

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Сумський державний університет

Класичний фаховий коледж

(повна назва інституту / факультету)

(повна назва кафедри)

«До захисту допущено»

(підпис)

(Ім'я та ПРИЗВИЩЕ)

_____ 2023 р.

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА

на здобуття освітнього ступеня

бакалавр

(бакалавр / магістр)

зі спеціальності 171 Електроніка,
(код та назва)

освітньо-професійної програми Електронні інформаційні системи
(освітньо-професійної / освітньо-наукової) (назва програми)

на тему: Чисельне моделювання структури та характеристик фотоперетворювачів на основі нанодротів

Здобувача (ки) групи EI-91к Стадніченка Романа Олександровича
(шифр групи) (прізвище, ім'я, по батькові)

Кваліфікаційна робота містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело.

(підпис)

Роман Стадніченко

(Ім'я та ПРИЗВИЩЕ здобувача)

Керівник викладач, к.ф.-м.н., доцент, Іван Бурик
(посада, науковий ступінь, вчене звання, Ім'я та ПРИЗВИЩЕ)

(підпис)

Консультант _____
(посада, науковий ступінь, вчене звання, Ім'я та ПРИЗВИЩЕ)

(підпис)

Конотоп – 2023

АНОТАЦІЯ

Обґрунтуванням актуальності теми є зростання потреби у високоефективних та низьковартісних сонячних панелях з використанням фотоперетворювачів на основі нанодротів.

Мета роботи полягає у вивченні фізичних особливостей нанодротяних сонячних елементів, їх чисельному моделюванню робочих параметрів та температури експлуатації, аналізу отриманих результатів.

Відповідно до мети, вирішувалися такі задачі:

- вивчення фізичних принципів роботи фотоперетворювачів, їх види та конструкції, методики комп'ютерного моделювання структур;
- чисельне моделювання та аналіз структур сонячних елементів на основі нанодротів.

При виконанні роботи використовувалися методи комп'ютерного приладно-технологічного моделювання у середовищі Silvaco TCAD для моделювання структур.

У результаті проведених досліджень було виконано моделювання структур фотоелектричних перетворювачів на основі нанодротів, розвинуто навички роботи з транспортними моделями, зроблено висновки за результатами комп'ютерного моделювання структур.

Об'єктом дослідження кваліфікаційної роботи є структурні та робочі характеристики фотоперетворювачів на основі нанодротів.

Предмет досліджень світлові та темнові вольт-амперні характеристики, електричні параметри нанодротяних сонячних елементів.

Робота викладена на 44 сторінках, у тому числі включає 17 рисунків, 3 таблиці, список цитованої літератури із 44 джерел.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: НАНОДРТ, РОБОЧІ ХАРАКТЕРИСТИКИ, СОНЯЧНИЙ ЕЛЕМЕНТ, ФОТОЕЛЕКТРИЧНИЙ ЕФЕКТ, ФОТОПЕРЕТВОРЮВАЧ, ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ.

ЗМІСТ

	С.
ВСТУП.....	4
РОЗДІЛ 1 ПРИНЦИП ДІЇ ТА ВИДИ ФОТОЕЛЕКТРИЧНИХ ПЕРЕТВОРЮВАЧІВ.....	5
1.1. Фізичний зміст фотоелектричного ефекту.....	5
1.2. Види та конструкції фотоелектричних комірок.....	10
РОЗДІЛ 2 МЕТОДИКА І ТЕХНІКА ЕКСПЕРИМЕНТУ.....	16
2.1. Методика моделювання в Silvaco TCAD.....	16
2.2. Чисельне моделювання фотоелементів на основі нанодротів.....	20
РОЗДІЛ 3 РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ.....	25
3.1. Модель транспорту носіїв заряду.....	25
3.2. Геометрія досліджувальної структури.....	28
3.3. Результати моделювання.....	32
ВИСНОВКИ.....	38
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	39
ДОДАТОК А. СЛАЙДИ ПРЕЗЕНТАЦІЇ ДО РОБОТИ.....	44

ВСТУП

Актуальним напрямком розвитку альтернативних джерел енергії залишається використання сонячної енергії через її надлишковість, чистоту та відновлюваність [1]. Фотоелектричні перетворювачі на основі нанодротів є перспективним напрямком розвитку сонячних батарей завдяки високій ефективності та низькій вартості [1,2]. Окремі та взаємопов'язані фотоелектричні елементи з нанодротів можуть слугувати надійними джерелами живлення для керування функціональними нанoeлектронними датчиками та логічними вентилями і можуть знайти загальне використання як елементи для живлення електроніки надмалої потужності та різноманітних наносистем [3]. Компактне проектування таких структур полягає у застосуванні відповідних систем автоматизованого проектування і розрахунку (САПР) із високоточними моделями. Серед найбільш поширених в сучасній схемотехніці можна виділити Silvaco TCAD, яка являє собою набір пов'язаних між собою програм, які дозволяють проводити проектування стандартних технологічних процесів, електрофізичних характеристик, симуляцію та візуалізацію роботи електронних структур сонячних елементів на основі нанодротів.

У роботі представлено результати числового моделювання коаксіальних *p-i-n* структур фотоперетворювачів на основі нанодротів Si та InP в рамках дрейф-дифузійної транспортної моделі із статистикою Фермі-Дірака. За допомогою інструментів Silvaco TCAD було отримано 3D структуру, світлові та темнові вольт-амперні характеристики, значення електричних параметрів в температурному інтервалі від 280 К до 400 К. Визначено температурні коефіцієнти напруги холостого ходу, густини струму короткого замикання, коефіцієнта заповнення та фотоелектричного ККД в інтервалі температур від 300 К до 400 К для структур на основі нанодротів Si та InP. Результати добре узгоджуються з відомими даними та можуть бути використані для подальших досліджень.

РОЗДІЛ 1

ПРИНЦИП ДІЇ ТА ВИДИ ФОТОЕЛЕКТРИЧНИХ ПЕРЕТВОРЮВАЧІВ

1.1. Фізичний зміст фотоелектричного ефекту

Основним явищем у роботі напівпровідникових фотоелектричних перетворювачів є фотоелектричний ефект. Фотоелектричний ефект (або фотоэффект) – це явище взаємодії електромагнітного випромінювання з речовиною, при якій енергія фотонів передається електронам речовини [4]. Незважаючи на те, що фотоэффект може відбуватися в будь-якому матеріалі, найлегше його спостерігати в металах та напівпровідниках. Розрізняють два типи фотоэффекту: внутрішній та зовнішній.

Випромінювання електронів під впливом електромагнітного випромінювання називають зовнішнім фотоэффектом (або фотоелектронною емісією) [4]. Електрони, що отримали енергію від поглинання фотонів, отримують достатню кількість енергії, завдяки якій вони здатні подолати роботу виходу матеріалу [5]. У цьому випадку електрони мають достатню кінетичну енергію, щоб покинути поверхню матеріалу [5]. Фотострумом називається електричний струм, утворений при упорядкованому русі електронів, що покинули поверхню речовини під дією зовнішнього фотоэффекту (фотоелектрони), у зовнішньому електричному полі [4].

Внутрішнім фотоэффектом називають явище зростання електропровідності та зменшення опору речовини під дією випромінювання [4]. Якщо енергія, яку отримали електрони від поглинання фотона, більша, ніж заборонена зона матеріалу (як правило, менша, ніж робота виходу), електрони просуваються з валентної зони в зону провідності [5]. Вони не покидають поверхню матеріалу, але внутрішньо здатні текти, утворюючи фотопровідність або вентильний фотоэффект (явище виникнення електрорушійної сили в контакті двох різних напівпровідників або напівпровідника і металу).

Вивчаючи фотоелектричний ефект як самостійне явище, О. Г. Столетов, на основі своїх дослідів, зробив такі висновки [6]:

- під дією світла метал втрачає негативно заряджені частинки;
- сила фотоструму зростає пропорційно освітленості пластини;
- найбільшу дію проявляють ультрафіолетові промені.

«Експериментальні дослідження фотоефекту в металах показали, що це явище залежить не лише від хімічної природи металу, а і від стану його поверхні» [6]. На емісію електронів під дією світла значною мірою можуть впливати навіть дуже малі забруднення поверхні металу, тому для вивчення цього ефекту користуються вакуумною трубкою, схема якої зображена на рис. 1.1 [6]. Криві залежності сили фотоструму I від напруги U , які відповідають двом різним енергетичним освітленням катода зображена на рис 1.2.

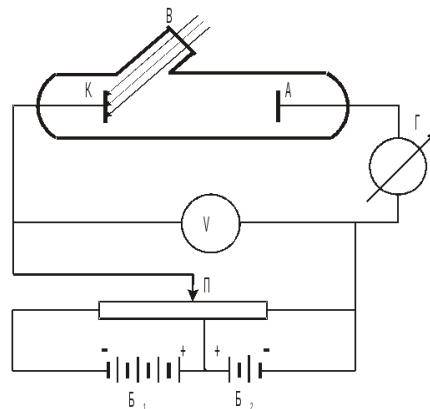


Рис. 1.1. Схема експериментальної установки для вивчення фотоефекту [6], де К – катод; А – анод; В – вікно трубки; П – потенціометр; Г – гальванометр; V – вольтметр; Б₁ та Б₂ – дві акумуляторні батареї

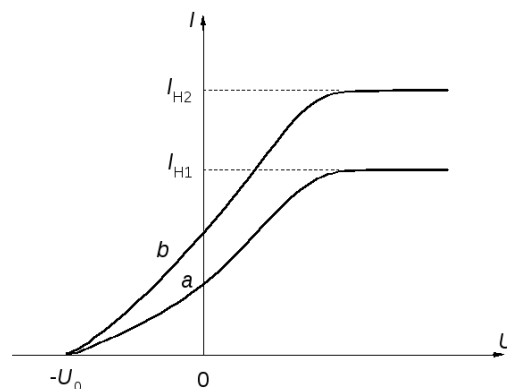


Рис. 1.2. Залежність сили фотоструму I від напруги U ($b > a$) [6]

Фотогальванічним ефектом називають виникнення електрорушійної сили внаслідок освітлення електронно-діркового переходу і ділянок напівпровідників, що примикають до нього [7]. Явище може бути викликано або круговим, або лінійно поляризованим світлом, які називаються, відповідно, круговим фотогальванічним ефектом (CPGE) і лінійним фотогальванічним ефектом (LPGE) [8].

Останніми роками фотогальванічний ефект спостерігали в декількох нових матеріалів [8]. Авторами [9] було встановлено, що GaAs/AlGaAs (різновид двовимірного електронного газу) демонструє як круговий так і лінійний фотогальванічні ефекти. В роботах [10-12] круговий фотогальванічний ефект також було виявлено в топологічних ізоляторах, таких як HgTe та Sb₂Te₃. CPGE також було виявлено в деяких напівметалах Вейля [13].

