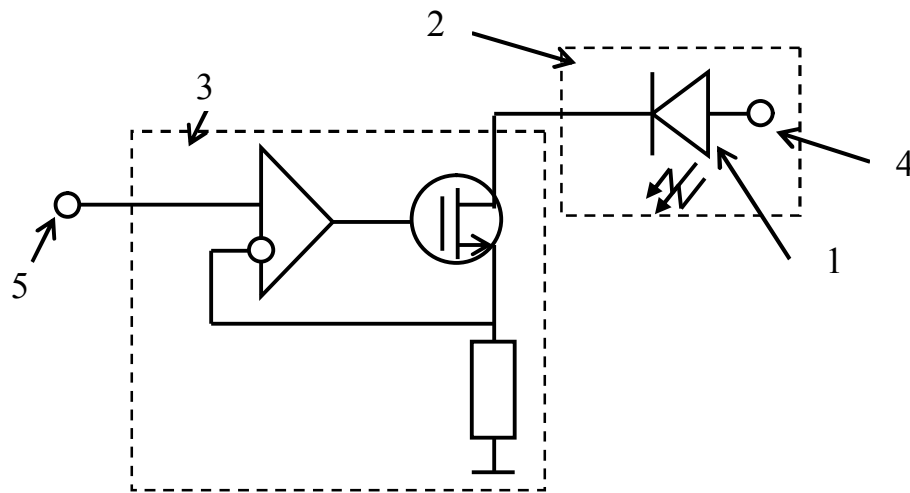


Рисунок 2.3 – Схема джерела світла низької інтенсивності.

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 описуваному 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.

Комутуючий 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 Ом·см.

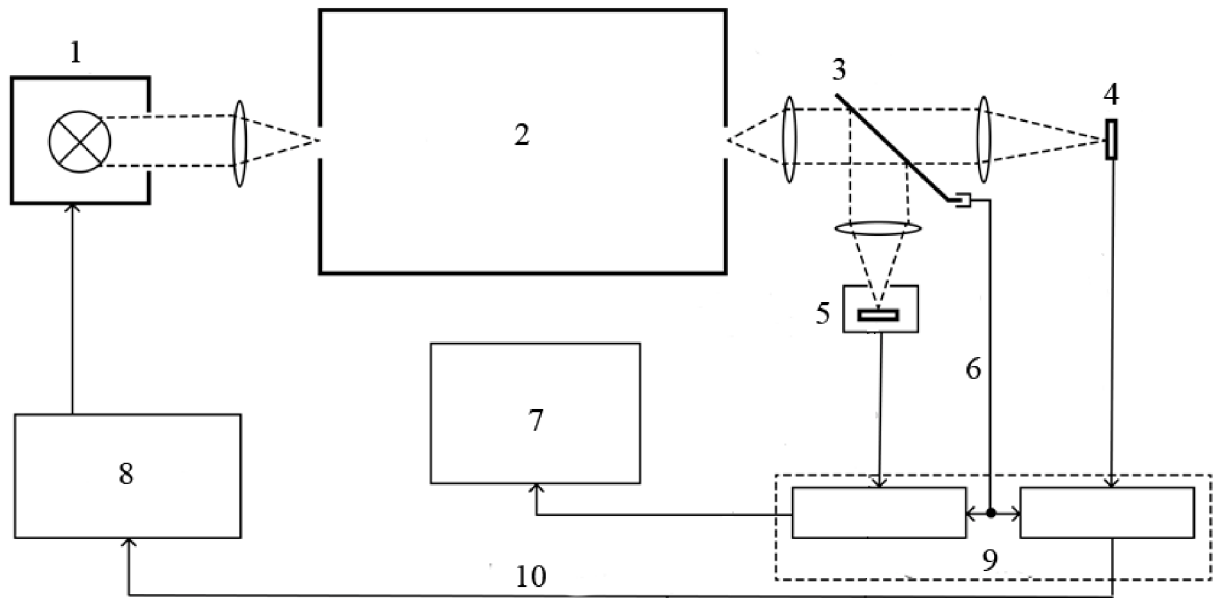


Рисунок 2.4 – Схема установки для вимірювання спектральних характеристик фотоперетворювачів. 1 – галогенова лампа; 2 – монохроматор; 3 – подільник пучка світла із системою фокусування; 4 – еталон; 5 – досліджуваний зразок; 6 – опорний сигнал; 7 – комп'ютер; 8 – блок живлення із системою зворотнього зв'язку;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

Процес виготовлення КСЕ включав дифузію фосфору на фронтальну фотоприймальну поверхню для створення розділяючого бар'єра ( $n^+p$  – переходу) 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  $\text{SiO}_2$  товщиною 30 нм і нітриду кремнію  $\text{Si}_3\text{N}_4$  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 залученням 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 міжвузольний 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:

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

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  $1,06 \cdot 10^{16} - \text{мкм}^2 \cdot \text{см}^{-3}$ , а довжин дифузії надлишкових носіїв струму - мкм.

Згодом з'явилися роботи, де було запропоновано використовувати для розвалювання пар FeV світло з енергією кванта, що перевищує ширину забороненої зони кремнію (1,124 eV) [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

$\tau_{SRH}^p$  - 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			
$90^{\circ}\text{C}$	немає	$\geq 3 \text{ хв}$	$\text{Fe}_i + \text{B} \rightarrow \text{Fe}_i\text{B}$
			Стан В сталий
Активація світло-індукованої деградації			
$120^{\circ}\text{C}$	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			
$25^{\circ}\text{C}$	1 Сонце, спалах (10х)	10 x 10 с	$\text{Fe}_i\text{B} \rightarrow \text{Fe}_i + \text{B}$
			Стан В сталий

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  $\text{Fe}_i$  (криві 1 і 2) швидко зростає, в той час як для  $\text{FeB}$  – залишається постійним, або слабо 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.

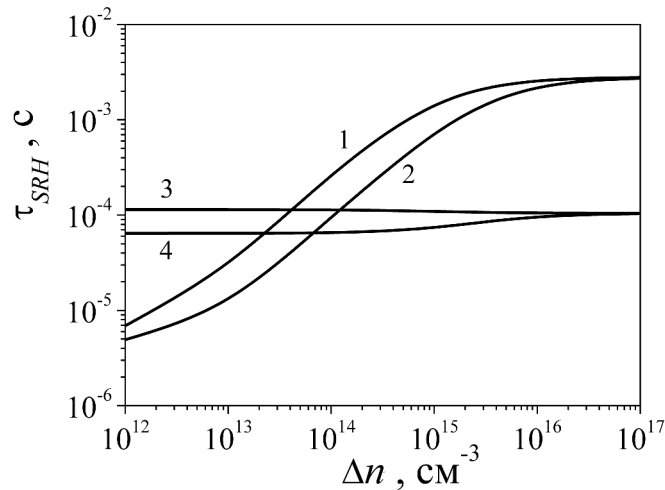


Рисунок 2.5 – Залежності часів життя ШРХ в базі КСЕ від рівня збудження, обумовлених  $\text{Fe}_i$  (1,2) і  $\text{FeV}$  (3,4). Концентрація рекомбінаційних центрів заліза  $N_t = 3 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ , рівень легування (бор)  $N_A = 10^{15}$  (1, 3) та  $3 \cdot 10^{15}$  (2,4).  $T =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

