**2. Структура досліджуваного СЕ**

**2.1 Розрахункова модель КСЕ**

Ми проводили моделювання системи, що складалася з трьох окремих областей (Рис. 1): сильно легованого фосфором емітера (n+-шар), товщиною , легованої бором бази (p-шар), товщиною , та заднього контакту (p+-шар), що виступає в якості шару з полем задньої поверхні (ПЗП) і має товщину . Матеріалом кожного з шарів був монокристалічний кремній. Така проста послідовність шарів використовувалася для забезпечення ефективного розділення носіїв заряду та зниження рекомбінаційних втрат у КСЕ [fossum1977, kabou2020]. Крім того, використовувалося наближення повної іонізації домішок, за якого концентрація основних носіїв заряду співпадала з рівнем легування домішок в кожному з шарів, що є справедливим наближенням для діапазону температур, що розглядався під час моделювання структури.

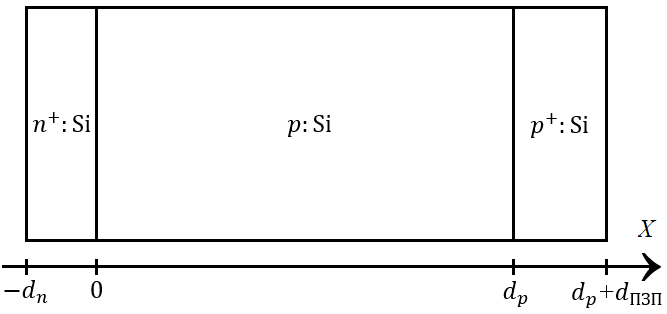


Рис. 2.1. Структура СЕ, що використовувалася у розрахунковій моделі.

В межах дослідження було розглянуто дві моделі КСЕ, що відрізнялися як геометричними так і фізичними параметрами. В першій розрахунковій моделі КСЕ (РМКСЕ), емітерний -шар реалізовувався у вигляді тонкої, рівномірно легованої області, що мала товщину та концентрацію донорної домішки . В другій РМКСЕ емітерний -шар мав вже меншу товщину, = 0.39 мкм, та максимальну концентрацію домішки , яка вже не була однорідною для всього шару і змінювалась за законом відповідно до [fell2015].

Центральна область КСЕ була рівномірно легована бором в обох випадках, концентрація якого варіювалася під час моделювання однаково для кожної з РМКСЕ в діапазоні . Для першої моделі товщина бази варіювалася в діапазоні , для другої РМКСЕ ми значно розширили цей діапазон, товщина бази в такій структурі варіювалася в діапазоні .

Параметри p+-шару були підібрані таким чином, щоб мінімізувати рекомбінаційні втрати і забезпечити надійний омічний контакт з металевим електродом. Ми припускали, що для першої моделі -шар був рівномірно легований бором, з концентрацією та товщиною . Для другої РМКСЕ ми вважали, що профіль домішки змінювався за законом відповідно до [fell2015] з максимально можливою концентрацією бора та мав товщину .

**2.2 Моделювання РМКСЕ**

У рамках моделювання РМКСЕ було використано одновимірний програмний пакет SCAPS (версія 3.3.11), розроблений на кафедрі електроніки та інформаційних систем Гентського університету (Бельгія). Це програмне забезпечення дозволяє моделювати різні типи сонячних елементів та досліджувати їх характеристики, наприклад, вольт-амперні характеристики (ВАХ) та розраховувати положення рівня Фермі для кожного окремого шару КСЕ [burgelman2000]. SCAPS широко використовується дослідниками для моделювання та оптимізації широкого спектру сонячних елементів, включаючи перовскітні [hyun-jae2024] [hossain2022], тонкоплівкові [mishra2019], органічні [ulareanu2024] та інші розповсюджені типи сонячних елементів [mostefaoui2015] [sawicka2019].

В роботі проводилося моделювання ВАХ для обох РМКСЕ. Як видно з Таблиці 1, моделювання охоплювало широкий діапазон температур. Нажаль, SCAPS враховує лише спрощені температурні та концентраційні залежності для кремнію, тому нами було створено окремий файл налаштувань для SCAPS з використанням параметрів матеріалу та дефектів взятих з літератури.