На рис. 1.3 зображено *p-n* структуру, у якій *p-n* перехід та прилягаюча до нього частина *p*- та *n*- областей піддаються дії випромінювання [7]. «Потік падаючих на напівпровідник фотонів створює в ньому деяку кількість рухливих носіїв зарядів – електронів і дірок» [7]. «Частина з них, дифундуючи до переходу, досягає його границі, не встигнувши рекомбінувати» [7]. «На границі переходу електронно-діркові пари розділяються електричним полем переходу» [7]. «Неосновні носії, для яких поле *p-n* переходу прискорює, викидаються цим полем за перехід: дірки в *p*-, а електрони в *n*- області» [7]. «Основні носії зарядів затримуються полем переходу у своїй області» [7]. Це створює контактну різницю потенціалів [14]

$$U_k = SE_k, \quad (1.1)$$

де S – ширина прикордонного шару; E_k – напруженість електричного поля; та потенціальний енергетичний бар'єр для основних носіїв із зарядом e [14]

$$V_k = e - U_k. \quad (1.2)$$

«Напруженість наведеного електричного поля E_k перешкоджає дифузії електронів за межі прикордонного шару шириною S » [14]. Контактна різниця потенціалів U_k може бути знайдена за наступною формулою [14]:

$$U_k = \frac{kT}{e} \ln \left(\frac{P_p}{P_n} \right) = \frac{kT}{e} \ln \left(\frac{n_n}{n_p} \right), \quad (1.3)$$

де k – стала Больцмана; e – заряд електрона; P_p і P_n – концентрація дірок та електронів в p - та n - областях.

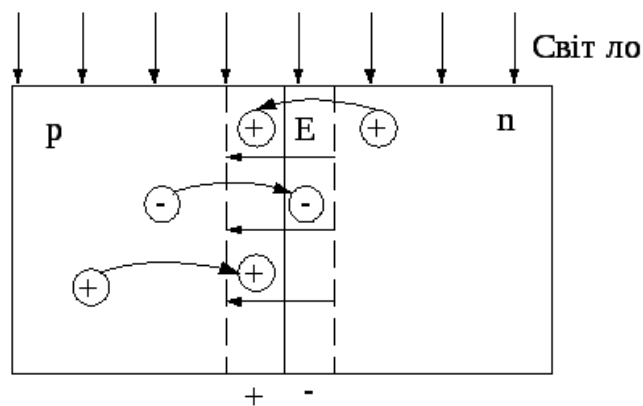


Рис. 1.3. Схематичне зображення p - n структури, яка піддається дії світла [7]

Величина утвореної на p - n переході фото-електрорушійної сили (фото - е. р. с.) залежить від інтенсивності світлового потоку [7]. Електричний струм під дією фото - е. р. с. можна створити замкнувши ланцюг p - n структури, сила струму якого буде залежати від величини світлового потоку та опору навантаження [7]. Схема вмикання напівпровідникового фотоелемента зображена на рис. 1.4.

При опроміненні фотоелемента фотони (енергія яких дорівнює добутку частоти хвилі випромінювання на постійну Планка) стикаються із зв'язаними (валентними) електронами кристалу, які мають деякі енергетичні рівні E_p [14]. «Якщо енергія фотонів, що потрапляють на фотоелемент більша за E_p , то електрон кристалу покидає свій рівень і залишає «дірку» в кристалі» [14]. Пари електрон-дірка поділяються, p - n перехід та різниця потенціалів на електродах

збільшуються [14]. На рис. 1.5 зображено зонну діаграму енергетичних рівнів p - n переходу при освітленні та без освітлення. Для кожного напівпровідника існує гранична енергія фотонів, коли подальше її збільшення не спричиняє зростання віддачі фотоелемента, а надмірна енергія іде лише на його нагрівання [14].

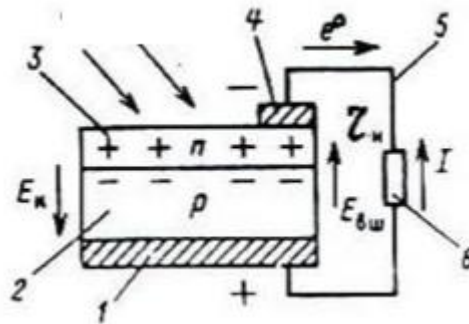


Рис. 1.4. Схема вмикання напівпровідникового фотоелемента [14]: 1 та 4 – металеві електроди; 2 – шар напівпровідника p -типу; 3 – шар напівпровідника n -типу; 5 – провідники; 6 – навантаження (або інші фотоелементи, що з'єднуються в батарею)

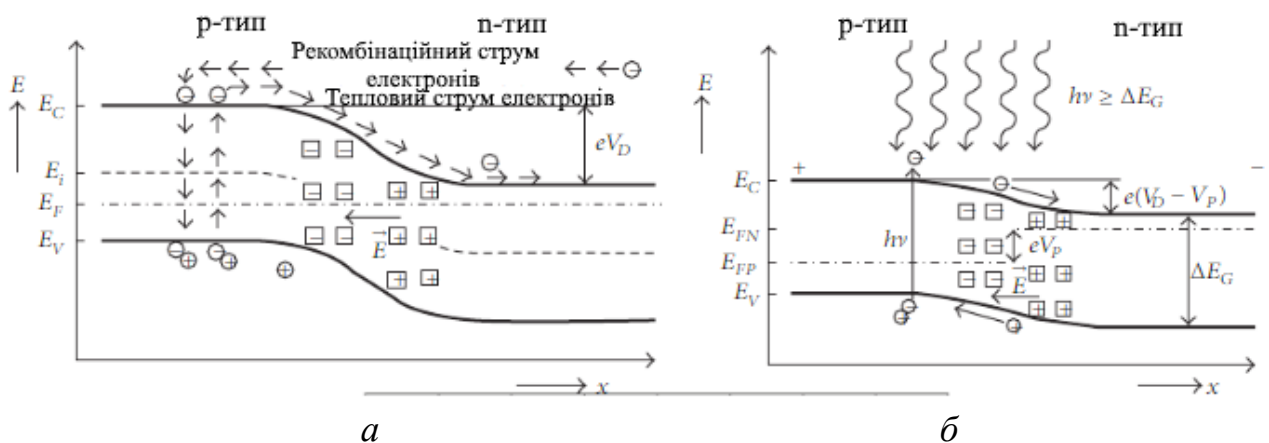


Рис. 1.5. Зонна діаграма енергетичних рівнів p - n переходу [15]: а – не освітлюється, б – освітлюється; E_F – рівень енергії Фермі; E_i – центр забороненої зони; E_V – край валентної зони; E_C – край зони провідності; ΔE_G – рівень забороненої зони; V_D – напруга розсіювання; V_P – фотоелектрична напруга; \vec{E} – напруженість електричного поля; ν – частота; h – стала Планка; x – координата, перпендикулярна до p - n переходу

«Зазначена смуга поглинання залежить від основного матеріалу фотоелемента, кількості і товщини шарів напівпровідника, їхнього розташування стосовно до падаючого світла, легуючих матеріалів тощо» [14]. На рис. 1.6. авторами [14] зображена залежність максимальної очікуваної ефективності у відсотках одношарових елементів із різних матеріалів, а також її залежність від температури. На ньому також зображені граничні значення ширини забороненої зони для різних матеріалів напівпровідників [14].

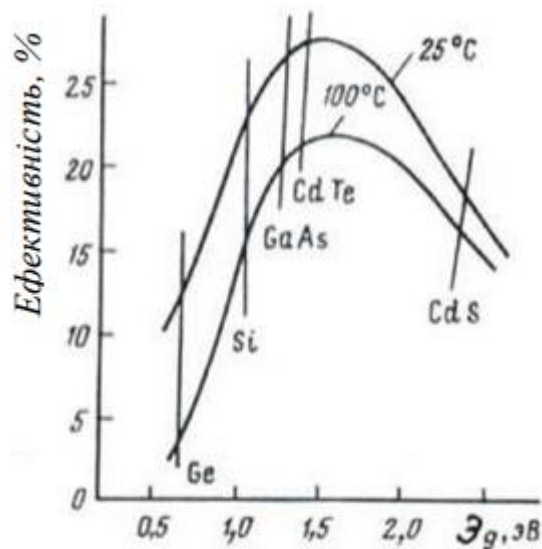


Рис. 1.6. Залежність ефективності фотоелемента від температури та матеріалу [14]

З рисунка видно, що ефективність будь-якого фотоелемента при підвищенні температури знижується [14]. Найкращі термічні характеристики із найбільш поширених сьогодні матеріалів має арсенід галію [14].

1.2. Види та конструкції фотоелектричних комірок

Для ефективного перетворення сонячної енергії в електричну використовують фотоелектричні комірки (також сонячний елемент, фотогальванічний елемент, фотоелектричний перетворювач), які працюють за рахунок явища фотоелектричного ефекту. Якщо кілька фотоелектричних

комірок електрично з'єднані певним чином між собою, загорнуті в скло або пластик, а для жорсткого зв'язку і захисту з'єднані з використанням алюмінієвої рами, такий пристрій називають сонячною панеллю [16]. Для підвищення ефективності виходу комірок, використовують різні шляхи комбінації [17]:

- послідовна комбінація – якщо послідовно з'єднано більше двох елементів один з одним, то вихідний струм комірки залишається таким же, а вихідна напруга збільшується;
- паралельна комбінація – при паралельній комбінації напруга елементів залишається такою же, а величина струму стає більшою;
- послідовно-паралельна комбінація – величина струму і напруги зростають. Авторами [14] вказано умови, які потрібно дотримуватися для ефективної роботи сонячного елемента:
 - оптичний коефіцієнт поглинання активного шару напівпровідника повинен бути достатньо великим, щоб забезпечити поглинання більшої частини енергії сонячного випромінювання в межах товщини шару;
 - електрони і дірки, що генеруються опроміненням, повинні ефективно збиратися на контактних електродах з обох боків активного шару;
 - сонячний елемент повинен мати значний потенціальний енергетичний бар'єр у $p-n$ переході;
 - для зменшення втрат потужності під час роботи, опір (за винятком опору навантаження), підключений послідовно з сонячним елементом, має бути невеликим;
 - структура тонкої плівки повинна бути однорідною по всій активній області сонячного елемента, щоб закорочування і шунтуючий опір не впливали на властивості елемента

За своїми технологічними особливостями, напівпровідникові сонячні елементи поділяються на декілька типів, серед яких домінуючими на світовому ринку сьогодні є монокристалічні, полікристалічні та тонкоплівкові.

Високоєфективні фотоелектричні технології, включаючи арсенід галію та багатоперехідні елементи, є менш поширеними через їх високу вартість, але вони ідеально підходять для використання в космічних технологіях та концентрованих фотоелектричних системах [18].

Монокристалічні сонячні елементи (рис. 1.6 а) були одними із перших комерційно доступних та найбільш ефективних елементів. Вони виготовляються із монокристалічного кремнію, який механічно розпилюється на тонкі пластини, полірується та легується для створення необхідного *p-n* переходу, після чого покриваються антибліковим матеріалом, а в кінці додаються передні і задні металеві контакти [18]. Завдяки високій чистоті кремнію цей тип сонячних панелей має один із найвищих показників ефективності, згідно з [19], найновіші моделі досягають понад 20%. Ще одна перевага, яку слід враховувати, полягає в тому, що вони, як правило, трохи менше піддаються впливу високих температур порівняно з полікристалічними панелями [19].

В полікристалічних (або мультикристалічних) фотоелектричних комірках (рис. 1.6 б), замість єдиної однорідної кристалічної структури, містяться багато дрібних зерен кристалів. Одним із видів полікристалічних кремнієвих пластин для виготовлення елементів є стрічковий кремній, який формується шляхом витягування плоских тонких плівок з розплавленого кремнію (*edge-defined film-fed growth, EFG*) [20]. За даними [18], вони є найбільш розповсюдженими на світовому ринку, становлячи близько 70% світового виробництва фотоелектричної енергії в 2015 році. Згідно з [19], полікристалічні комірки мають меншу ефективність (приблизно 15%), менший термін служби та більш чутливі до високих температур, але процес їх виготовлення є набагато простішим та швидшим, порівнюючи з монокристалічними елементами, через що є набагато дешевшими.

