**3. Розрахункова модель КСЕ**

Досліджувана система була реалізована у вигляді багатошарової структури, що включає три окремі області (Рис. 1): сильно легованого фосфором емітера (n+-шар), товщиною , помірно легованої бором бази (p-шар), товщиною , та заднього контакту (p+-шар), що виступає в якості ПЗП-шару (поле задньої поверхні) і має товщину . Матеріалом кожного з шарів був монокристалічний кремній. Така послідовність шарів була розроблена для оптимізації розділення заряду і мінімізації рекомбінаційних втрат в КСЕ. 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.

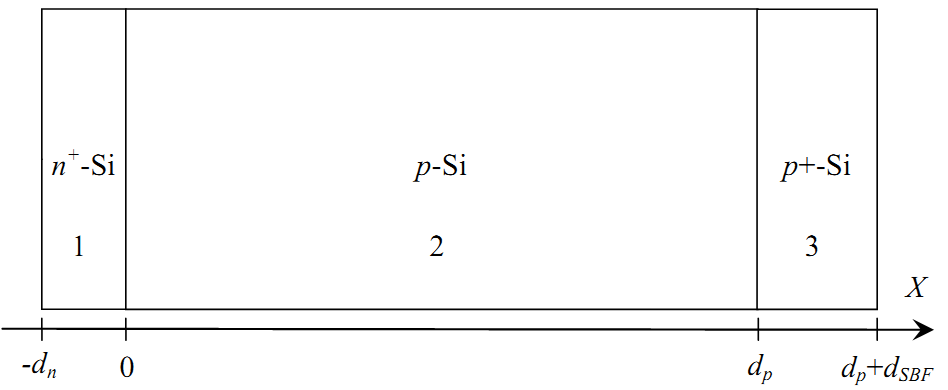


Рис. 1. Структура СЕ, що використовувалася у розрахунковій моделі. 1 – емітер, 2 – база, 3 – BSF шар (картинка буде інша, зроблю її через платформу <https://www.figuro.io>)

У ході дослідження розглядалися дві структури КСЕ, які відрізнялися не лише геометричними параметрами, але й ступенем наближеності до реальних пристроїв, зокрема кількістю параметричних залежностей, що використовувалися для їх опису.

В першій структурі, або ж в першій редакції розрахункової моделі КСЕ (РМКСЕ), емітерний -шар реалізовувався у вигляді тонкої, сильно легованої області, що мала товщину = 0.5 мкм та концентрацією фосфору . В другій редакції РМКСЕ емітерний -шар мав вже меншу товщину та більшу концентрацію домішки: = 0.39 мкм, .

Центральна область КСЕ, де поглинається більша частина падаючого сонячного світла і утворюються електронно-діркові пари, була легована бором, концентрація якого змінювалася під час моделювання однаково для кожної з редакцій в діапазоні . В першій редакції структури товщина бази варіювалася в діапазоні , в другій редакції ми значно розширили цей діапазон, товщина бази в такій структурі варіювалася в інтервалах .

Обрані нами параметри p+-шару дозволяють отримати потрібну глибину легування, що мінімізує рекомбінаційні втрати та забезпечує надійний омічний контакт із заднім металевим електродом: ми припускали, що -шар рівномірно легований бором, з концентрацією та товщиною для першої редакції структури та з концентрацією і товщиною для другої редакції РМКСЕ.

Крім цього, наші структури мали різну поверхневу рекомбінацію. Для першої вважалося, що поверхнева швидкість рекомбінації однакова на обох поверхнях КСЕ і дорівнює 103 см/с. Друга редакція структури була більш складною, та мала поверхневу швидкість рекомбінації, що співпадала з тепловими швидкостям носіїв відповідно до [fell2015]. Відрізнялися також і концентраційні профілі домішок в - та - шарах: для першої редакції вважалося, що рівні легування в цих шарах постійні і не залежать від товщини, а для другої редакції профілі домішок змінювалися за законом відповідно до [fell2015].

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 відоме своєю здатністю моделювати різні типи сонячних елементів, яке базується на теоретичних розрахунках, які включають розв'язання рівняння Пуассона, рівнянь неперервності для дірок та електронів, а також рівнянь дрейфової дифузії в кожній точці всередині СЕ з урахуванням граничних умов [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].

Вибір дослідниками SCAPS`у обумовлений широким функціоналом, з якого можна виділити наступні можливості програмного пакету [https://scaps.elis.ugent.be/SCAPS%20manual%20most%20recent.pdf]:

- можливість додавання до 7 напівпровідникових шарів;

- більшість параметрів СЕ можуть бути градуйованими (залежати від товщини шару);

- можливість залучення механізмів міжзонної рекомбінації, Оже-рекомбінації та рекомбінація Шоклі-Ріда-Хола;

- можливість задавати рівні дефектів не тільки в об’ємі але і на межі поділу, з описом зарядового стану та їх рекомбінації;

- можливість задавати без зарядні, однозарядні, багатозарядні та метастабільні дефекти;

- можливість задавати різні варіанти енергетичної густини дефектних станів: єдиний рівень, рівномірний розподіл, розподіл Гауса, їх комбінації;

- можливість врахування оптичних властивостей дефектів (домішковий фотоефект);

- можливість задавання енергетичних (робота виходу) та оптичних (фільтри відбивання та пропускання) властивостей контактів;

- можливість врахування тунелювання в межах зони провідності або в межах валентної зони, а також тунелювання до та з поверхневих станів;

- можливість задавати темпи генерації носіїв або в автоматичному режимі, або за допомогою спеціального файлу самим користувачем;

- можливість задавати інтенсивність та тип спектру освітлення (AM0, AM1.5D, AM1.5G, монохроматичний, білий та інші);

- можливість задавати робочі точки для розрахунків напруги, частоти та температури;

- можливість обчислення енергетичних діаграм, концентрацій носіїв та сили струму в заданій робочій точці, J-V характеристики, C-V характеристики, спектральну чутливість;

- можливість залучення пакетних розрахунків;

- можливість завантаження та збереження усіх SCAPS налаштувань ; наявність скриптової мови;

- можливість інтерпретувати вимірювання адміттансу (здатність електричного кола проводити змінний струм) для дослідження ємності та опору в матеріалі;

- можливість використання вбудованої функції підгонки кривих;

- інтуїтивно зрозумілий графічний інтерфейс.