Таким чином, для вимірювання кінетики світлоіндукованих процесів в КСЕ при виконанні проєкту пропонується використовувати відпали  $200^\circ\text{C}$  протягом 2 хв та при  $90^\circ\text{C}$  протягом 3 хв. для відновлення максимального часу життя у КСЕ. При таких обробках відбувається зв'язування заліза у пари  $\text{FeV}$  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 ( $\Delta n \approx 5 \cdot 10^{11} - 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ ), оскільки як уже згадувалося, із збільшенням рівня збудження час життя ШРХ для швидко зростає, в той час як для  $\text{FeV}$  – залишається постійним, або слабо зменшується. При освітленні імпульсом лампи-спалаху будуть призводити до послідовного розпаду пар  $\text{FeV}$

і утворенні  $Fei$ . Внаслідок цієї перебудови дефектної структури буде зменшуватись ефективний час життя  $\tau_{SRH}$ , (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 дводіючої 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 квазі-нейтральній 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.

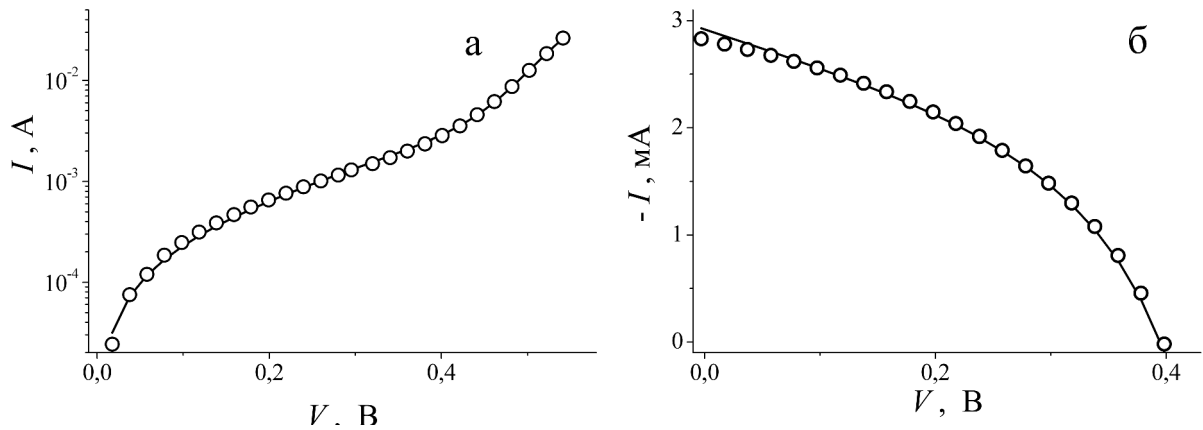


Рисунок 2.6 – Темнова (а) та світлова (б) вольт-амперні характеристики КСЕ. Точки – експеримент, лінії – апроксимація за формулою (2.4). Зразок 212.  $T = 320 \text{ K}$

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, виміряної 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  $\tau$ , виміряний через час  $t$  після дисоціації пар FeV (за умови, що зразок не перебуває під дією інтенсивного освітлення) має описуватися виразом

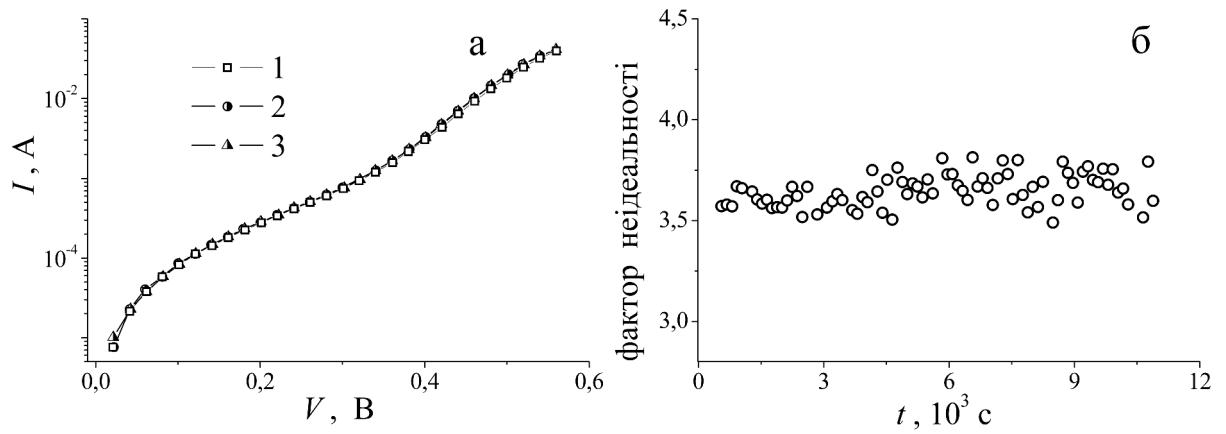


Рисунок 2.6 – Темнові ВАХ (а), виміряні через 148 (крива 1), 498 (2) та 8098 (3) с після інтенсивного освітлення та залежність фактору неідеальності від часу після освітлення (б). Зразок 116.  $T = 320$  К

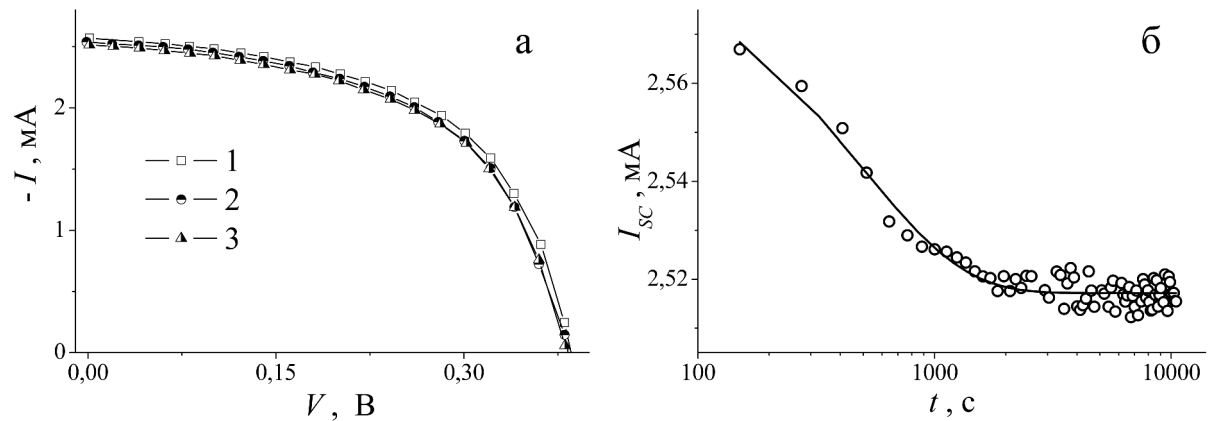


Рисунок 2.7 – Світлові ВАХ (а), виміряні через 150 (крива 1), 500 (2) та 8100 (3) с після інтенсивного освітлення та залежність струму короткого замикання від часу після освітлення (б). Зразок 116.  $T = 320$  К. У частині б точки – експеримент, лінія – апроксимація за формулою (2.5)

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

де

$A_{\infty}$  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 спостерігалось 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 FeV.