Тонкоплівкові сонячні елементи (рис. 1.6 в) виготовляють шляхом розміщення однієї або кількох плівок фотоелектричного матеріалу (наприклад, аморфний кремній *a-Si*, селенід міді-індій-галію (*GIGS*) або телурид кадмію

CdTe) на підкладку, наприклад скло [19,21]. Результатом є дуже тонкий і гнучкий елемент, який використовує менше 1% кремнію, необхідного для кристалічного елемента [18]. Ці типи сонячних панелей є найпростішими у виробництві, а економія на масштабі робить їх дешевшими, ніж альтернативи, оскільки для їх виробництва потрібно менше матеріалів [19]. Відповідно до [18], ці елементи страждають від падіння ефективності на 20% протягом перших кількох місяців роботи до стабілізації, і тому продаються з номінальною потужністю, заснованою на їх зниженій потужності.

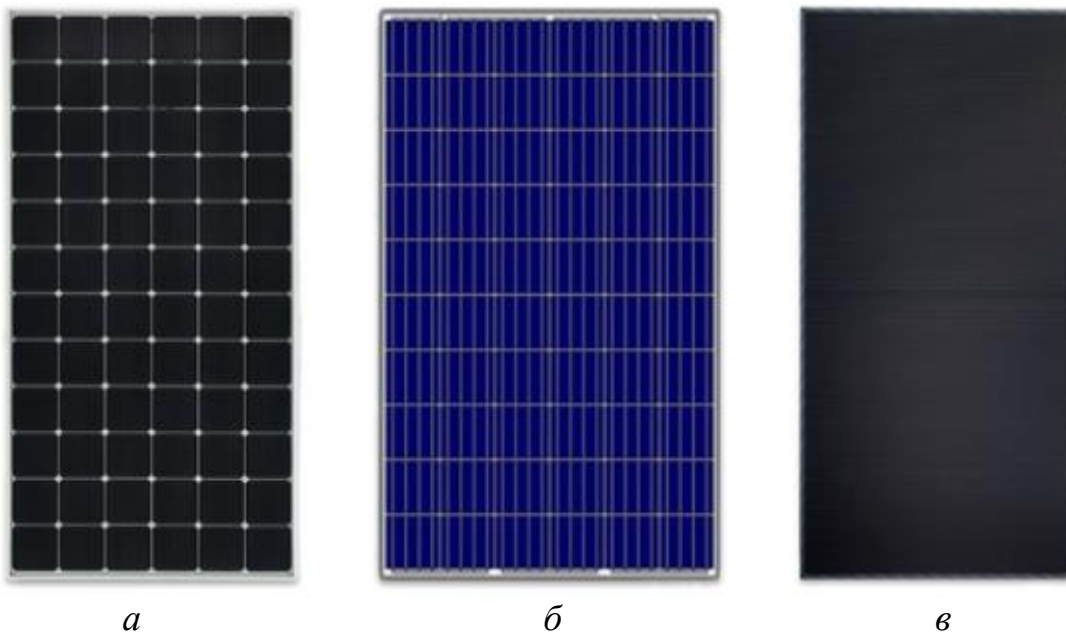


Рис. 1.6. Зовнішній вигляд сонячних панелей з використанням різних типів фотоелектричних комірок: а – монокристалічні; б – полікристалічні; в – тонкоплівкові [21]

Концентровані фотоелектричні елементи виробляють електричну енергію так само, як і звичайні фотоелектричні системи. Назва таких елементів СVP пов'язана з тим, що робить їх такими ефективними порівняно з іншими типами сонячних панелей: вигнуті дзеркальні поверхні, лінзи та іноді навіть системи охолодження використовуються для збирання сонячних променів і таким чином підвищення їх ефективності, сонячний трекер всередині сонячної панелі відповідає за спостереження за сонцем, що і дає такий високий показник

ефективності [19]. Відповідно до [19], коефіцієнт корисної дії таких багатокомпонентних сонячних панелей досягає 41%, що є найвищим показником серед усіх фотоелектричних систем.

Таблиця 1.1

Типи фотоелектричних елементів [19]

Тип елементу	Ефективність	Переваги	Недоліки
Монокристалічні (Mono-Si)	~20%	Висока ефективність; оптимізовано для комерційного використання; висока вартість терміну служби	Висока вартість
Полікристалічні (p-Si)	~15%	Низька ціна	Чутливий до високих температур; менший термін служби
Тонкоплівкові з аморфного кремнію (a-Si)	~7-10%	Відносно низька ціна; простий у виготовленні та гнучкий	Коротші гарантії та термін служби
Концентровані (CVP)	~41%	Дуже висока продуктивність і ефективність	Потрібен сонячний трекер і система охолодження (для досягнення високої ефективності)

На сьогоднішній день однією із перспективних технологій виробництва фотоелектричних комірок є використанням наноструктур та наноструктурованих матеріалів, які можуть уможливити створення сонячних елементів наступного покоління, забезпечуючи ефективне розділення зарядів і регульоване оптичне поглинання [22]. Напівпровідникові нанодроти (NWs) продемонстрували багатообіцяну ефективність як окремі фотоелектричні елементи і як вертикальні масиви, сконфігуровані як фотоелектричні та фотоелектрохімічні сонячні елементи, де вертикальний масив використовується

для посилення поглинання світла [22]. Використання нанодротів дозволяє значно зменшити потреби в матеріалах і має потенціал перевищити продуктивність звичайних пристроїв після оптимізації синтезу та обробки для якості матеріалів, пасивації поверхні та мінімізації контактного опору [23]. Нанодротяні фотоелектричні комірки у поєднанні з сучасною технологією кремнієвих комірок мають потенціал одночасного забезпечення дуже високої продуктивності, ефективного використання матеріалів і низької вартості [23].

Згідно авторів [23], ефективність сонячних елементів на основі нанодротів стрімко зростає, з останніми рекордними показниками ефективності 13,5% для нанодротів, вирощених на основі фосфіду індію (InP), і 15,3%, вирощених на основі арсеніду галію (GaAs). Поточний рекорд ефективності 17,8% зафіксований для нанодротів з гравіюванням InP зверху вниз [23].

Значний інтерес до підвищення ефективності збору сонячної енергії обумовлює використання нанодротяних сонячних елементів з *p-i-n* структурою. У *p-i-n* структурі шар між *p*-легованим і *n*-легованим шарами залишається нелегованим (власним), вбудований потенціал такий самий, як і в *p-n* переході, але електричне поле та область виснаження поширюються на більш широку область [24]. Це вигідно для матеріалів з короткою дифузійною довжиною неосновних носіїв, тому що генеровані світлом носії мають меншу ймовірність рекомбінації перед тим, як їх зібрати [24]. Зараз широко визнано, що такі структури забезпечують надзвичайно ефективний збір носіїв, ця технологія знижує вимоги до якості матеріалів, що призводить до зниження витрат на матеріали [24].

Подібні структури фотоелектричних комірок та їх характеристики можуть бути змодельовані та вивчені за допомогою застосування відповідних САПР із високоточними моделями, таких як Silvaco TCAD, Comsol Multiphysic та інші [24,25]. Результати моделювання дають змогу краще зрозуміти фізичні процеси, що відбуваються в структурах нанодротяних сонячних елементів.

РОЗДІЛ 2

МЕТОДИКА І ТЕХНІКА ЕКСПЕРИМЕНТУ

2.1. Методика моделювання в Silvaco TCAD

Основою компактного проектування приладових структур є використання відповідних САПР (система автоматизованого проектування і розрахунку) із високоточними моделями. Технологічні засоби автоматизованого проектування надають чудову можливість проектувати та оптимізувати процеси виробництва інтегральних схем (ІС) з високою точністю та мінімальними експериментальними партіями, що призводить до значної економії коштів та прискорення часу виходу на ринок [26]. Завдяки цим перевагам, залежно від конкретного застосування засобів TCAD (Technology computer-aided design), цей підхід має великі перспективи для постачальників TCAD, технологів ІС та наукових дослідників [26].

Серед найбільш поширених в сучасній схемотехніці програмних пакетів для моделювання мікроелектронних пристроїв є Silvaco TCAD. Він представляє собою набір взаємопов'язаних між собою програм, які дозволяють проводити проектування стандартних технологічних процесів, електричних та фізичних характеристик, симуляцію та візуалізацію роботи електричних структур [27-30]. Silvaco TCAD забезпечує стабільний зв'язок між виробництвом і проектуванням, пов'язуючи виробничі допуски зі змінною продуктивністю [31]. Крім того, додаткові модулі дозволяють досліджувати концепції передових квантово-розмірних пристроїв, серед яких – різноманітні транзистори з високою рухливістю електронів (HEMT) на основі квантових гетероструктур GaAs, InP, GaN, AlGaIn та SiC [31].

До складу Silvaco TCAD входять DeckBuild, ATHENA, ATLAS, інструменти візуалізації TonyPlot та TonyPlot3D. Їх взаємозв'язок зображений на рис. 2.1. Типовий алгоритм проектування в Silvaco TCAD зображено на рис. 2.2.

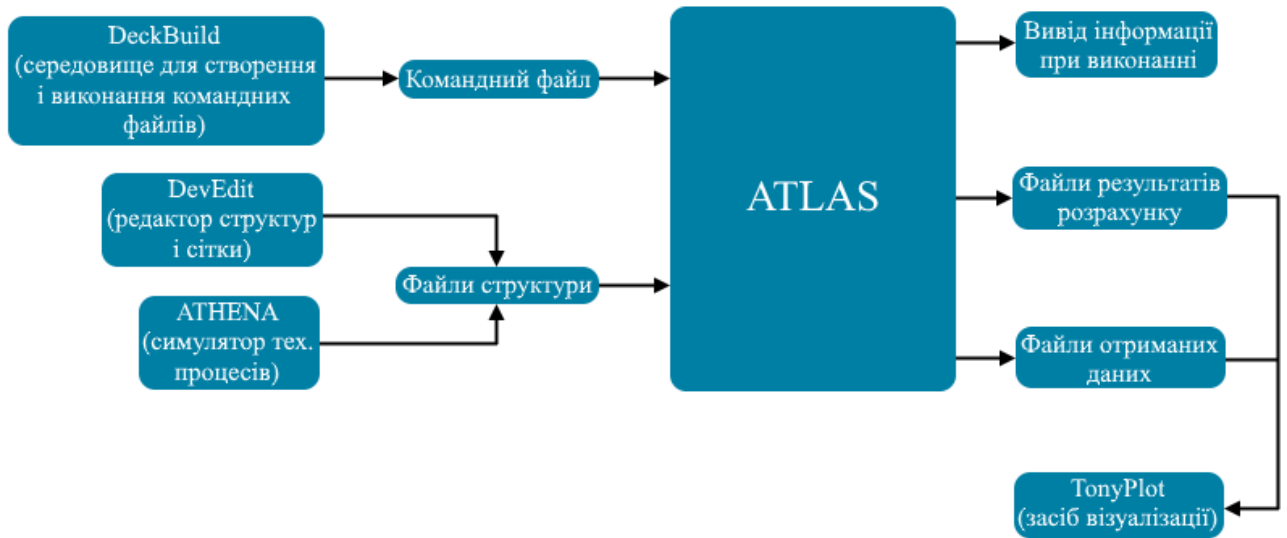


Рис. 2.1. Блок-схема основних складових набору Silvaco TCAD. Адаптовано з [27]

DeckBuild – інтерактивне графічне середовище виконання для розробки вхідних блоків моделювання процесів та пристроїв [28]. Він використовується для створення і виконання командних файлів, задання порядку виконання дій, запуску і координування інших програм [28]. ATHENA – це симулятор, який надає загальні можливості для чисельного фізичного двомірного моделювання напівпровідникових приладів, стандартних технологічних процесів [29].