Таблиця 2.1. Параметри, які варіювалися під час моделювання

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| РМКСЕ | Параметр | Діапазон значень | Кількість значень |
| 1 |  | 150 - 240 | 4 |
|  |  | 9 |
|  |  | 19 |
|  | 290 - 340 | 11 |
| 2 |  | 180 - 380 | 5 |
|  |  | 9 |
|  |  | 25 |
|  | 290 - 340 | 11 |
|  |  | 3 |

Як для першої так і для другої РМКСЕ були використанні наступні параметричні залежності в кремнії:

Ширина забороненої зони , що залежить, в першу чергу, від температури СЕ, розраховувалася згідно з [passler2002]:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2.1) |

де - ширина забороненої зони при ; – коефіцієнт нахилу, що відображає швидкість зміні ; – характерна температура; - безрозмірний поправочний коефіцієнт, що формує температурну залежність вищого порядку.

Крім ширини забороненої зони, були взяті з літератури величини звуження забороненої зони , якe виникає внаслідок легування КСЕ, окремо для n- та p- шарів [cuevas2014]:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2.2) |
|  | (2.3) |

де та – звуження ширини забороненої зони для n- та p- шарів, відповідно.

Теплові швидкості електронів та дірок були розраховані згідно з [green1990]:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2.4) |

де – маса вільного електрона; q - заряд електрона; k – стала Больцмана.

Ефективні густини станів поблизу границь дозволених зон задавалися виразами [couderc2014]:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2.5) |

Ефективні маси густини станів у зоні провідності та у валентній зоні були розраховані згідно з моделлю [green1990]:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2.6) |

Рухливості електронів та дірок обчислювалися згідно з теорією [klaassen1991], ефективні маси вільних носіїв були взяті з роботи [omara1990]. Температурні та концентраційні залежності коефіцієнтів Оже-рекомбінації для першої РМКСЕ були розраховані відповідно до [altermatt1997]. Для другої ж моделі такі залежності були взяті з [black2022].

Додатково, наші моделі відрізнялися швидкістю поверхневою рекомбінації: для першої РМКСЕ вважалося, що поверхнева швидкість рекомбінації однакова на обох поверхнях КСЕ і дорівнює 103 см/с. Друга модель була більш складною, поверхнева швидкість рекомбінації в ній визначалася відповідно до [fell2015].

Серед інших відмінностей: для першої моделі коефіцієнт випромінювальної міжзонної рекомбінації було запозичено з роботи [nguyen2014], тоді як для другої розрахунок відповідного коефіцієнта включав частку випромінених фотонів, що поглинаються через міжзонні процеси, відповідно до [niewelt2022].

В другій РМКСЕ ми також враховували спектральні та температурні залежності коефіцієнтів поглинання світла в кремнії відповідно до [Green2022].

Як вже зазначалося раніше, в кристалічному кремнії атоми заліза переважно знаходяться в міжвузлових положеннях кристалічної ґратки. З цим точковим дефектом пов’язуть донорний (0/+) рівень , який, згідно з експериментальними даними, не демонструє істотної температурної залежності від свого енергетичного положення [rein2005]. Це означає, що міжвузлові атоми заліза можуть існувати як у нейтральному , так і в позитивно зарядженому станах . З прикладної точки зору такий стан, коли всі атоми заліза знаходяться в міжвузловому положенні, реалізується шляхом інтенсивного освітлення СЕ або внаслідок високотемпературної обробки (210°С, 3 хв) [zhu2013]. У стані термодинамічної рівноваги, співвідношення між концентраціями різних станів заліза визначається формулою [wijaranakula1993]:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2.7) |

де – положення рівня Фермі.

У кремнії з дірковою провідністю більшість позитивно заряджених атомів мають тенденцію об’єднуватися в пари з легуючою домішкою. Зокрема, в нашому випадку, мова буде йти про утворення комплексів з заміщуючими атомами бору, які вважаються амфотерними дефектами, оскільки їм відповідають одразу і донорний (0/+) і акцепторний рівні (–/0).

В рамках наших розрахунків ми розглядали два характерні стани заліза в напівпровідниковій структурі:

* Стан 1: вважалося, що всі атоми заліза не утворюють комплекси, тобто залишаються неспареними, а це означає, що вони всі перебувають у міжвузловому положенні ; цей випадок відповідає стану структури, наприклад, відразу після інтенсивного освітлення, коли пари ще не почали створюватися.
* Стан 2: стан рівноваги для СЕ; ми припускаємо, що в кремнії співіснують як ізольовані міжвузлові атоми заліза, так і пари з заміщуючим бором. Іншими словами, загальний вміст заліза можна розбити на дві складові:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2.8) |

Розподіл рекомбінаційних центрів в p- та p+-шарі неоднорідний і залежить від положення рівня Фермі та може бути розрахований з наступних співвідношень [wijaranakula1993]:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2.9) |

де - енергія зв'язку пар , - донорний рівень, пов'язаний з .