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 не 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).

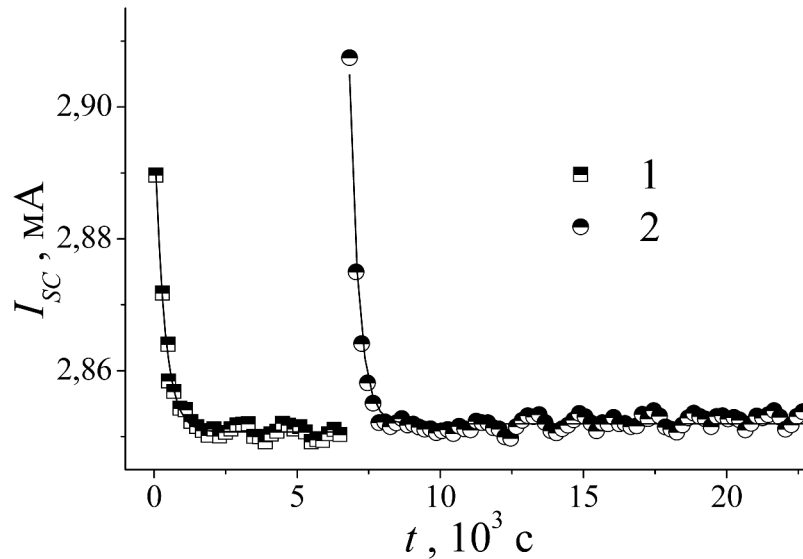


Рисунок 2.9 – Кінетичні залежності величини струму короткого замикання після припинення інтенсивного освітлення тривалістю 180 с (крива 1) та 300 с (2). Зразок 212.  $T = 320$  К. Точки – експеримент, лінія апроксимація за формулою (2.5)

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

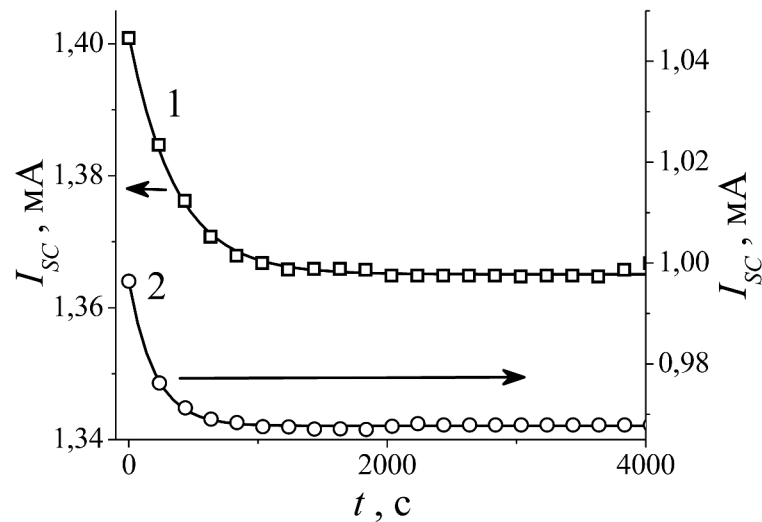


Рисунок 2.10 – Кінетичні залежності величини струму короткого замикання після припинення інтенсивного освітлення тривалістю 300 с. Зразок 115.  $T$ , К: 300 (1), 320 (2). Точки – експеримент, лінія апроксимація за формулою (2.5)

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  $\lambda$  визначається в нм,

спектральна залежності 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 представлені 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  $\eta$ .

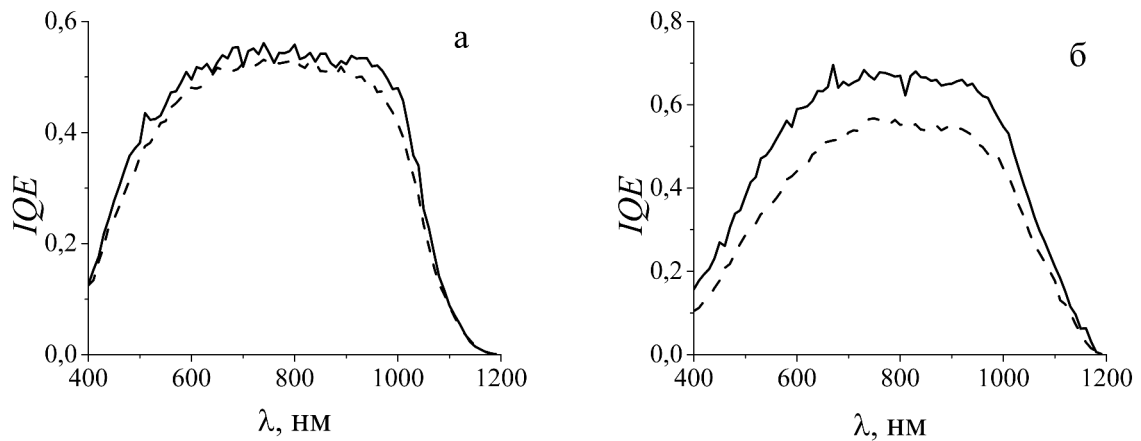


Рисунок 2.11 – Спектральні характеристики внутрішнього квантового виходу зразків 212 (а) та 100 (б). Суцільна лінія – для вихідного зразка; пунктирна лінія – після відпалу при температурі 210°C протягом 3 (а) та 10 (б) хв

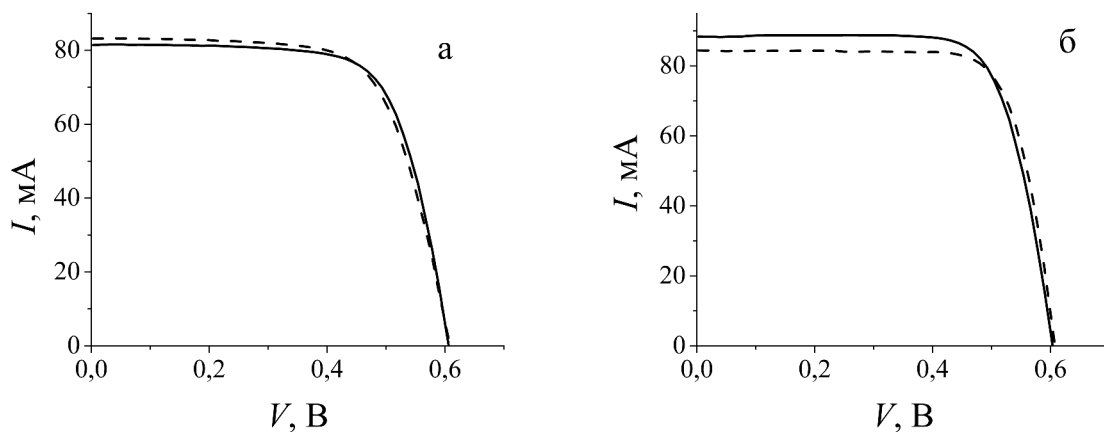


Рисунок 2.12 – Світлові ВАХ зразків 212 (а) та 100 (б). Суцільна лінія – для вихідного зразка; пунктирна лінія – після відпалу при температурі 210°C протягом 3 (а) та 10 (б) хв

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	$FF$ , %	$\eta$ , %
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  $FeV$  і  $Fe_i$  – див. рис.2.5. У цьому випадку час життя пов'язаний з рекомбінаційним центром  $FeV$  більший ніж час життя обумовлений міжвузольним рекомбінаційним центром  $Fe_i$ , а сама залежність часу життя від рівня збудження для рекомбінаційного центру  $FeV$  є слабо вираженою на відміну від залежності для рекомбінаційного центру  $Fe$  в міжвузлі, яка є досить стрімкою. Тому термообробка ініціює розпад  $FeV$  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  $FeV$  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  $FeV$  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 проєкту 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 міжвузольне залізо  $Fe_i$  і пари  $FeV$  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.