ATLAS – це модульна розширювана структура для моделювання одно-, дво- та тривимірних напівпровідникових пристроїв [27]. Він реалізований із застосуванням сучасних методів розробки програмного забезпечення, які сприяють надійності, зручності обслуговування та розширюваності [27]. ATLAS передбачає електричну поведінку визначених напівпровідникових структур і дає уявлення про внутрішні фізичні механізми, пов’язані з роботою пристрою [27]. ATLAS надає повний набір фізичних моделей, включаючи [31]:

- моделювання малих сигналів постійного і змінного струму та перехідних процесів;
- дрейф-дифузійні транспортні моделі;
- моделі енергетичного балансу і гідродинамічного переносу;

- статистику Фермі-Дірака і Больцмана;
- розширені моделі рухливості;
- омічні контакти, контакти Шоттки та ізолюючі контакти;
- квантові моделі переносу тощо.



Рис. 2.2. Алгоритм проектування в Silvaco TCAD. Адаптовано з [27,28]

Симулятор ATLAS використовує два вхідних файли: перший містить команди для ATLAS, які зазвичай вказують на файл, що визначає структуру пристрою (створений за допомогою DevEdit), щоб визначити розміри, термінали та сітчасту структуру пристрою; другий відповідає за визначення моделей фізичних явищ, методи вирішення та команди зміщення терміналів, які необхідно враховувати при моделюванні пристрою [33]. Після завершення роботи ATLAS створює три типи вихідних файлів: перший містить усі повідомлення про помилки та попередження; другий – це файл журналу, який містить значення напруги та струму на основі аналізу пристрою (які можна візуалізувати за допомогою інструмента TonyPlot); останній – файл структури, що зберігає графічні дані, пов’язані зі значеннями змінних (який теж можна візуалізувати) [27, 33].

Для створення відносно простих структур використовуються засоби DevEdit та ATLAS, то як для більш складних – ATHENA та VICTORY (тривимірний симулятор технологічних процесів). До загальної техніки моделювання за допомогою симулятора ATLAS входять наступні кроки [31]:

- визначення структури;
- задання початкової сітки;
- специфікація матеріалів та моделей;
- вибір числового методу для обчислень;
- аналіз результатів;
- підтвердження моделі.

Слід відмітити, що ATHENA дозволяє моделювати травлення, окислення, напилення, дифузії для 2D структур, налаштування яких зручно виконувати за допомогою генератора команд DeckBuild [27-29].

Результати моделювання залежать від реальних умов експерименту і параметрів використовуваної моделі, які, в свою чергу, можуть залежати від експериментальної установки і реальних умов [26]. Існує два способи покращити прогностичну здатність і точність моделей, що розробляються: перший – розробка нових моделей, які включають точніші фізичні явища, і впровадження їх у симулятор TCAD, але цей підхід вимагає додаткового фінансування, часу і відповідних даних; другий – калібрування моделей, створених у наявному програмному забезпеченні TCAD, що передбачає вибір відповідної фізичної моделі, визначення етапів та умов процесу, а також налаштування параметрів моделі таким чином, щоб ці параметри не тільки підходили для конкретного реального експерименту, але й реагували на зміни експериментальних параметрів [26]. Калібрування моделей є важливим і нетривіальним завданням, деякі з проблем перераховані нижче [26]:

- існує занадто багато параметрів, які необхідно калібрувати, особливо для некремнієвих матеріалів, де майже всі змінні потребують калібрування;

- в деяких випадках фізичні моделі важко описати навіть для стандартних процесів (силіціювання, відокремлення домішок, утворення дефектів, генерування напружень тощо), деякі з них все ще знаходяться на стадії розробки та не реалізовані в TCAD;
- зазвичай параметри фізичних моделей не піддаються безпосередньому вимірюванню (рухливість носіїв, швидкість окислення, коефіцієнти сегрегації тощо);
- для фізичних процесів, таких як травлення та осадження, майже всі параметри швидкості залежать від обладнання та потребують калібрування;
- деякі параметри технологічного моделювання процесів не відповідають реальним умовам і параметрам обладнання, а в багатьох випадках TCAD-моделі не мають таких параметрів в реалізації;
- неможливо врахувати в моделях всі фізико-хімічні процеси і явища всередині структури;
- при проведенні експериментів виникають похибки, деякі з яких неможливо проконтролювати або оцінити.

Щоб спростити етапи калібрування і підвищити точність моделювання, розробники створили різні спеціальні інструменти для калібрування і програми чисельної оптимізації [26].

2.2. Чисельне моделювання фотоелементів на основі нанодротів

За допомогою інструментів Silvaco TCAD були розроблені та досліджені коаксіальні *p-i-n* структури фотоперетворювачів на основі нанодротів [32]. В симуляторі ATLAS3D параметр CYLINDRICAL дозволяє створити загальну циліндричну структуру [34]. Оператор MESH має виглядати так: MESH THREE.D CYLINDRICAL, де параметр THREE.D інформує симулятор про створення повністю тривимірної сітки [34]. На відміну від ATLAS2D, де структура є тілом обертання навколо осі $X=0$, і, отже, не має кутової залежності,

в ATLAS3D використання параметра CYLINDRICAL дозволяє моделювати пристрій із повним радіальними, кутовими та осьовими змінами [35]. Приклад циліндричної структури, яка була створена з використанням цього параметра, зображено на рис. 2.3 а, на рис. 2.3 б зображено переріз структури, що показує деталі сітки. Під час визначення параметра CYLINDRICAL потрібно вказати структуру в термінах радіуса, кута та декартових координат Z [34]. Під час виконання програмного коду симулятор готує звіт у вигляді числових даних про електричні параметри проєктованих структур, відображає темнові та світлові вольт-амперні характеристики (AM1.5G illumination, 1 sun) та 3D геометрію [32].

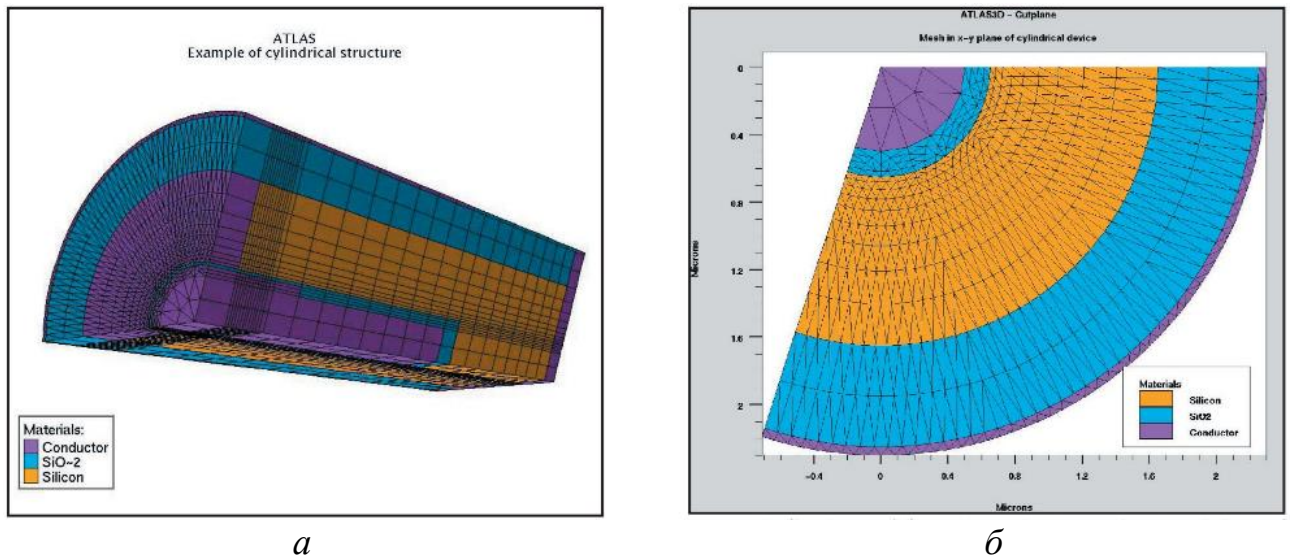


Рис. 2.3. Приклад циліндричної структури (а) та її переріз (б), що показує деталі сітки [35]

Фізичні особливості переносу заряду встановлюються за допомогою оператора «models fermi ni.fermi cvt srh temperature», враховуючи розмірність досліджуваних структур, концентраційні розподіли домішок та температурну залежність [32]. Параметр «fermi» дозволяє вказати дрейфово-дифузійний транспорт носіїв заряду в рамках статистики Фермі-Дірака, параметр «srh» дозволяє врахувати багато фізичних процесів, у тому числі механізми

рекомбінації Шоклі-Ріда-Холла, які є домінуючими в таких структурах і повинні бути враховані при моделюванні їх електричних параметрів [32].

Нижче авторами [34] наведено приклад програмного коду для розрахунку нанодротяних фотоперетворювачів при температурі 300 К:

```
go atlas
mesh cylindrical three.d
r.mesh l=0 spacing=0.05
r.mesh l=0.08 spacing=0.01
r.mesh l=0.16 spacing=0.05
r.mesh l=0.19 spacing=0.01
a.m l=0 spac=60
a.m l=360 spac=60
z.mesh l=0 spacing=0.01
z.mesh l=0.03 spacing=0.01
z.mesh l=0.11 spacing=0.025
z.mesh l=3.105 spacing=1
z.mesh l=3.11 spacing=0.0015
region num=1 material=Silicon a.min=0 a.max=360 z.min=0 z.max=0.03 r.min=0
r.max=0.19
region num=2 material=Silicon a.min=0 a.max=360 z.min=0.03 z.max=3.105
r.min=0.16 r.max=0.19
region num=3 material=Silicon a.min=0 a.max=360 z.min=0.03 z.max=0.11 r.min=0
r.max=0.16
region num=4 material=Silicon a.min=0 a.max=360 z.min=0.11 z.max=3.105
r.min=0.08 r.max=0.16
region num=5 material=Silicon a.min=0 a.max=360 z.min=0.11 z.max=3.11 r.min=0
r.max=0.08
region num=6 material=air a.min=0 a.max=360 z.min=3.105 z.max=3.11 r.min=0.08
r.max=0.29
electrode name=cathode a.min=0 a.max=360 r.min=0 r.max=0.19 z.min=0 z.max=0
```

```

electrode name=anode a.min=0 a.max=360 r.min=0 r.max=0.19 z.min=3.11
z.max=3.11
doping region=1 uniform n.type conc=5e+17
doping region=2 uniform n.type conc=5e+17
doping region=3 uniform n.type conc=1e+14
doping region=4 uniform n.type conc=1e+14
doping region=5 uniform p.type conc=4e+16
save outf=solarex14_0.str
beam num=1 z.origin=-2.0 raytrace=solarex14_1.str
x.origin=0 y.origin=0 phi=0.0 theta=90 nx=10 nz=10 power.file=solarex14.spec
models fermi ni.fermi cvt srh temperature=300
method BICGST
solve init
log outf=solarex14_0.log
solve previous
solve vstep=0.02 vfinal=0.55 name=anode
log off
solve init
solve b1=1
log outf=solarex14_1.log
solve previous
solve vstep=0.02 vfinal=0.55 name=anode
tonyplot -overlay solarex14_0.log solarex14_1.log -set solarex14_0.set
tonyplot3d solarex14_1.str -set solarex14_1.set
extract init inf="solarex14_1.log"
extract name="Jsc" y.val from curve(v."anode", i."cathode") where x.val=0.0
extract name="Voc" x.val from curve(v."anode", i."cathode") where y.val=0.0
extract name="Pm" max(curve(v."anode", (v."anode" * i."cathode")))
extract name="Vm" x.val from curve(v."anode", (v."anode"*i."cathode") ) \
where y.val="$Pm"

```


extract name="Im" "\$Pm"/"\$Vm"

extract name="FF" ("Pm"/("\$Jsc"*"\$Voc"))

extract name="Eff" ("Pm"/((3.14157*(0.19)*(0.19)*1e-8*0.1))*100

Результати чисельного моделювання сонячних елементів на основі нанодротів та їх параметрів приведені у наступному розділі.