Через експоненційну залежність енергії зв’язку та положення рівня Фермі профілі центрів рекомбінації не будуть плоскими: поблизу гетеропереходів або сильно легованих шарів зсуви рівня Фермі можуть спричинити локальні зміни в концентраціях заліза, що також буде пов’язано з комплексами . Іншими словами у СЕ в області просторового заряду значення енергії Фермі не є постійним і залежить як від температури, так і від концентрації легуючої домішки (рис. 2.2 (а)). Навіть за умови рівномірного розподілу домішкового заліза концентрація комплексів , а також концентрація вільних міжвузлових атомів заліза, є залежними параметрами від відстані до p-n-переходу (рис. 2.2 (б)).

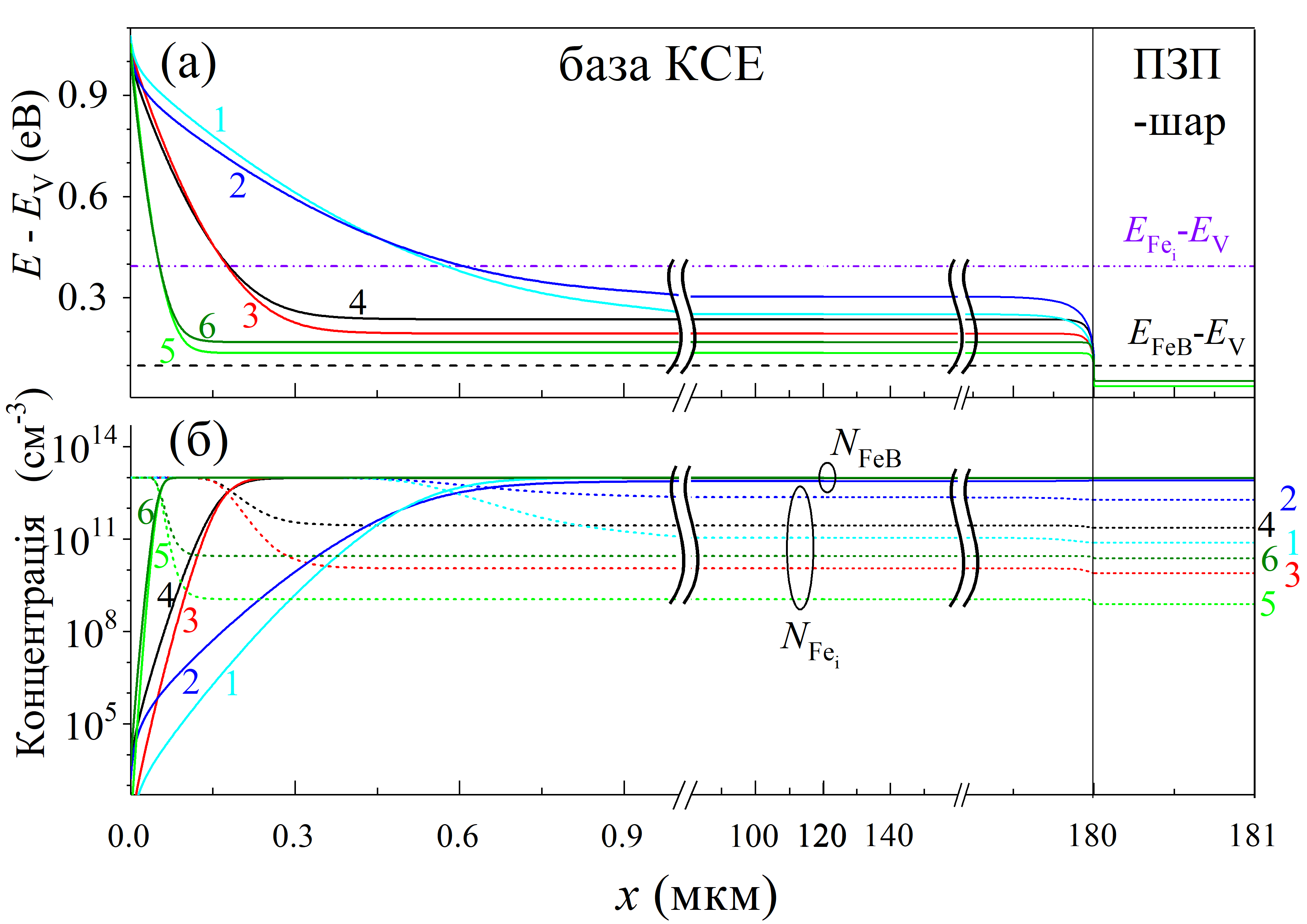


Рис. 2.2. Розрахований розподіл положення рівня Фермі (а, суцільні лінії), концентрації міжвузольного заліза (б, пунктирні лінії) та концентрації пар FeiBs (б, суцільні лінії) в базі та ПЗП-шарі при напрузі V = 0. , : (криві 1, 2), (3, 4), (5, 6); T, K: 290 (1, 3, 5), 340 (2, 4, 6); ; . На залежності (a) також наведені положення донорних рівнів Fei (пунктирна лінія) та FeiBs (штрихова лінія)

Таблиця 2.2. Параметри домішкових центрів взяті з [murphy2015], [rougieux2018], [istratov1999] і використані в РМКСЕ.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Тип дефекту |  |  | |
| Тип рівня | Донор | Донор | Акцептор |
| Рівень енергії (еВ) |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |

Перерізи захоплення електронів та дірок , які ми використовували під час моделювання РМКСЕ наведені в Таблиці 2.2, разом з величинами енергій для кожного з домішкових центрів.