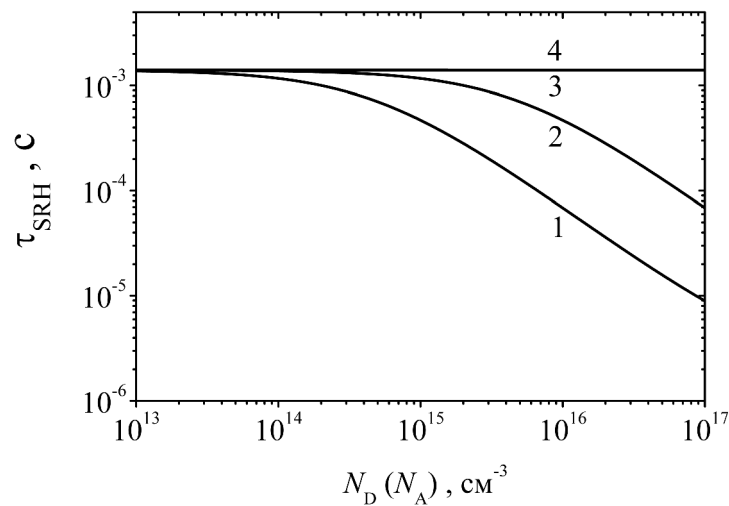


Рисунок 2.13 – Залежності часу життя ШРХ від рівня легування бази КСЕ: криві 1 і 2 – для бази  $p$ -типу, 3 і 4 – для бази  $n$ -типу.  $\Delta n$ , см<sup>-3</sup>:  $5 \cdot 10^{14}$  (криві 1 та 3),  $5 \cdot 10^{15}$  (2, 4). При розрахунках вважалося, що Параметри рекомбінаційного рівня заліза: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

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<sup>-3</sup>) відповідають точці максимального відбору потужності і режиму розімкненого кола.

Таким чином, підбір КСЕ та пластин кремнію, необхідних для виконання експериментальних досліджень, проводився з врахуванням відзначеного 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  $10^{16} \text{ см}^{-3}$  (питомий опір 1,5 – 15 Ом·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  $IQE(\lambda)$  - рис.2.14. Після визначення довжини дифузії до та після термообробки, 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  $3,14 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$ .

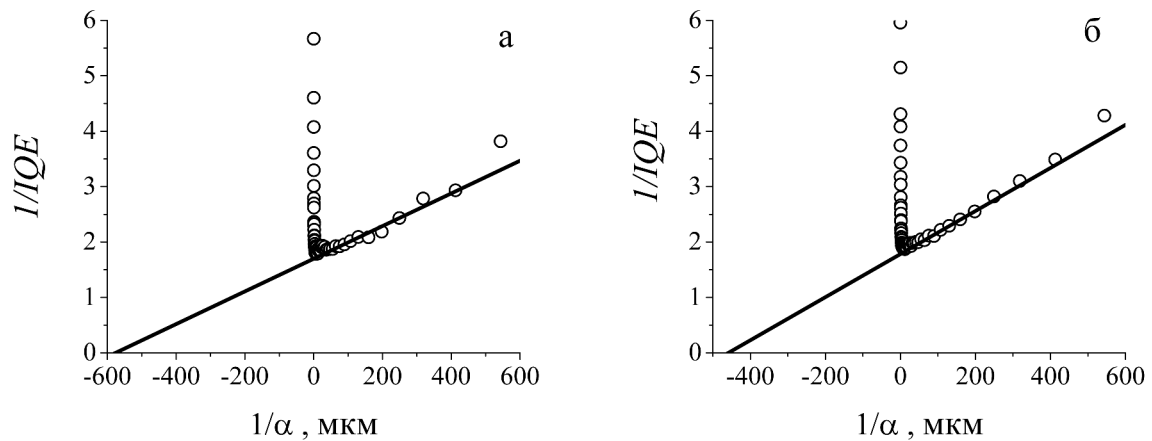


Рисунок 2.14 – Ілюстрація визначення довжини дифузії нерівноважних носіїв заряду в КСЕ. Зразок 212 до (а) та після (б) відпалу при температурі 210°C протягом 10 хв

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 <sup>-3</sup>
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

1. 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  $900\div 980$  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 FeV 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 абсолютних змін від тривалості інтенсивного освітлення та характерного часу від температури) співпадають з відомими закономірностями перебудови (розпаду) дефектних комплексів, що містять міжвузольне залізо та заміщуючий 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<sup>-3</sup>) бази при варіації концентрації домішкового заліза в інтервалі  $10^{10}\div 10^{13}$  см<sup>-3</sup> для температурного діапазону  $290\div 340$  К, а також які враховують можливість перебування домішкових атомів заліза у міжвузольному стані та у складі пари FeV.
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 заміщуючий 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<sup>+</sup>-p-p<sup>+</sup> 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<sup>+</sup> silicon heavily doped with boron / D. Yan, A. Cuevas // Phys. Rev. B. – 2014. – Vol. 116. – P. 194505.
- 6 Green M. A. Intrinsic concentration, effective densities of states, and effective mass in silicon / M.A. Green // J. Appl. Phys.. – 1990. – Vol. 67. – P. 2944-2954.
- 7 Couderc R. Reassessment of the intrinsic carrier density temperature dependence in crystalline silicon / R. Couderc, M. Amara, M. Lemiti // J. Appl. Phys. – 2014. – Vol. 115. – P. 093705.
- 8 Klaassen D.B.M. A unified mobility model for device simulation - I. Model equations and concentration dependence / D.B.M. Klaassen // Solid-State Electron. – 1992. – Vol. 35. – P. 953-959

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

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

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

## ДОДАТОК А

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

20ДФ051-10

## Modeling of ideality factor value in $n^+p-p^+$ -Si structure

O.Ya. Olikh, O.V. Zavhorodnii

<https://orcid.org/0000-0003-0633-5429> (Olikh)

*Taras Shevchenko National University of Kyiv*

*64/13, Volodymyrska Street, City of Kyiv, Ukraine, 01601*

*e-mail: olikh@univ.kiev.ua*

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  $10^{10} - 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ , acceptor doping level range of  $10^{15} - 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , temperature range of 290 – 340 K, and 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  $\text{Fe}_i$  and  $\text{Fe}_i\text{B}_s$ . It has been shown that the ideality factor value determined by a hole occurring on the  $\text{Fe}_i$  level, a trap location, and an intrinsic recombination contribution. The increase in base thickness leads to decrease in  $n$  value. The sign of change in ideality factor after  $\text{Fe}_i\text{B}_s$  dissociation depends on temperature, doping level, and iron concentration.