РОЗДІЛ 3

РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

3.1. Модель транспорту носіїв заряду

Для вирішення питань транспорту носіїв заряду у напівпровідникових та наноструктурних пристроях існують безліч транспортних моделей, кожна з яких має свої переваги та обмеження. Вибір моделі залежить від програми (явища), що моделюється, доступних обчислювальних ресурсів та часу [36]. З фізичної точки зору привабливо вибирати найбільш фундаментальні моделі, але вони можуть бути неможливими з обчислювальної точки зору або не потрібними для певного завдання [36].

Роки досліджень привели до математичної моделі, яка складається з набору фундаментальних рівнянь, які пов'язують між собою електростатичний потенціал і густини носіїв у певній області моделювання [27]. Авторами [27] зазначено, що ці рівняння були отримані з рівняння Пуассона, рівнянь безперервності та транспортних рівнянь. Рівняння Пуассона пов'язує варіації електростатичного потенціалу з локальною густиною заряду, рівняння безперервності та транспорту описують шлях, яким густина електронів і дірок розвивається в результаті процесів транспорту, процесів генерації та процесів рекомбінації [27]. Ця модель покладена в основу чисельного моделювання в системі ATLAS (симулятора Silvaco TCAD) [27].

Електростатичний потенціал пов'язаний із густиною просторового заряду рівнянням Пуассона [32]:

$$\operatorname{div}(\varepsilon \nabla \psi) = -\rho, \quad (3.1)$$

де ψ – електростатичний потенціал; ε – локальна діелектрична проникність; ρ – локальна густина просторового заряду.

Залежність між напруженістю електричного поля та електростатичним потенціалом встановлено наступним рівнянням (векторні величини виділені жирним шрифтом) [32]:

$$\mathbf{E} = -\nabla\psi. \quad (3.2)$$

Швидкість зміни концентрації носіїв заряду визначають рівняння неперервності [32]:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q}\operatorname{div}\mathbf{J}_n + G_n - R_n, \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{q}\operatorname{div}\mathbf{J}_p + G_p - R_p, \quad (3.4)$$

де \mathbf{J}_n та \mathbf{J}_p – щільність струму електронів та дірок; G_n та G_p – швидкість генерації електронів та дірок; R_n та R_p – швидкість рекомбінації електронів та дірок; q – заряд електрона.

Рівняння для визначень значень \mathbf{J}_n , \mathbf{J}_p , G_n , G_p , R_n та R_p відрізняються залежно від використовуваної транспортної моделі [32]. Дрейф-дифузійна транспортна модель є найпростішою моделлю переносу заряду для напівпровідників [37]. Авторами [37] вказано, що ця модель була адекватною для більшості напівпровідникових пристроїв, які були можливими згідно з галузевими стандартами процесу, однак вона стає менш точним для пристроїв з коротким каналом. Тому більш точні моделі стають популярними для моделювання та симуляції пристроїв глибокого субмікронного діапазону [37]. Інструмент Silvaco TCAD поєднує в собі як дрейфово-дифузійну, так і вдосконалену транспортну модель [37]. Рівняння базової дрейф-дифузійної моделі [32]:

$$\mathbf{J}_n = qn\mu_n\mathbf{E}_n + qD_n\nabla n, \quad (3.5)$$

$$\mathbf{J}_p = qp\mu_p\mathbf{E}_p + qD_p\nabla p, \quad (3.6)$$

де μ_n та μ_p – рухливості носіїв для електронів та дірок; D_n та D_p – коефіцієнти дифузії для електронів та дірок.

Статистики Больцмана та Фермі-Дірака використовуються для подальших розрахунків, таких як визначення коефіцієнтів дифузії [32]. Друга більш придатна для моделювання об'єктів малих розмірів та областей с високим легуванням [32]. Рівняння Ейнштейна для коефіцієнтів дифузії в рамках статистики Больцмана виглядає наступним чином [32]:

$$D = \frac{kT_L}{q} \mu, \quad (3.7)$$

де k – стала Больцмана; T_L – температура решітки.

Рівняння для коефіцієнтів дифузії в рамках статистики Фермі-Дірака для електронів та дірок такі [32]:

$$D = \frac{\left(\frac{kT_L}{q}\mu_n\right)F_{1/2}\left\{\frac{1}{kT_L}[\varepsilon_{Fn}-\varepsilon_c]\right\}}{F_{-1/2}\left\{\frac{1}{kT_L}[\varepsilon_{Fn}-\varepsilon_c]\right\}}, \quad (3.8)$$

$$\varepsilon_{Fn} = -q\phi_n = \psi - \frac{kT_L}{q} \ln\left(\frac{n}{n_{ie}}\right), \quad (3.9)$$

де F_α – інтеграл Фермі-Дірака порядку α ; ε_c – енергія зони провідності; ε_{Fn} – заданий квазі-рівень Фермі; ϕ_n – квазіпотенціал Фермі; n_{ie} – ефективна власна концентрація носіїв.

Авторами [32] було встановлено, що базова дрейф-дифузійна модель не враховує квантових ефектів, таких як хвильова природа носіїв заряду, що є її недоліком. У сонячному елементі з використанням нанодротів рух носіїв заряду обмежений в одному напрямку, що впливає на радіальну густину зарядів і станів [32]. В роботі [32] зазначено, що квантові ефекти можна змоделювати в самоузгодженій пов'язаній моделі Шредінгера-Пуассона (Self-Consistent Coupled Schrödinger-Poisson Model), але вона не може незалежно врахувати

транспортні властивості матеріалів, тому ця модель використовується в поєднанні з методом простору режимів дрейф-дифузії (Drift-Diffusion Mode-Space Method) або підходом нерівноважної функції Гріна з простором режимів (Mode Space Non-Equilibrium Green's Function Approach). Для моделювання нанодротяних пристроїв використовуються рівняння Шредінгера для електронів та дірок в циліндричних координатах, які можна знайти в [27].

Перспективним напрямком досліджень є вивчення температурних залежностей параметрів сонячних елементів [32]. Авторами [38] було розглянуто фізику процесів, що визначають температурну чутливість фотоелектричних перетворювачів та методику визначення температурних коефіцієнтів електричних параметрів нанодротяних сонячних елементів [32]. Авторами [39] досліджено вплив температури на значення напруги холостого ходу U_{oc} , густини струму короткого замикання J_{sc} , форм фактору FF та ефективності μ для нанодротяних сонячних елементів на основі кремнію, було отримано типовий характер температурних залежностей, але з підвищенням температури спостерігається зменшення величини J_{sc} , що може бути пов'язане зі збільшенням ефекту поверхневої рекомбінації носіїв заряду [32].

3.2. Геометрія досліджувальної структури

У цій частині представлено результати чисельного моделювання коаксіальних $p-i-n$ структур фотоперетворювачів на основі нанодротів Si та InP. На рис. 3.1 а зображено фотогальванічний елемент, розташований між електродами. Він має загальну довжину 3,11 мкм та діаметр 380 нм. Його структура має наступний вигляд: позитивно заряджений центральний шар p -типу, нейтральний внутрішній шар i -типу та зовнішній негативно заряджений шар n -типу. В роботі [32] було встановлено, що перевагою круглого перерізу полягає в тому, що після генерації фотоном пари електрон-дірка в i -області, електрони, рухаючись радіально від центру до збідненого дифузіїю контактного шару зовнішньої n -оболонки, та дірки, рухаючись всередину до збідненого

дифузією шару p -області, рухаються на набагато меншу відстань, ніж у плоских комірках, щоб досягти контактів, які їх збирають.

В роботі [24] було досліджено вплив основних конструкційних параметрів, таких як довжина нанодроту, радіус та рівень легування, на ефективність структури. Ефективність прямо пропорційна довжині, меншій за дифузійну довжину, що пояснюється збільшенням кількості поглинутих фотонів [24]. Збільшення ефективності відбувається поки довжина не зрівняється з дифузійною довжиною, після чого відбувається зменшення загального струму на одиницю площі через насичення кількості генерованих носіїв [24]. На рис. 3.3 а зображено відношення довжини нанодроту до ефективності. Зі збільшенням радіусу нанодроту до значень дифузійної довжини матеріалу (рис 3.3 б) збільшується ефективність перетворення, але для радіусів більших за дифузійну довжину загальна ефективність зменшується [24]. Збільшення рівня легування впливає на ефективність до значення 10^{21} см^{-3} , після чого відбувається ефективного насичується (рис. 3.3 в), однак збільшення рівня легування понад 10^{18} см^{-3} призводить до повного виснаження переходу [24].

При розрахунку електричних властивостей коаксіальних сонячних елементів з нанодротів Si та InP було обрано однакові геометричні структури (рис. 3.1 б) з наступними параметрами, які були досліджені у роботі [32]: p -область довжиною 3 мкм і діаметром 160 нм; i -шар довжиною 2,995 мкм і товщиною 80 нм; n -область довжиною 3,075 мкм та товщиною 30 нм. Товщина повітряного проміжку, який виконує роль ізолятора i - n ділянок відносно анода, становила 5 нм. Приконтатний катодний шар, легований донорною домішкою в концентрації $5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, мав товщину 30 нм; між цим шаром та i -областю знаходилась розділова область товщиною 80 нм з концентрацією донорної домішки $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$. Матеріал електродів був вибраний за змовчуванням в ATLAS, а його товщина – мінімальною. Під час проектування структур використовувалась така конфігурація профілів легування базових шарів: акцепторна домішка в об'ємі ядра мала концентрацію $4 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, проміжна

область легована донорною домішкою з концентрацією $1 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, а зовнішній шар був легований донорною домішкою з більшою концентрацією $5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

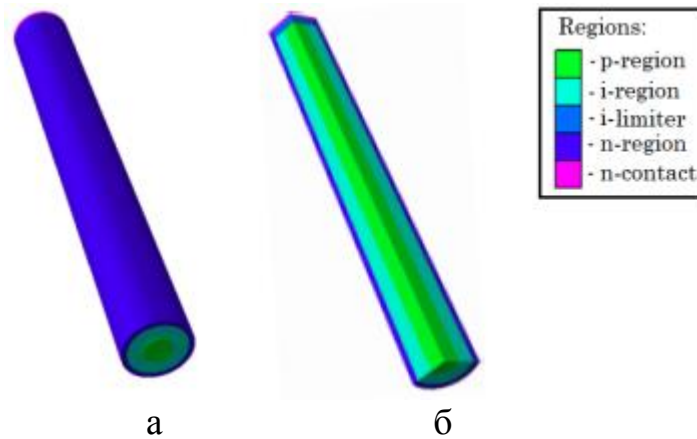


Рис. 3.1. 3D геометрія коаксiальної $p-i-n$ структури нанодротяного фотоперетворювача (а) та відповідного зрізу, що відображає окремі області (б) [32]

На рис. 3.2 зображено типові змодельовані темнові та світлові вольт-амперні характеристики для коаксiальних $p-i-n$ структур сонячних елементів на основі нанодротів кремнію при різних температурах.