**2.3 Моделювання світлових та темнових ВАХ**

В ході дослідження здійснювалося моделювання прямої гілки ВАХ з кроком 0,01 В. Розраховувалися як темнові ВАХ у діапазоні напруг , так і світлові ВАХ у діапазоні напруг , де – напруга холостого ходу. Для світлових ВАХ передбачалося освітлення сонячного елемента або сонячним випромінюванням (AM1.5, 1000 Вт/м², що відповідає стандартним умовам), або монохроматичним випромінюванням (940 нм, 5 Вт/м² або 10 Вт/м², що імітує умови освітлення світлодіодом типу SN-HPIR940nm-1W). В процесі моделювання також здійснювалися розрахунки положення рівня Фермі, що надалі використовувалися для визначення просторового розподілу дефектів різних типів.

В науковій літературі існує декілька моделей, які описують ВАХ СЕ. Ці моделі містять ряд параметрів, які відображають процеси, що відбуваються всередині структури СЕ і пов'язані з основними параметрами фотоелектричного перетворення. В даному дослідженні отримані ВАХ апроксимувалися відповідно до дво-діодної моделі сонячного елементу.

Згідно з дво-діодною моделлю, темновий струм СЕ визначається як [breitenstein2013]:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2.10) |

де та - струми насичення; та – шунтуючий та послідовний опори. У рівнянні (2.10) перший діод представляє «ідеальний» діод, а перший член рівняння описує рекомбінацію в глибині бази та емітера, включаючи їх поверхні; другий діод є так званим рекомбінаційним діодом, а другий член рівняння описує рекомбінацію в області виснаження [breitenstein2013].

Під час моделювання темнових ВАХ вважалося, що , , а шуканими параметрами апроксимації є фактор ідеальності та струми насичення. Апроксимація була виконана за допомогою мета-евристичного методу IJAVA [yu2017]. Приклад розрахованих ВАХ та їхньої апроксимації наведено на рис.2.3.