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

## 1 Introduction

In the 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 single diode model with three parameters has been used to represent the SC static characteristic because of simplicity:

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

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

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

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

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



where first term closely related to the recombination in the quasi-neutral region, 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. Певні приклади щодо взаємозв'язку  $n$  з напругою холостого ходу та fill factor рамках дво-діодної моделі можна знайти в [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].

One of the main obstacles of such a convenient and express method developing is the multiparameter relationship between the  $n$  value and the concentration of recombination centers. This paper attempts to get over 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, the iron atoms are one of the most common as well as the most harmful impurities in 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 recombination center state should lead to a change in a ideality factor value, that is easy to obtain experimentally and to use to SC characterization. Therefore, the paper also pays attention to dependencies of  $n$  value change.

## 2 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 hole conductivity and thickness  $d_p$  and the  $p^+$  layer with thickness  $d_{BSF}$  intended to back surface field (BSF) creation. BSF-layer is designed to increase the photovoltaic converter efficiency by reducing the losses concerned with 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 bandgap was calculated according to 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].

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

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

The dark forward dark  $I - V$  characteristic 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 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.

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

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

Eq. (4) corresponds to the dark double diode model with neglected both series and shunt resistances. The first diode represents the “ideal” diode, describing the so-called diffusion current characterized by a 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  $\text{Fe}_i$  the following value were calculated:  $n_{\text{Fe}}^{\text{srh}}$  is the ideality factor if the SRH recombination was taken into account only;  $n_{\text{Fe}}$  is the ideality factor if the both SRH recombination and intrinsic recombination were allowed;  $\delta n_{\text{Fe}}^{\text{srh}} = n_{\text{Fe}}^{\text{srh}} - n_{\text{Fe}}$  characterizes the influence of intrinsic recombination on ideality factor value. In the case of  $\text{Fe}_i\text{B}_s$  and  $\text{Fe}_i$  coexistence the  $n_{\text{FeB}}^{\text{srh}}$ ,  $n_{\text{FeB}}$ ,  $\delta n_{\text{FeB}}^{\text{srh}} = n_{\text{FeB}}^{\text{srh}} - n_{\text{FeB}}$  were calculated (indices had the same meaning). Besides, the change of the ideality factor after  $\text{Fe}_i\text{B}_s$  association  $\delta n_{\text{Fe}-\text{FeB}} = n_{\text{Fe}} - n_{\text{FeB}}$  was calculated as well.

### 3 Results and discussion

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

It should paid attention to Fig. 2 before a discussion of obtained dependencies. Firstly, the presented data testify to the primary role of unpaired interstitial iron in recombination even in the case of  $\text{Fe}_i\text{B}_s$  and  $\text{Fe}_i$  coexistence. In fact, donor  $E_{\text{FeB}}^{\text{D}}$  level is below Fermi level and therefore its probability of capture of non-equilibrium electron is small. Additionally, the ideality factor value above all associated with a SCR recombination and the  $\text{Fe}_i$  concentration exceeds the  $\text{Fe}_i\text{B}_s$  concentration in 2/3 thickness of space charge region. And it is confirmed by the similarity of dependencies of  $n_{\text{FeB}}$  (surfaces 1, red) and  $n_{\text{Fe}}$  (surfaces 2, cyan) on Figs. 3–5. Secondly, the unpaired iron atom concentration can be big enough in the case of  $\text{Fe}_i\text{B}_s$  and  $\text{Fe}_i$  coexistence as well and it increases with temperature rise and decrease in doping level. For example, the  $\text{Fe}_i$  concentration in the quasi-neutral region of base reaches 23 (or 3) percent of  $N_{\text{Fe}}$  at  $T = 340$  K and  $N_{\text{A}} = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  (or  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ). 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 ones under illumination and  $N_{\text{Fe}} = 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ . Finally, as only ionized iron  $\text{Fe}_i^+$  (unlike to neutral iron  $\text{Fe}_i^0$ ) actively takes part in the SRH recombination, then these processes efficiently occur at  $x \geq 0.6W_p$  (where  $W_p$  is the SCR depth). And the area of processes, which determines ideality factor value, shifts away from the  $p - n$  junction with increase in doping level.

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

i) The occurring of hole on the  $\text{Fe}_i$  level, which determines the recombination efficiency. Accordingly to the Fermi–Dirac statistics, the probability of hole occupation in a non-degenerate  $p$ -type semiconductor with full acceptor depletion can be expressed as

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

It has been shown earlier [4] the  $f_p(T, N_{\text{A}})$  dependence is generally similar to observed dependence of ideality factor dependence. In particular, if  $f_p$  is close to one (high  $N_{\text{A}}$  value and low temperature), this dependence changes slowly,  $n$  does not depend on temperature and slowly rises with increase in doping level — see Figs.4(b),(c); 5(a). If  $N_{\text{A}}$  decreases or (and)  $T$  increases, the level is filled by 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 increase in 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 on 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  $N_{\text{Fe}}$  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  $\text{Fe}_i$  is filled by an electron ( $n < 1.06$ ). At the same time, the intrinsic recombination has a greater contribution at low iron concentration and same other parameters; and the sharp decrease in the ideality factor value is observed in the wake of the low impurity concentration. The striking examples are shown on Figs. 4(b),(c).

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 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 similar way in both lone unpaired  $\text{Fe}_i$  and  $\text{Fe}_i\text{B}_s$  and  $\text{Fe}_i$  coexistence cases and described well by a linear dependence

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

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

Also Figs. 3–5 show dependencies of the ideality factor change after 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 parameters values. The examples of such anticipated dependencies are shown on Figs. 4(b),(c) and 5(a). In this case  $\delta n_{\text{Fe}-\text{FeB}}$  increases with increasing in boron concentration and does not practically depend on temperature and 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 was turned out that case of  $n_{\text{FeB}} > n_{\text{Fe}}$  has been realized as well — see Figs. 3, 4(a), 5(b). The regions of negative  $\delta n_{\text{Fe}-\text{FeB}}$  value are observed in the vicinity of ideality factor decrease, which is induced by occupation of  $\text{Fe}_i$  level. The reason of  $n_{\text{FeB}} > n_{\text{Fe}}$  could be the difference in the Fermi level location in the cases of lone unpaired  $\text{Fe}_i$  and  $\text{Fe}_i\text{B}_s$  and  $\text{Fe}_i$  coexistence. However, calculations have shown that such difference does not exceed  $5 \times 10^{-6}$  eV and cannot be the cause of the detected effect.

Fig. 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 evidently that the degree of decrease in the  $\text{Fe}_i^+$  concentration depends on the distance to the  $p - n$ -junction. In our opinion, the namely change in the  $N_{\text{Fe}_i^+}$  profile is the reason of the rise of ideality factor resistance to temperature and doping level in the case of  $\text{Fe}_i\text{B}_s$  and  $\text{Fe}_i$  coexistence. At that the effect depends on the total iron concentration: the increase in  $N_{\text{Fe}}$  value leads to the  $n$  decay at higher temperature (Fig. 4(a)) as well as at lower boron concentration (Fig. 5(b)).