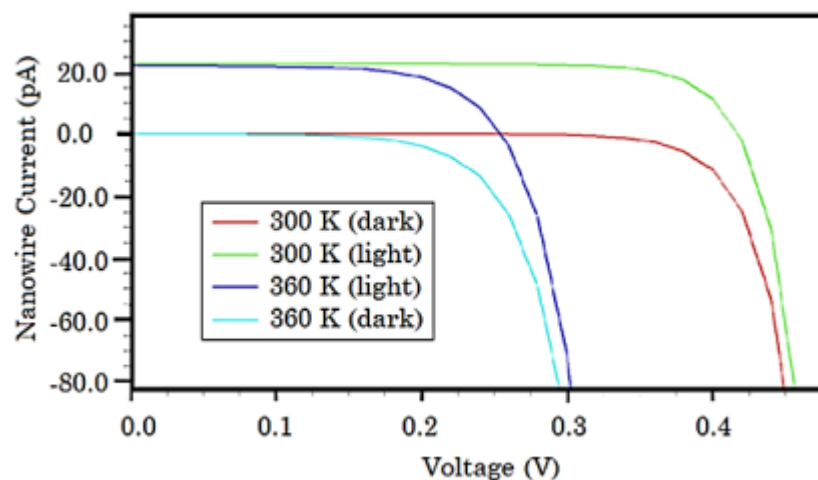


Рис. 3.2. Темнові (dark) та світлові (light) вольт-амперні характеристики нанодротяного фотоперетворювача на основі кремнію для температур 300 та 360 K [32]

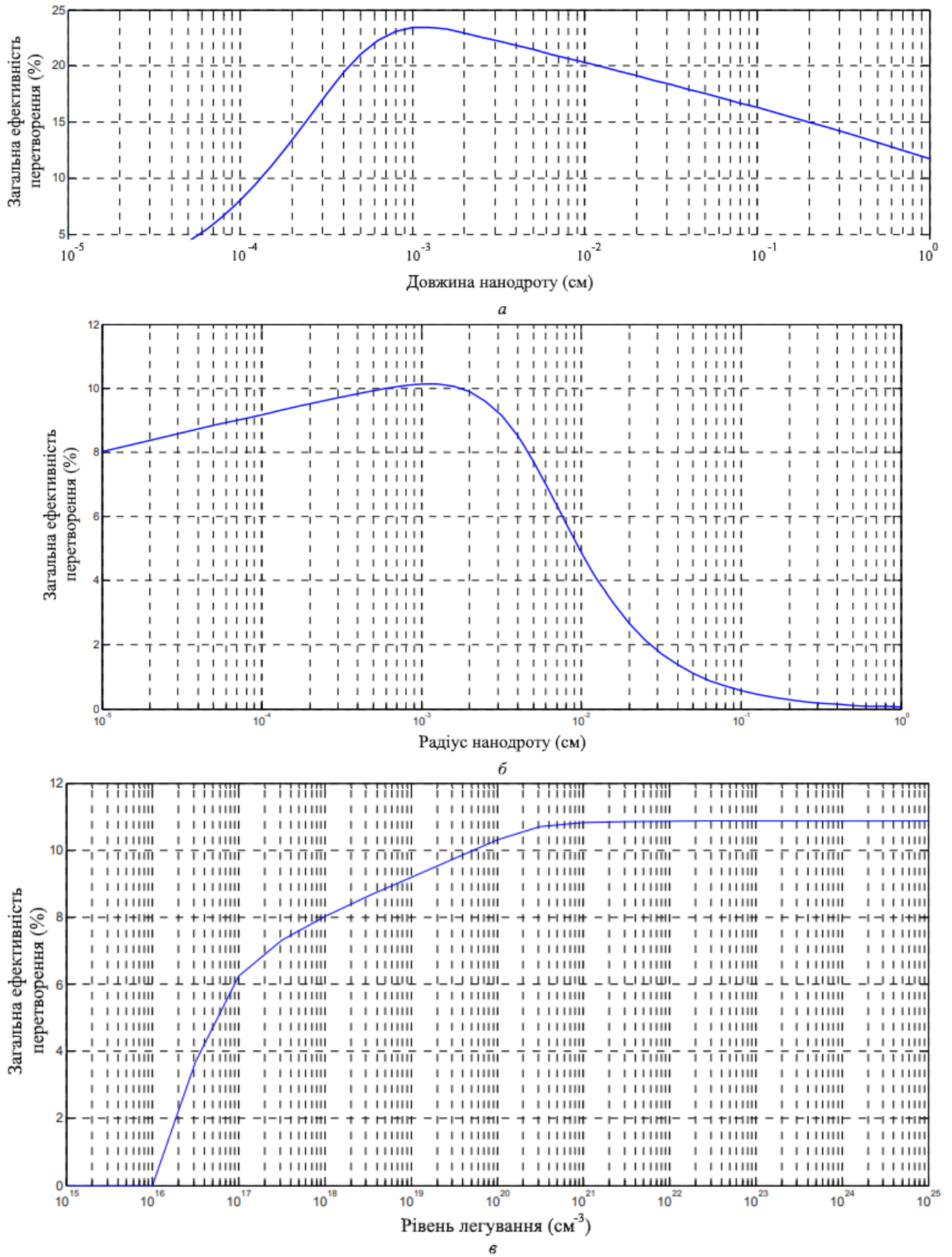


Рис. 3.3. Залежність загальної ефективності перетворення від параметрів нанодоту: *a* – довжини; *б* – радіусу; *в* – рівня легування. Адаптовано з [24]

Значення густини струму короткого замикання J_{SC} визначалося як відношення струму в нанодроті до площі її поперечного перерізу [32]. Для відображення сили струму на катоді використовується позначення $1 \text{ пА} = 1 \cdot 10^{-12} \text{ А}$, розмірність величини якої є характерним для нанодротяних сонячних елементів [32].

3.3. Результати моделювання

Сонячні елементи, як і інші напівпровідникові пристрої, дуже чутливі до зміни температури, при її підвищенні зменшується ширина забороненої зони напівпровідника, тим самим впливаючи на більшість параметрів [39]. Авторами [39] зазначено, що зі збільшенням температури збільшується дифузійна довжина Si, що призводить до зростання фотоструму, однак, через експоненціальну залежність струму насичення від температури, напруга холостого ходу (U_{OC}) буде зменшуватись. Крім того, коефіцієнт заповнення також зменшується через округлення вольт-амперної характеристики, тому загальна ефективність зменшується з підвищенням температури [39].

На рис. 3.4 наведені типові світлові вольт-амперні характеристики для коаксіальних $p-i-n$ структур фотоперетворювачів на основі нанодротів Si при температурах 280, 300, 340, 360, 380 та 400 К.

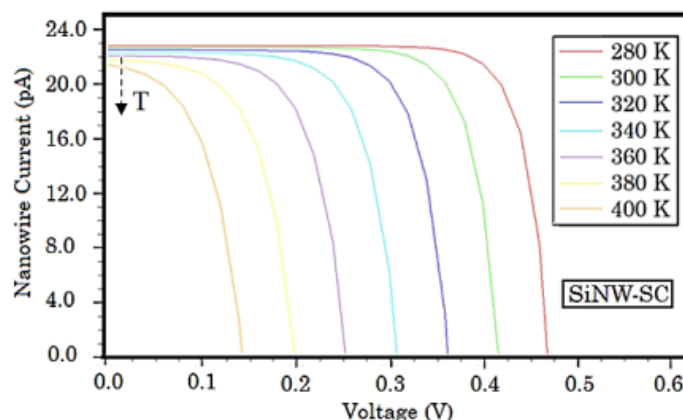


Рис. 3.4. Світлові вольт-амперні характеристики фотоперетворювача на основі нанодротів (SiNW-SC) як функція зміни температури [32]. Напрямок зростання температури вказано стрілкою

На основі цих даних та за допомогою симулятора ATLAS, авторами [32] було визначені основні електричні параметри сонячного елемента (табл. 3.1): напругу холостого ходу U_{oc} , густину струму короткого змикання J_{sc} , максимальний катодний струм I_m , максимальну анодну напругу U_m , максимальну потужність P_m , коефіцієнт заповнення FF та фотоелектричний ККД η .

Таблиця 3.1

Температурні залежності параметрів сонячного елемента на основі нанодроти Si [32]

Параметри	280 К	300 К	320 К	340 К	360 К	380 К	400 К
U_{oc} , В	0,47	0,42	0,36	0,31	0,25	0,20	0,14
J_{sc} , мА/см ²	20,11	20,02	19,93	19,67	19,49	19,23	18,96
U_m , В	0,40	0,34	0,30	0,24	0,20	0,14	0,08
I_m , пА	21,50	21,40	20,20	20,00	18,25	18,27	15,80
P_m , пВ	8,60	7,30	6,10	4,80	3,60	2,60	1,30
FF , %	80,38	77,09	74,07	70,30	65,08	58,67	51,21
η , %	7,59	6,44	5,35	4,27	3,21	2,26	1,39

Для порівняння, авторами [24] було досліджено вплив температури в діапазоні від 50 К до 350 К на електричні параметри фотоперетворювачів на основі Si (рис. 3.5).