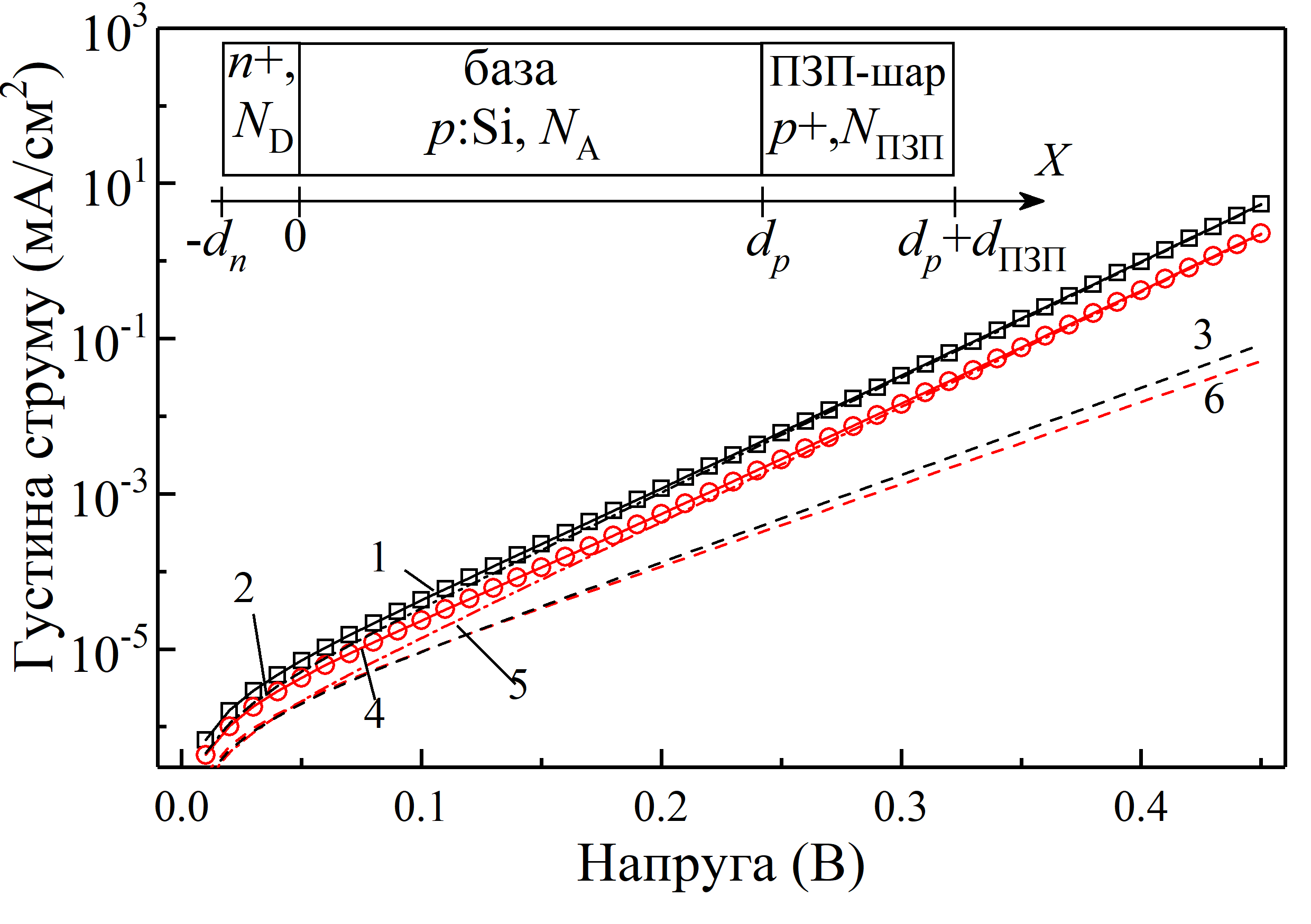


Рис. 2.3. Змодельовані типові темнові ВАХ та їх відповідності рівнянню (2.10) (суцільні лінії 1 і 4). Штрихові (3, 6) і пунктирні (2, 5) лінії показують дифузійний та рекомбінаційний струми. , , T = 340 K, = 180 мкм. Представлено результати для (кола, криві 4-6, червоні) та для співіснування і (квадрати, криві 1-3, чорні)

Враховуючи, що для темнових ВАХ варіювалося під час моделювання 4 значення , 9 значень , 11 значень та 19 значень , рівномірно розподілених по вказаних у Таблиці 2.1 діапазонах (для і використовувалась лінійний масштаб, для і – логарифмічний), тоді загальна кількість ВАХ, змодельованих для цього набору - 15048 (з врахуванням 2 станів дефектів заліза).

З іншого боку, для світлових ВАХ, ми визначали струм короткого замикання , напругу холостого ходу , фактор заповнення та коефіцієнт корисної дії . Важливим уточненням є те, що ми визначали саме відносні зміни цих параметрів, тобто:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2.11) |