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

## 4 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  $10^{13} \text{ cm}^{-3}$ , the acceptor doping level — from  $10^{15}$  to  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , the temperature — from 290 to 340 K, and the base thickness — from 150 to 240  $\mu\text{m}$ . 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  $\text{Fe}_i$  level. The  $n$  dependence on iron concentration is a monotonic function. Additionally, not only defect concentration but also its location influences on ideality factor value. The intrinsic recombination causes the 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 on ideality factor if it exceeds the minority carrier diffusion length. The increase in base thickness leads to decrease in  $n$  value. The investigation has revealed that the ideality factor in  $\text{Fe}_i\text{B}_s$  and  $\text{Fe}_i$  coexistence case can exceed ones in lone unpaired  $\text{Fe}_i$  case. The ideality factor change after  $\text{Fe}_i\text{B}_s$  dissociation can be used to contaminant concentration evaluation.

## 5 Acknowledgements

The work was supported by 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")

## References

- [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, Progress in Photovoltaics: Research and Applications **21**, 884 (2013); <https://doi.org/10.1002/pip.2170>

- [3] O. Breitenstein, Opto-Electronics Review **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, Conference Record of the Twenty Third IEEE Photovoltaic Specialists Conference, 321 (1993); <https://doi.org/10.1109/PVSC.1993.347163>
- [6] K. McIntosh, P. Altermatt, G. Heiser, 16th European Photovoltaic Solar Energy Conference: Proceedings of the International Conference and Exhibition, 250 (2000)
- [7] A. Kaminski *et al.*, Conference Record of the Twenty Fifth IEEE Photovoltaic Specialists Conference, 573 (1996); <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, Progress in Photovoltaics: Research and Applications **13**, 3 (2005); <https://doi.org/10.1002/pip.556>
- [10] L. Duan *et al.*, IEEE Journal of 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, Progress in Photovoltaics: Research and Applications **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.*, Renewable 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. Rougieux, C. Sun, D. Macdonald, Solar Energy Materials and Solar Cells **187**, 263 (2018); <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2018.07.029>
- [31] B. B. Paudyal, K. R. McIntosh, D. H. Macdonald, 34th IEEE Photovoltaic Specialists Conference (PVSC), 1588 (2009)
- [32] A. A. Istratov, H. Hieslmair, E. Weber, Applied Physics A: Materials Science & Processing **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. P. 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: Condensed Matter **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 Conversion and Management **150**, 742 (2017); <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2017.08.063>



Table 1. Parameters' values used in the simulation

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.  $N_A = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ,  $N_{\text{Fe}} = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ,  $T = 340 \text{ K}$ ,  $d_p = 180 \text{ }\mu\text{m}$ . The results for lone unpaired  $\text{Fe}_i$  (circles, curves 4–6, red) as well as for  $\text{Fe}_i\text{B}_s$  and  $\text{Fe}_i$  coexistence (squares, curves 1–3, black) are presented.

Inset: Structure, which are used in simulation.

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

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

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

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

Fig. 6. (a) Typical dependencies of ideality factor on base thickness. The results for  $\text{Fe}_i\text{B}_s$  and  $\text{Fe}_i$  coexistence (curves 1–6, filled marks) as well as for unpaired  $\text{Fe}_i$  sole (2a, 5a, 6a, empty marks) are presented.  $T, \text{ K}$ : 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);  $N_A, \text{ cm}^{-3}$ :  $10^{15}$  (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.  $T, \text{ K}$ : 290 (1, 2), 325 (3), 340 (4–6);  $N_A, \text{ cm}^{-3}$ :  $10^{15}$  (4),  $10^{16}$  (1, 5),  $10^{17}$  (2, 3, 6).

(c) Ideality factor thickness coefficient vs boron concentration.  $T, \text{ K}$ : 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.  $N_A, \text{ cm}^{-3}$ :  $10^{15}$  (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  $\text{Fe}_i\text{B}_s$  and  $\text{Fe}_i$  coexistence.

Fig. 7. The calculated dependencies of electron diffusion length in the structure base in case of unpaired  $\text{Fe}_i$  sole. The shaded area represents values of base thickness, which used in simulation.

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

Table 1:

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

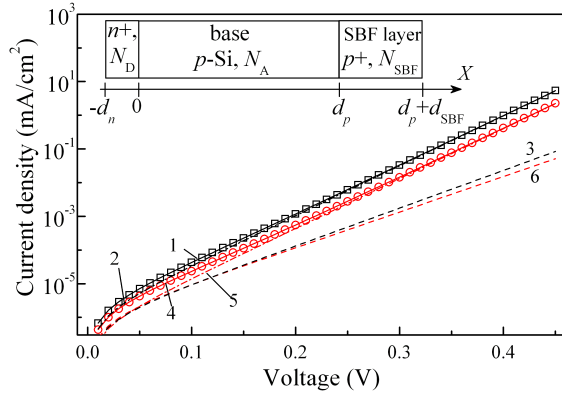


Figure 1: .