Виходячи з температурних залежностей значень U_{oc} та J_{sc} , їх термічні коефіцієнти можна розрахувати наступним чином [32,40]:

$$\beta_{U_{oc}} = \frac{U_{oc}(T) - U_{oc}(300)}{U_{oc}(300)(T - 300)}, \quad (3.10)$$

$$\beta_{J_{sc}} = \frac{J_{sc}(T) - J_{sc}(300)}{J_{sc}(300)(T - 300)}. \quad (3.11)$$

Теплові коефіцієнти фотоелектричного ККД та коефіцієнта заповнення також можуть бути визначені за відповідними співвідношеннями [32,40]:

$$\beta_{\eta} = \frac{\eta(T) - \eta(300)}{\eta(300)(T - 300)}, \quad (3.12)$$

$$\beta_{FF} = \frac{FF(T) - FF(300)}{FF(300)(T - 300)}. \quad (3.13)$$

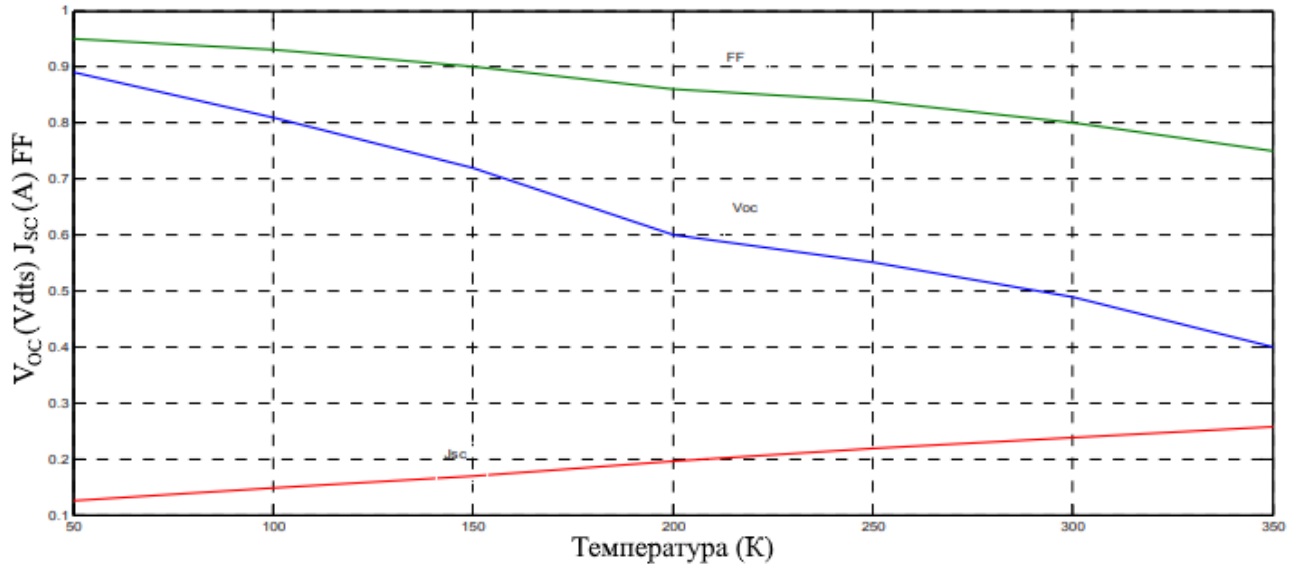


Рис. 3.5. Залежність електричних параметрів від температури для сонячних елементів на нанодротах Si [24]

Розрахувавши температурні коефіцієнти $\beta_{U_{oc}}$, $\beta_{J_{sc}}$, β_{FF} та β_{η} в діапазоні температур від 300 до 400 К, було отримано відповідні значення: $-6,67 \cdot 10^{-3}$, $-0,53 \cdot 10^{-3}$, $-3,36 \cdot 10^{-3}$ та $-7,84 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$. Отримані значення добре узгоджуються з експериментальними даними для сонячних елементів на основі Si [27,41]. В роботі [32] досліджено, що в діапазоні робочих температур від 280 до 340 К максимальні значення катодного струму, анодної напруги та потужності зменшуються відповідно на 7,50%, 66,67% та 79,17%, що також добре узгоджуються з даними [38,39].

На рис. 3.6. наведено типові світлові вольт-амперні характеристики для коаксіальних *p-i-n* структур нанодротяних сонячних елементів на основі InP при температурах 280, 300, 340, 360 і 400 К. Основні електричні параметри таких фотоелектричних перетворювачів наведено в табл. 3.2.

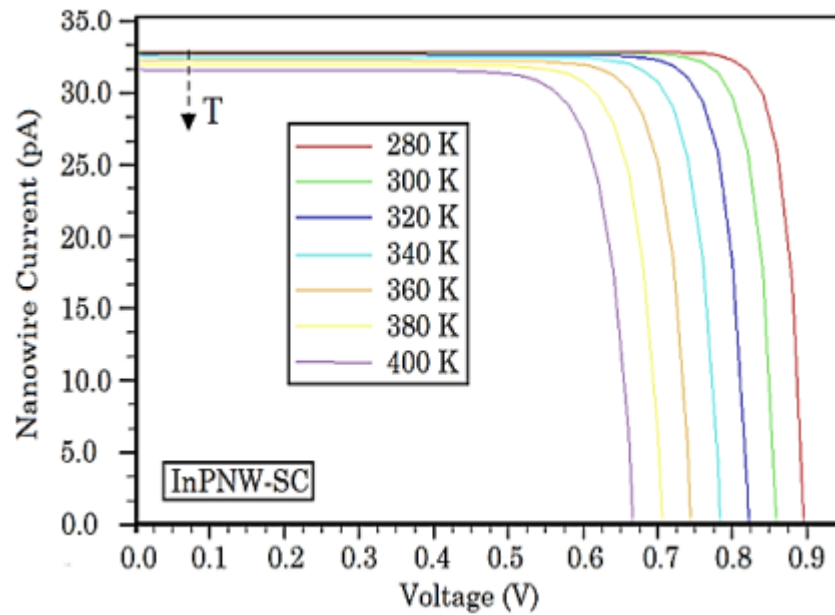


Рис. 3.6. Світлові вольт-амперні характеристики нанодротяного сонячного елемента на основі InP як функція зміни температури [32]. Напрямок зростання температури вказано стрілкою

Таблиця 3.2

Температурні залежності параметрів сонячного елемента на основі нанодроту InP [32]

Параметри	280 К	300 К	320 К	340 К	360 К	380 К	400 К
U_{OC} , В	0,90	0,86	0,82	0,78	0,74	0,71	0,67
J_{SC} , mA/cm^2	29,02	28,93	28,84	28,67	28,49	28,22	27,87
U_m , В	0,82	0,78	0,74	0,70	0,66	0,62	0,56
I_m , пА	31,70	31,40	31,10	30,80	30,30	29,80	30,35
P_m , пВ	26,00	24,50	23,00	21,50	20,00	18,50	17,00
FF , %	88,11	86,90	85,75	84,55	83,24	81,82	80,32
η , %	22,88	21,61	20,31	18,99	17,65	16,30	14,94

Розрахувавши температурні коефіцієнти $\beta_{U_{oc}}$, $\beta_{J_{sc}}$, β_{FF} та β_{η} відповідно до рівнянь (3.10)-(3.13) в діапазоні температур від 300 до 400 К, було отримано

наступні значення: $-2,21 \cdot 10^{-3}$, $-0,37 \cdot 10^{-3}$, $-0,76 \cdot 10^{-3}$ та $-3,09 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$. Отримані дані добре узгоджуються з експериментальними результатами для фотоелектричних перетворювачів на основі InP [38]. Авторами [32] зазначено, що максимальні значення катодного струму, анодної напруги та потужності в діапазоні робочих температур від 300 до 340 К зменшуються відповідно на 2,92%, 17,14% та 20,93%, що добре узгоджується з даними [38]. Коаксіальні сонячні елементи з нанодротів InP при кімнатній температурі демонструють вищі значення напруги холостого ходу, густини струму короткого замикання, коефіцієнта заповнення та ККД на 104,76%, 44,51%, 12,73% та 235,56% відповідно, порівняно з аналогічними сонячними елементами на основі Si-структури. Різниця в електричних параметрах має тенденцію до збільшення з підвищенням температури в діапазоні від 400 К [32]. Отримані дані свідчать про вищу термічну стабільність сонячних елементів на основі InP, а також те, що напівпровідники з прямою забороненою зоною більш термостабільні, ніж напівпровідники з непрямою забороненою зоною, оскільки поглинання фотонів в останніх визначається коливаннями кристалічної решітки, які залежать від температури [32].

Перспективним напрямком розвитку сонячної енергетики є перовськітні сонячні елементи (Perovskite Solar Cell, PSC) – фотоперетворювачі, які містять сполуку зі структурою перовськіту, як правило, гібридний органічний/неорганічний матеріал на основі свинцю або галогеніду олова як активний шар, що збирає світло [42]. Перовськітні матеріали, такі як галогеніди свинцю метиламонію та повністю неорганічний галогенід свинцю цезію, дешеві та прості у виробництві [42]. Перовськітні сонячні елементи досягли значного прогресу за останні роки завдяки швидкому зростанню ефективності – з 3,8% у 2009 році до 25,7% у 2021 році в одноперехідних архітектурах, а в кремнієвих тандемних елементах до 29,8% [42,43]. Основні проблеми та об'єкти дослідження включають їх коротко- та довгострокову стабільність: перовськіти можуть розкладатися, коли вони реагують з вологою та киснем або коли вони

проводять тривалий час під впливом світла, тепла або прикладеної напруги [42,43].

Авторами [44] було досліджено перовськіт йодиду свинцю $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, який був отриманий у вигляді нанодроту. Структура одномірного нанодроту із середнім діаметром 100 нм показала більш швидке розділення носіїв за наявності діркового транспортного шару і вищу бічну провідність, ніж тривимірний нанокубоїдний кристал [44]. На рис. 3.7 зображено вольт-амперну характеристику нанодротяного перовськітного сонячного елемента в залежності від напрямку сканування при стандарту AM 1.5G solar illumination [44].

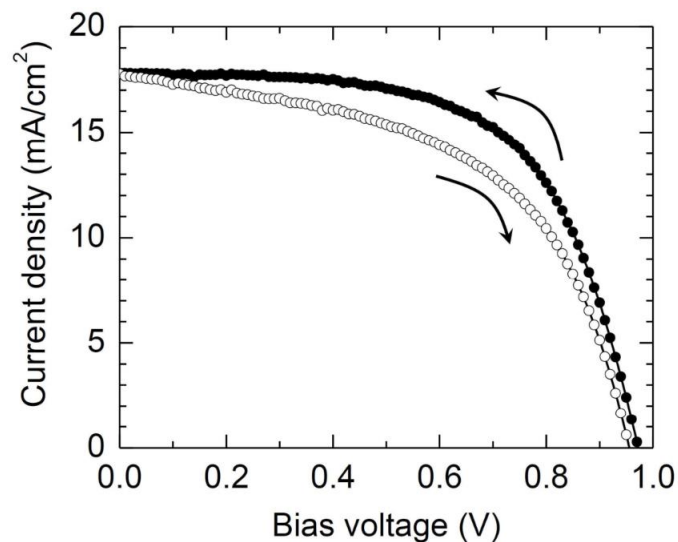


Рис. 3.7. Вольт-амперна характеристика нанодротяного перовськітного сонячного елемента в залежності від напрямку сканування [44]. Зафарбовані та незафарбовані кола представляють зворотнє сканування та пряме сканування відповідно

Порівнявши електричні параметри коаксіальних *p-i-n* структур на основі нанодротів Si та InP при температурі 300 К з найефективнішим пристроєм на основі нанодроту $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, дослідженого авторами [44], було встановлено, що перовськітна структура має більшу напругу холостого ходу, яка становить 1,052 В, але має менші показники густини струму короткого замикання (19,12 mA/cm^2), коефіцієнт заповнення (72,1%) та ККД (14,71%), що робить сонячні елементи на основі нанодротів Si та InP більш ефективними.

ВИСНОВКИ

1. При виконанні роботи було розглянуто основні фізичні принципи фотоелектричного та фотогальванічного ефектів, дію випромінювання на *p-n* перехід та залежність ефективності фотоелементів від температури та матеріалу. Було розглянуто та порівняно види та конструкції фотоелектричних комірок, так, згідно авторів [19], монокристалічні елементи мають ефективність $\sim 20\%$, полікристалічні $\sim 15\%$, тонкоплівкові з аморфного кремнію $\sim 7-10\%$, концентровані $\sim 41\%$. Згідно авторів [23], ефективність нанодротяних сонячних елементів на основі InP досягає $13,5\%$, для елементів на основі GaAs – $15,3\%$, для нанодротів InP з гравіюванням вниз – $17,8\%$.