Як видно з Таблиці 1, моделювання охоплювало широкий діапазон температур. Нажаль, SCAPS враховує лише спрощені температурні та концентраційні залежності для кремнію, тому для кожної температури було створено окремий файл налаштувань SCAPS з використанням параметрів матеріалу та дефектів взятих з літератури.

Таблиця 1. Параметри, які варіювалися під час моделювання

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Параметр | Діапазон значень | Кількість значень |
|  | 150 - 240 | 4 |
|  | 180 - 380 | 5 |
|  |  | 9 |
|  |
|  |  | 19 |
|  |  | 25 |
|  | 290 - 340 | 11 |
|  |
|  | , | 4 |

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]:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (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) |
|  | (3) |

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

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

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4) |

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

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

|  |  |
| --- | --- |
|  | (5) |

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

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6) |

Рухливості електронів та дірок обчислювалися згідно з теорією [klaassen1991], яка враховує як ґраткове, так і електрон-діркове розсіяння носіїв. Ефективні маси вільних носіїв були взяті з роботи [omara1990].

Розрахунки стосувалися рекомбінаційних процесів у структурному об'ємі кремнія, включаючи як власну рекомбінацію, так і рекомбінацію Шоклі-Ріда-Холла (ШРХ) на дефектах, пов'язаних із залізом.

Температурні та концентраційні залежності коефіцієнтів Оже-рекомбінації були розраховані відповідно з [altermatt1997]:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (7) |
|  | (8) |
|  |  |

В свою чергу, у кристалічному кремнії повна швидкість рекомбінації часто апроксимується функцією:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (9) |

де n- та p- концентрації електронів і дірок.

Основні відмінності між двома моделями РМКСЕ полягали в наступному: для першої структури 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].

Хоча для обох структур температурні та концентраційні залежності коефіцієнтів Оже-рекомбінації були запозичені з [altermatt1997], для першої структури, на відміну від другої РМКСЕ, ці коефіцієнти не враховували ефект кулонівського підсилення [black2022].

Найбільшою відмінністю між структурами стало те, що в другій РМКСЕ ми враховували точні значення поглинання світла в кремнії відповідно до [Green2022], коли в першому наближені моделювали тільки з темновими ВАХ.

**3.5.2 Параметри дефектів кремнію**

Як вже зазначалося раніше, в кристалічному кремнії атоми домішкового заліза переважно знаходяться в міжвузлових положеннях кристалічної ґратки. З цим 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 стані , так і в позитивно зарядженому стані . У стані термодинамічної рівноваги, співвідношення між концентраціями різних станів заліза визначається формулою [wijaranakula1993]:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (10) |

де – положення рівня Фермі.

У кремнії з дірковою провідністю більшість позитивно заряджених атомів мають тенденцію до створення пари з легуючою домішкою. Зокрема, з парами , які вважаються амфотерними дефектами, оскільки їм відповідають одразу і донорний (0/+) і акцепторний рівні (–/0).

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

* вважалося, що всі атоми заліза не утворюють комплекси, тобто залишаються неспареними, а це означає, що вони всі перебувають у міжвузольному положенні ; цей випадок відповідає стану структури відразу після інтенсивного освітлення, коли пари FeB ще не почали створюватися.
* у другому сценарії, який представляє стан рівноваги для СЕ, який не освітлювався, ми припускаємо, що в кристалі кремнію співіснують як ізольовані міжвузольні атоми заліза, так і пари з заміщуючим бором. Іншими словами, загальний вміст заліза можна розбити на дві складові: міжвузольне залізо і залізо-борні комплекси Символічно це виражається як рівноважний стан, коли в кристалі присутні як неспарені міжвузлові атоми заліза, так і пари

|  |  |
| --- | --- |
|  | (11) |

Розподіл дефектів в p- та p+-шарі неоднорідний і залежить від положення рівня Фермі та має вигляд [wijaranakula1993]:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (12) |

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 . Конкретна кількість заліза, що потрапляє в комплекси, залежить від таких факторів, як рівень легування бором, температура та локальне положення рівня Фермі. Такі інструменти, як SCAPS, можуть включати ці вирази в моделювання, дозволяючи отримати самоузгоджений розв’язок рівняння Пуассона разом з рівняннями неперервності.

Перерізи захоплення електронів та дірок , які ми використовували під час моделювання РМКСЕ наведені в Таблиці 2, разом з величинами енергій для кожного з домішкових центрів.

Таблиця 2. Параметри домішкових центрів взяті з [murphy2015], [rougieux2018], [istratov1999] і використані в РМКСЕ.

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

Темнові I-V характеристики були змодельовані для першої РМКСЕ в SCAPS в діапазоні напруг 0-0.45 В. Згідно з двохдіодною моделлю, темновий струм СЕ визначається як [breitenstein2013]:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (13) |

де та - струми насичення; та – шунтуючий та послідовний опори. Дводіодну модель часто застосовують для опису реальних КСЕ: у рівнянні (13) 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].

Змодельовані дані були підігнані за допомогою рівняння (13) з , , , та в якості параметрів підбору. Підбір був виконаний за допомогою мета-евристичного методу IJAVA [yu2017].