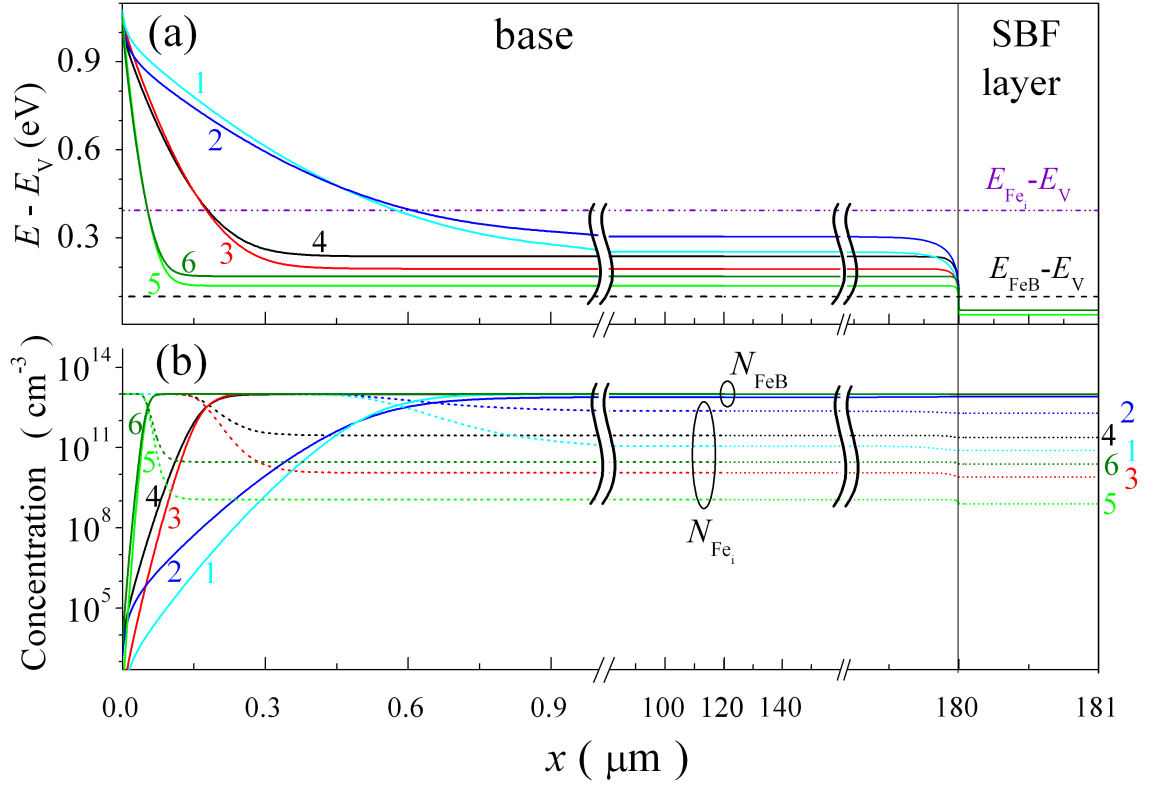


Figure 2: .

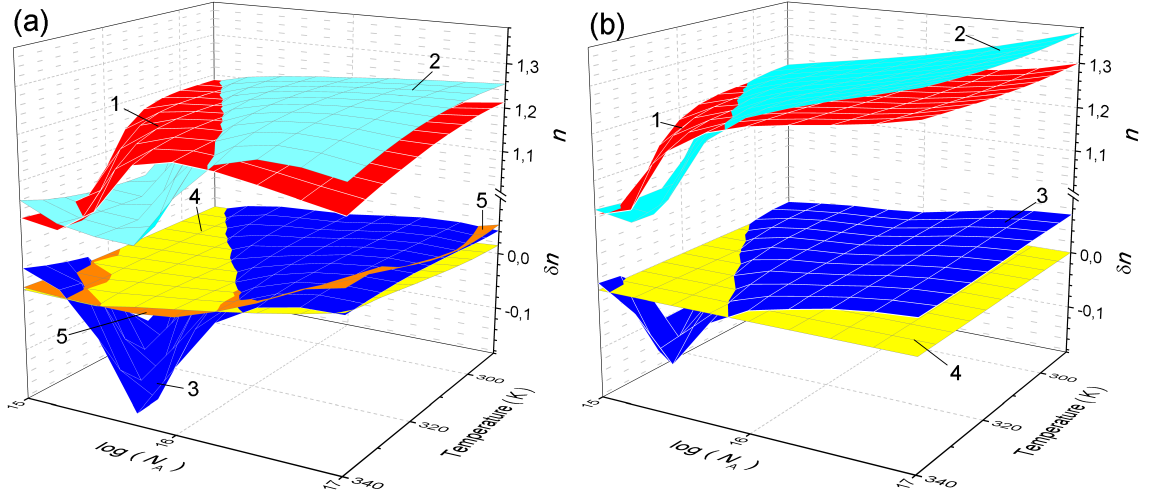


Figure 3: .

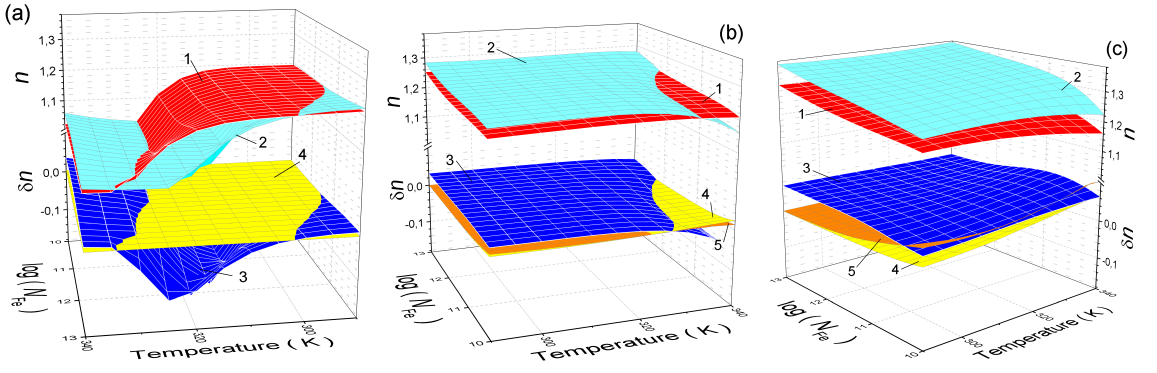


Figure 4: .

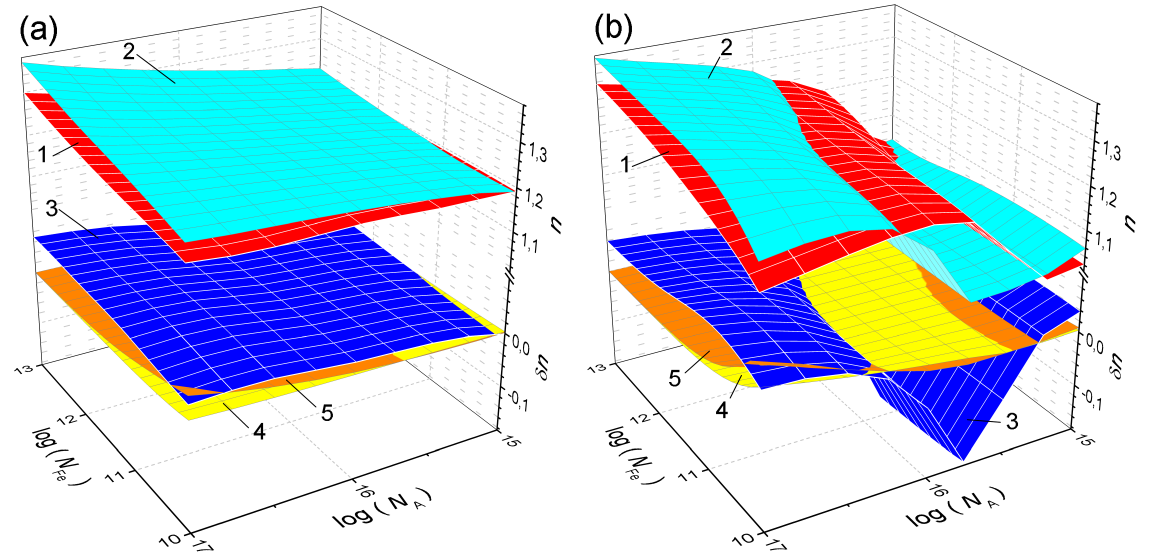


Figure 5: .