2. Технологічні системи автоматизованого проектування (TCAD), серед яких найбільш поширеним в сучасній схемотехніці є Silvaco TCAD, дають можливість проводити моделювання електронних структур в мікро- та наномасштабах, результати яких добре узгоджуються з експериментальними даними, отриманими при дослідженні реальних створених пристроїв. За допомогою інструментів Silvaco TCAD були розроблені та досліджені коаксіальні *p-i-n* структури фотоперетворювачів на основі нанодротів Si та InP, наведено приклад програмного коду для розрахунку нанодротяних фотоперетворювачів при температурі 300 К.

3. Досліджено вплив температур в інтервалі від 280 К до 400 К на вольт-амперні характеристики коаксіальних *p-i-n* структур сонячних елементів на основі нанодротів Si та InP, спроектовані в рамках дрейф-дифузійної транспортної моделі із статистикою Фермі-Дірака, які демонструють допустимі величини електричних параметрів. Розраховано вирази для температурних коефіцієнтів $\beta_{U_{co}}$, $\beta_{J_{sc}}$, β_{FF} та β_{η} , які в інтервалі температур від 300 К до 400 К становили відповідно $-6,67 \cdot 10^{-3}$, $-0,53 \cdot 10^{-3}$, $-3,36 \cdot 10^{-3}$ та $-7,84 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ для структур на основі Si; $-2,21 \cdot 10^{-3}$, $-0,37 \cdot 10^{-3}$, $-0,76 \cdot 10^{-3}$ та $-3,09 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ для структур на основі InP, які добре узгоджуються з експериментальними даними. Отримані результати можуть бути використані для подальших досліджень.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Nanowires for high-efficiency, low-cost solar photovoltaics/ Y. Zhang, H. Liu// Crystals.- 2019.- V. 9, 87.- P. 1-25.
2. Integration of silicon nanowires in solar cell structure for efficiency enhancement: A review/ M. K. Sahoo, P. Kale// J. Materiomics.- 2019.- V. 5, 1.- P. 34-48.
3. Coaxial silicon nanowires as solar cells and nanoelectronic power sources/ B. Tian, X. Zheng, T. J. Kempa et al.// Nature.- 2007.- V. 449.- P. 885-889.
4. <https://ru.wikipedia.org/wiki/Фотоэффект> – Фотоэффект, дата допуску: 03.11.2022 р.
5. <https://www.edwardmdfisher.com/single-post/2016/07/04/the-photoelectric-effect-in-silicon-image-sensors-a-defense-part-5-academic-imaging> – The Photoelectric Effect in Silicon Image Sensors: A Defense [Part: 5 Academic Imaging], дата допуску: 08.11.2022 р.
6. Братусь Т. І. Загальна фізика. Навчальний посібник до вивчення дисципліни. Частина 5. Розділ «Квантова природа випромінювання»/ Братусь Т. І., Нікітіна О. В.- НТУУ «КПІ», 2008.- 47 с.
7. <https://studfile.net/preview/3740771/page:10/> – Фотогальванічний ефект у р-п-переході, дата доступу: 08.11.2022 р.
8. Photogalvanic Effect in Nitrogen-Doped Monolayer MoS₂ from First Principles/ Wen-Ming Luo, Zhi-Gang Shao, Mou Yang// Nanoscale Research Letters.- 2019.- V. 14, 380.- P. 1-8.
9. Temperature dependence of photogalvanic effect in GaAs/AlGaAs two-dimensional electron gas at interband and intersubband excitation/ X. L. Zeng, J. L. Yu, S. Y. Cheng et al.// Journal of Applied Physics.- 2017.- V. 121.- P. 1-8.
10. Topological Insulators as Ultrafast Auston Switches in On-Chip Thz-Circuits/ C. Kastl, C. Karnetzky, A. Brenneis et al.// IEEE Journal of selected topics in quantum electronics.- 2017.- V. 23, No 4.- P. 1-5.

11. Photogalvanic probing of helical edge channels in two-dimensional HgTe topological insulators/ K.-M. Dantscher, D. A. Kozlov, M. T. Scherr et al.// Phys. Rev. B.- 2017.- V. 95, 20.- P. 1-5.
12. Ultrafast energy- and momentum-resolved surface Dirac photocurrents in the topological insulator Sb₂Te₃/ Kenta Kuroda, J. Reimann, K. A. Kokh et al.// Phys. Rev. B.- 2017.- V. 95, 8.- P. 1-5.
13. Quantized circular photogalvanic effect in Weyl semimetals/ Fernando de Juan, A. G. Grushin, T. Morimoto et al.// Nature Communications.- 2017.- V. 8.- P. 1-7.
14. Колонтаєвський Ю. П. Фотоенергетика. Навчальний посібник/ Колонтаєвський Ю. П., Тугай Д. В., Котелевець С. В.- Харків: ХНУМГ ім. О. М. Бекетова, 2019.- 157 с.
15. Behavior of Photovoltaic System during Solar Eclipse in Prague/ M. Libra, P. Kouřím, V. Poulek// International Journal of Photoenergy.- 2016.- V. 10.- P. 1-6.
16. https://uk.wikipedia.org/wiki/Фотоелектрична_комірка – Фотоелектрична комірка, дата доступу: 22.11.2022 р.
17. <https://illustrationprize.com/uk/233-photovoltaic-or-solar-cell.html> – Фотоелектричні або сонячні батареї, дата доступу: 22.11.2022 р.
18. https://energyeducation.ca/encyclopedia/Types_of_photovoltaic_cells – Types of photovoltaic cells, дата доступу: 25.11.2022 р.
19. <https://www.greenmatch.co.uk/blog/2015/09/types-of-solar-panels> – Types of Solar Panels, дата доступу: 26.11.2022 р.
20. <https://electricalacademia.com/renewable-energy/photovoltaic-pv-cell-types-monocrystalline-polycrystalline-thin-film-solar-panel/> – Photovoltaic (PV) Cell Types | Monocrystalline, Polycrystalline, Thin Film Solar Panel, дата доступу: 29.11.2022 р.
21. <https://www.solarreviews.com/blog/pros-and-cons-of-monocrystalline-vs-polycrystalline-solar-panels> – Types of solar panels: which one is the best choice, дата доступу: 29.11.2022 р.

22. Coaxial multishell nanowires with high-quality electronic interfaces and tunable optical cavities for ultrathin photovoltaics/ T.J. Kempa, J. F. Cahoon, S.-K. Kim et al.// PNAS.- 2012.- V. 109, No 5.- P. 1407-1412.
23. Towards nanowire tandem junction solar cells on silicon/ M. Borgstrom, M. H. Magnusson, F. Dimroth et al.// IEEE Journal of Photovoltaics.- 2018.- V. 8 (3).- P. 733-740.
24. Numerical modeling and simulation for a radial p-i-n nanowire photovoltaic device/ S. Abdellatif, K. Kirah// Energy Procedia.- 2013.- V. 36.- P. 488-491.
25. Modeling and simulation of nanorods photovoltaic solar cells: A review/ N. M. Ali, N. H. Rafat// Renewable and Sustainable Energy Reviews.- 2017.- V. 68.- P. 212-220.
26. The use of TCAD in technology simulation for increasing the efficiency of semiconductor manufacturing/ Lysenko I., Zykov D., Ishutkin S. et al.// AIP Conference Proceedings.- 2016.- V. 1772 (1): 060012.- P. 1-7.
27. Silvaco, ATLAS User's manual device simulation software, Santa Clara CA: Silvaco International, 2018 – 1776 p.
28. Silvaco, DeckBuild User's Manual Device Simulation Software, Santa Clara CA: Silvaco International, 2018. – 241 p.
29. Silvaco, ATHENA User's Manual Device Simulation Software, Santa Clara CA: Silvaco International, 2018 – 444 p.
30. Приладова-технологічне моделювання Silvaco TCAD при викладанні навчальних дисциплін інженерно-технічного циклу/ І. П. Бурик, А. О. Головня, М. М. Іващенко// Матеріали X Науково-методичної конференції, м. Суми, 14-15 травня 2020 р.- Суми: СумДУ, 2020.- С. 39-41.
31. Research possibilities of Silvaco TCAD for physical simulation of gallium nitride power transistor/ Demchenko O., Zykov D., Kurbanova N.// AIP Conference Proceedings.- 2016.- V. 1772 (1): 060007.- P. 1-6.

32. Simulation of parameters of coaxial solar cells based on Si and InP nanowires/ I. P. Buryk, L. V. Odnodvoretz, Ya. V. Khyzhnya// J. Nano- Electron. Phys.- 2021.- V. 13, No 1, 01012.- P. 1-5.

33. Using Numerical Simulations to Study and Design Semiconductors Devices in Micro and Nanoelectronics/ S. P. Gimenez, M. Bellodi// Numerical Simulation: From Theory to Industry. – IntechOpen, 2012.- P. 275-288.

34. <https://silvaco.com/examples/tcad/section34/example14/index.html> – 3D Coaxial Solar cell, дата доступу: 15.02.2023 р.

35. Simulating Solar Cell Devices Using Silvaco TCAD Tools/ Silvaco// Simulation Standard.- Santa Clara CA: Silvaco International, 2008.- V. 18, No 2.- P. 1-12

36. https://www.iue.tuwien.ac.at/phd/ellinghaus/html_diss_cse2.html – Overview of carrier transport models, дата доступу: 08.03.2023 р.

37. DFT based estimation of CNT parameters and simulation-study of GAA CNTFET for nano scale applications/ Bhoop Singh, Prasad B, Dinesh Kumar// Materials Research Express.- 2020.- V. 7, No 1.- P. 1-8.

38. Physics of the temperature coefficients of solar cells/ O. Dupré, R. Vaillonet, M. A. Green// Sol. Energy Mater. Sol. Cells.- 2015.- V. 140.- P. 92.

39. Influence of Si nanowires on solar cell properties: effect of the temperature/ O. V. Pylypova, A. A. Evtukh, P. V. Parfenyuk et al.// Appl. Phys. A.- 2018.- V. 124.- P. 773.

40. Structure and electrophysical properties of double-component film alloys based on molybdenum and iron or nickel/ I. P. Buryk, T. M. Hrychanovs'ka, D. V. Poduremne et al.// J. Nano- Electron. Phys.- 2018.- V. 10, No 5, 05026.- P. 1-4.

41. Operating temperature effect on the thin film solar cell efficiency/ R. V. Zaitsev, M. V. Kirichenko, G. S. Khrypunov et al.// J. Nano- Electron. Phys.- 2019.- V. 11, No 4, 04029.- P. 1-6.

42. https://en.wikipedia.org/wiki/Perovskite_solar_cell – Perovskite solar cell, дата доступу: 20.05.2023 р.

43. <https://www.energy.gov/eere/solar/perovskite-solar-cells> – Perovskite Solar Cells, дата доступу: 20.05.2023 р.
44. Nanowire Perovskite Solar Cell/ Jeong-Hyeok Im, Jingshan Luo, Marius Franckevičius et al.// Nano Letters.- 2015.- V. 13, No 3.- P. 2120-2126.

СЛАЙДИ ПРЕЗЕНТАЦІЇ ДО РОБОТИ