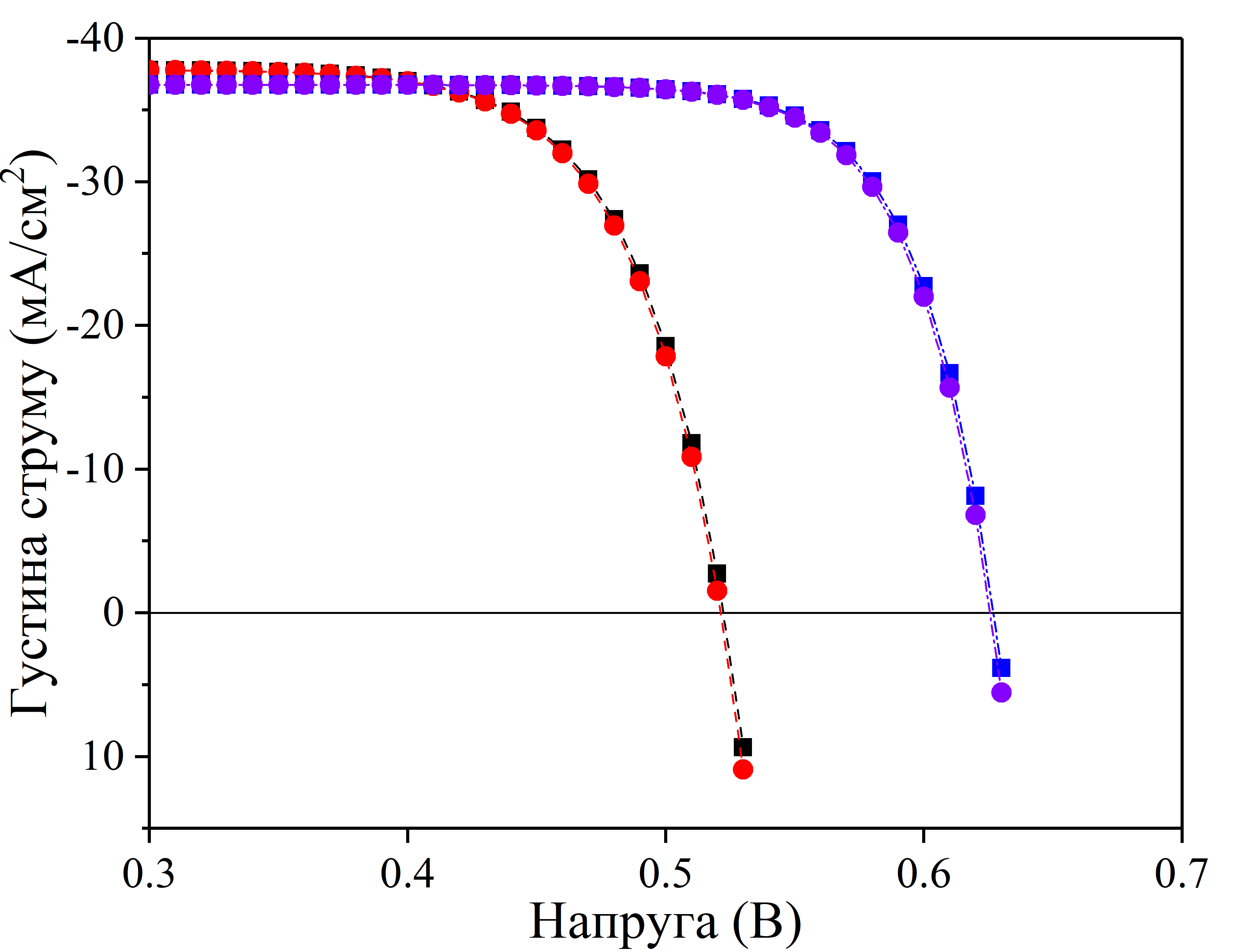


Рис. 2.3. Змодельовані типові світлові ВАХ для освітлення AM1.5G. ; ; T = 290 K (штрихпунктирні лінії, синя та фіолетова), T = 340 K (пунктирні лінії, чорна та червона); = 180 мкм. Представлено результати для (квадрати, чорні та сині) та для співіснування і (кола, червоні та фіолетові)

де – один з параметрів КСЕ (, , , ), індекс «FeB» відповідає стану рівноваги, коли в РМКСЕ співіснують міжвузлові атоми заліза та комплекси FeB, індекс «Fe» ‑ відповідає стану, коли в РМКСЕ всі комплекси FeB дисоційонані і є сенс розглядати тільки міжвузлові атоми заліза. Типові світлові ВАХ для освітлення АМ1.5G продемонстровано на рис. 2.3.

Враховуючи, що для світлових ВАХ варіювалися під час моделювання 5 значень , 9 значень , 11 значень та 25 значень для кожного типу освітлення, то загальна кількість ВАХ, змодельованих для цього набору склала – 37125.