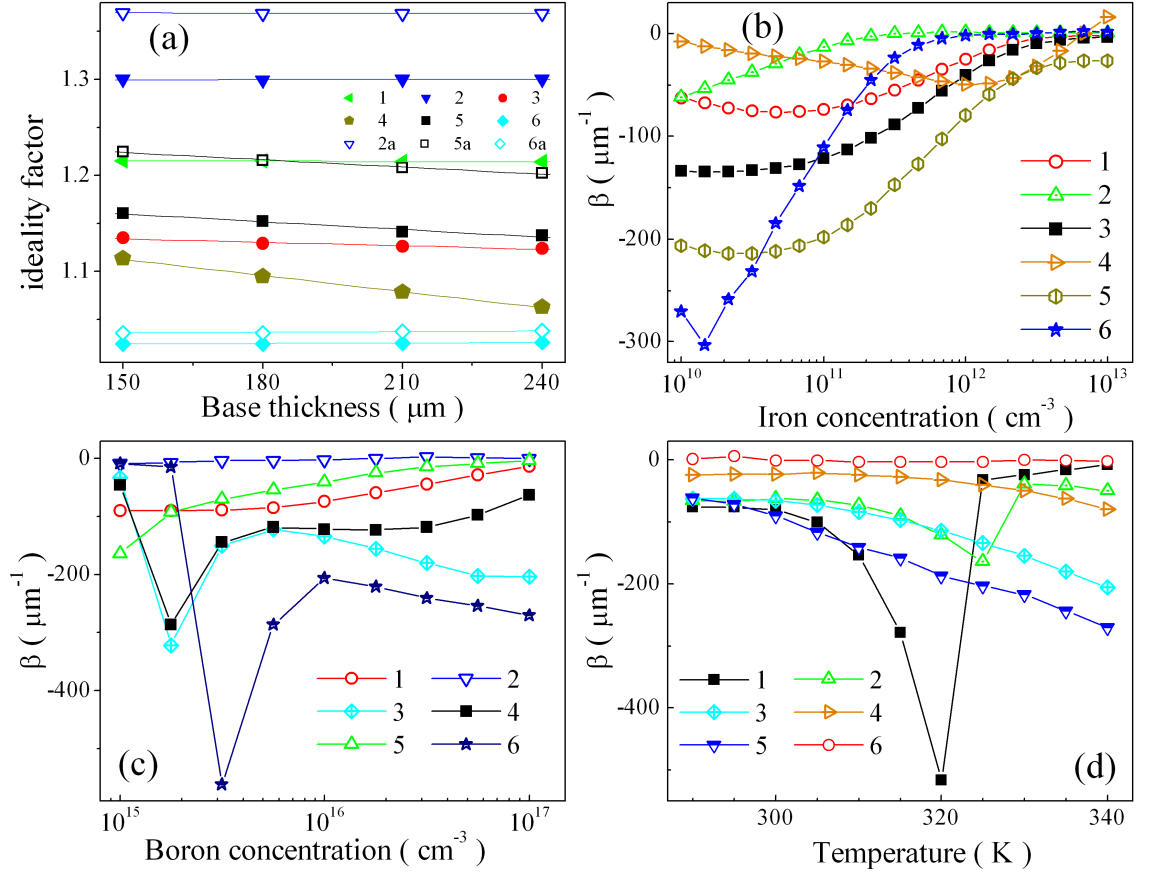


Figure 6: .

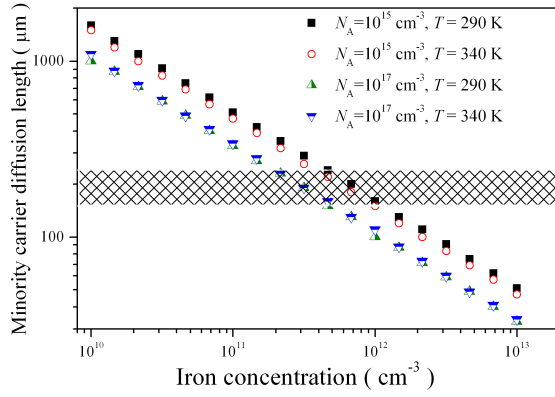


Figure 7: .

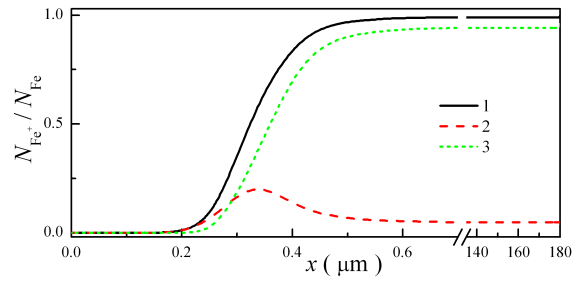


Figure 8: .

## Моделювання фактору неідеальності в $n^+p-p^+$ -Si структурах

О.Я. Оліх, О.В. Завгородній

*Київський національний університет імені Тараса Шевченка*

*Україна, 01601, місто Київ, вул. Володимирська, 64/13*

*e-mail: olikh@univ.kiev.ua*

У цій роботі подано результати моделювання величини фактору неідеальності кремнієвих  $n^+p-p^+$  структур. При цьому вважалося, що основні рекомбінаційні центри у базі структури пов'язані з домішковими атомами заліза. Для моделювання вольт-амперних характеристик таких структур використовувався Solar Cells Capacitance Simulator (SCAPS). При цьому додатково враховувалися температурні залежності параметрів як матеріалу, так і дефектів. При розрахунках вар'ювалися величини рівня легування ( $10^{15} \div 10^{17} \text{ см}^{-3}$  атомів бору) та товщини ( $150 \div 240 \text{ мкм}$ ) бази, температура ( $290 \div 340 \text{ К}$ ) та концентрації домішки заліза ( $10^{10} \div 10^{13} \text{ см}^{-3}$ ). Окремо розглядалися випадки, коли всі атоми заліза знаходилися у міжвузольному положенні  $\text{Fe}_i$  та коли переважна частина з них утворювала пари з легуючою домішкою  $\text{Fe}_i\text{B}_s$ . Останній випадок відповідає стану рівноваги за відсутності освітлення і при цьому співвідношення між концентраціями  $\text{Fe}_i$  та  $\text{Fe}_i\text{B}_s$  визначалося положенням рівня Фермі та температурою. Визначення величини фактору неідеальності ( $n$ ) відбувалося шляхом апроксимації (з використанням метаевристичного методу IJAVA) отриманих вольт-амперних характеристик.

Показано, що навіть за наявності  $\text{Fe}_i\text{B}_s$  основну роль у формуванні величини  $n$  відіграють процеси рекомбінації за участю рівнів, пов'язаних з  $\text{Fe}_i$ . Залежності  $n$  від температури та рівня легування визначаються, насамперед, заселеністю рівня  $\text{Fe}_i$ . У випадку, коли підсилюється відносний внесок процесів власної рекомбінації (високі температури та рівень легування, низькі концентрації домішки) відбувається зменшення фактору неідеальності. На величину  $n$ , окрім концентрації дефектів, впливає також їх просторове розташування відносно  $p-n$  переходу. Зі збільшенням товщини бази структури (у випадку, коли вона перевищує довжину дифузії неосновних носіїв та переважаючою є рекомбінація Шоклі-Ріда-Хола) відбувається незначне зменшення фактору неідеальності. Показано, що можуть реалізуватися випадки, коли  $n$  після розпаду  $\text{Fe}_i\text{B}_s$  зменшується. Запропоновано, що зміна фактору неідеальності після розпаду  $\text{Fe}_i\text{B}_s$ , поряд з абсолютним значенням  $n$ , може бути використана для оцінки концентрації домішок.

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