

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 ПРІЗВИЩЕ)

_____ 2024 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: Комп'ютерне моделювання та оптимізація одновимірних фотоелектричних перетворювачів

Здобувача групи ЕІз-01б Приймака Сергія Анатолійовича
(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)

Сергій ПРИЙМАК

(Ім'я та ПРІЗВИЩЕ здобувача)

Керівник викладач, к.ф.-м.н., доцент, Іван БУРИК

(посада, науковий ступінь, вчене звання, ім'я та ПРІЗВИЩЕ)

(підпис)

Консультант _____

(посада, науковий ступінь, вчене звання, ім'я та ПРІЗВИЩЕ)

(підпис)

Конотоп – 2024

АНОТАЦІЯ

Фотоелектричні перетворювачі на основі p-i-n гетеропереходів, зокрема GaAs/AlGaAs, привертають значну увагу завдяки їх високій ефективності та стабільності. Однак, для досягнення максимальної продуктивності необхідно здійснити точне чисельне моделювання та оптимізацію.

Метою роботи є чисельне моделювання одновимірних фотоелектричних перетворювачів на основі GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходу та визначення оптимальних параметрів для підвищення ефективності перетворення сонячної енергії.

У результаті проведених досліджень було здійснено ряд симуляцій структур фотоелектричних перетворювачів сонячної енергії, набуто навичок роботи з транспортними моделями.

Робота складається зі вступу, трьох розділів основної частини та висновків. У першому розділі наведено огляд фізичних основ принципу дії, особливостей будови нанодротового масиву та одиничних фотогальванічних нанодротів на основі GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходу та плазмонних сонячних батарей. У другому розділі описано розробку та опис програми для моделювання фотоелектричного перетворювача сонячної енергії на основі нанодротів. У третьому розділі аргументовано вибір транспортних моделей для p-i-n наноструктур, проаналізовано та порівняно результати симуляції структур та електричних параметрів з реальними характеристиками.

Робота викладена на 35 сторінках, у тому числі включає 13 рисунків, 2 таблиці, список цитованої літератури із 30 джерел.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: нанодротовий фотоелектричний перетворювач, p-i-n-гетероперехід, електричні параметри, комп'ютерна симуляція

ЗМІСТ

	Стор.
ВСТУП	4
РОЗДІЛ 1. ОГЛЯД ХАРАКТЕРИСТИК ОДНОВИМІРНИХ ФОТОЕЛЕКТРИЧНИХ ПЕРЕТВОРЮВАЧІВ	5
1.1. Будова та принцип дії сонячних елементів	5
1.2. Огляд технології GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходів	8
1.3. Сонячні елементи з локалізованими поверхневими плазмонами.....	10
РОЗДІЛ 2. МЕТОДИКА І ТЕХНІКА ЕКСПЕРИМЕНТУ	15
2.1. Методика чисельного моделювання	15
2.2. Моделювання одиничного елемента на основі GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходу	20
РОЗДІЛ 3. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ	22
3.1. Структура сонячного елемента на основі GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходу	22
3.2. Концентраційні залежності електричних параметрів	24
3.3. Оптимізація характеристик за рахунок поверхневих плазмонів.....	26
ВИСНОВКИ	31
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	32
ДОДАТОК А. СЛАЙДИ ПРЕЗЕНТАЦІЇ РОБОТИ	35

ВСТУП

Останніми роками фотоелектричні перетворювачі (ФЕП) на основі напівпровідникових нанодротів стали темою інтенсивних досліджень та розробок для фотогальванічних пристроїв наступного покоління.

Серед найбільш широко використовуваних підкладок в даний час розглядається GaAs, оскільки існують матеріали з відповідними решітками з більшими ширинами забороненої зони, які підходять для формування набору переходів з узгодженим струмом. Ці підкладки складають значну частину загальної вартості матеріалів і перешкоджають широкомасштабному використанню. Невеликий розмір нанодротів дозволяє їм пристосовувати напругу, викликану невідповідністю решіток. Ця здатність надає велику свободу у виборі підкладок для росту, які в іншому випадку є нездійсненними у випадку планарних тонких плівок. Бездислокаційні нанодроти GaAs/AlGaAs можуть бути вирощені на кремнієвих підкладках, значно знижуючи вартість підкладок та дозволяючи використовувати існуючу інфраструктуру кремнієвої промисловості [1-10]. Тим часом, свобода використання кількох, укладених, невідповідних за решіткою матеріалів у кожному нанодроті дозволяє створювати багатоперехідні елементи з оптимальними комбінаціями заборонених зон. Крім того, як симуляції, так і експерименти показали, що нанодроти за своєю природою є чудовими поглиначами світла завдяки розсіюванню світла та ефекту резонансу.

Об'єктом дослідження даної роботи є фізичні основи принципу дії, структурні та робочі характеристики одновимірних фотоелектричних перетворювачів сонячної енергії на основі GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходу.

РОЗДІЛ 1 ОГЛЯД ХАРАКТЕРИСТИК ОДНОВИМІРНИХ ФОТОЕЛЕКТРИЧНИХ ПЕРЕТВОРЮВАЧІВ

1.1. Будова та принцип дії сонячних елементів

Масиви нанодротів (NWA - arrays of nanowires) з напівпровідників є об'єктом значних досліджень та розробок для сонячних елементів наступного покоління через їхню доступність та вищу ефективність перетворення енергії порівняно з традиційними тонкоплівковими пристроями. Відмінні оптичні та електричні властивості цих напівпровідникових NWA, такі як високий коефіцієнт поглинання, краща бічна провідність порівняно з тривимірними структурами та швидке розділення носіїв заряду, сприяють їхній підвищеній ефективності перетворення [1-8]. Завдяки їхнім винятковим оптичним та електричним властивостям, таким як прямий заборонений діапазон та висока рухливість носіїв заряду, пристрої з нанодротів (NW's-nanowires) на основі напівпровідників III-V викликають значний інтерес як перспективні багатофункціональні будівельні блоки для майбутніх ультракомпактних електронних та фотонних інтегральних схем. Серед сонячних елементів (CS - solar cells) на основі напівпровідників III-V найбільш досліджені сонячні елементи з нанодротів арсеніду галію (GaAs) через їхні численні переваги, такі як покращене поглинання світла, зменшене споживання матеріалу, менший перетин, антиблікові властивості та висока ефективність перетворення енергії. Незважаючи на всі проведені роботи протягом років, максимальна досягнута ефективність для сонячних елементів на основі масивів нанодротів значно нижча, ніж найкраща зафіксована для традиційних планарних сонячних елементів.

Як приклад на рис.1.1 наведено типові p-i-n структури ФЕП: 2D - плівкова (рис.1.1а) та 1D - нанодротова (рис.1.1б). Нанодріт поглинає світло вздовж усієї бічної поверхні. Тому генеровані носії можуть бути ефективно розділені в радіальному напрямку. Радіальна відстань для носіїв (в діапазоні

сотень нм) зазвичай набагато менша або порівнянна з довжиною дифузії електронів і дірок. Ортогональне розділення напрямів поглинання світла і руху носіїв призводить до низької масової рекомбінації, та, відповідно, до високої ефективності. 1D структурах мають велике відношення поверхні до об'єму. Це як відомо забезпечує велику площу покриття (до 10^3 разів вищу, ніж у 2D структурах) та підвищує ефективність поділу заряду [2].

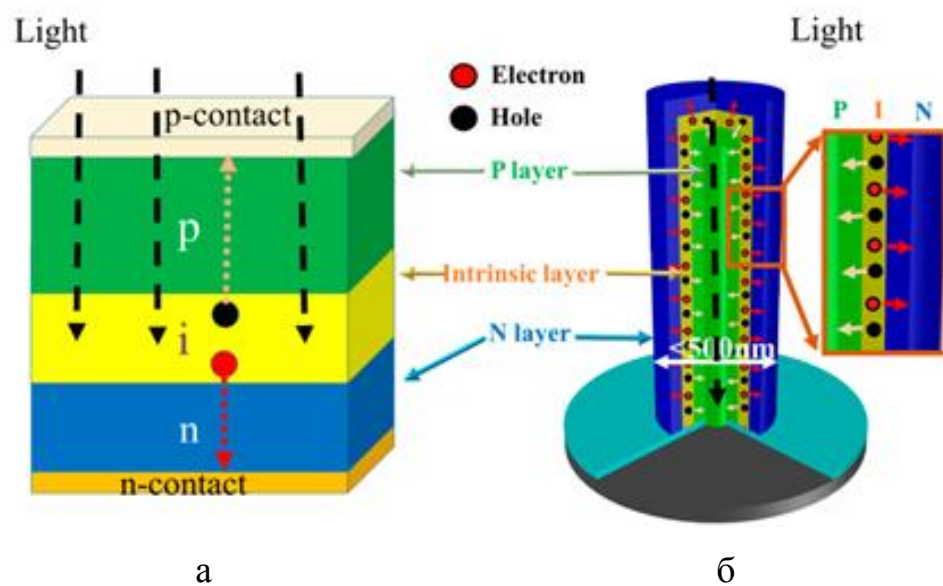


Рис.1.1. Схема поширення фотона та носіїв у 2D - плівкових (а) та 1D - нанодротових (б) ФЕП [2]

Слід відмітити, що проблемою із застосуванням розглянутих вище р-і-п гетероперехідних ФЕП є те, що їх можна оптимізувати лише в одному вимірі. Значно більше можливостей у цьому плані надає ФЕП з поперечним переходом, т.зв. аксіальна р-і-п структура. На діелектричній підкладці, що перпендикулярна до поверхні, утворюється структура р-і-п. Такий елемент не потребує прозорого провідного оксиду як контакту та широкозонного р-шару для створення прозорого віконного шару, його можна виготовити за допомогою стандартних технологій мікроелектроніки.

Більшість сучасних сонячних елементів мають лише один р-п перехід. У таких елементах створення вільних носіїв заряду здійснюється лише за

допомогою фотонів з енергією, яка дорівнює або перевищує ширину забороненої зони. Іншими словами, фотоелектрична відповідь одноперехідного елемента обмежена лише певною частиною сонячного спектра, енергія якого перевищує ширину забороненої зони, тоді як фотони з меншою енергією не використовуються.

На рис. 1.2 приведено схематичне зображення змодельованого елемента радіального та аксіального переходу сонячного елемента у модулі пристрою. Оксид індію та олова (ІТО) та Al використовувалися як електроди, кожен з товщиною 200 нм. Тривимірні оптичні швидкості генерації, отримані з оптичного розв'язувача, включаються у скінченноелементну сітку нанодротів у модулі розв'язувача зарядів. Це дозволяє нам обчислювати швидкість транспортування та рекомбінації носіїв заряду в пристрої, розв'язуючи рівняння неперервності носіїв у поєднанні з рівнянням Пуассона.

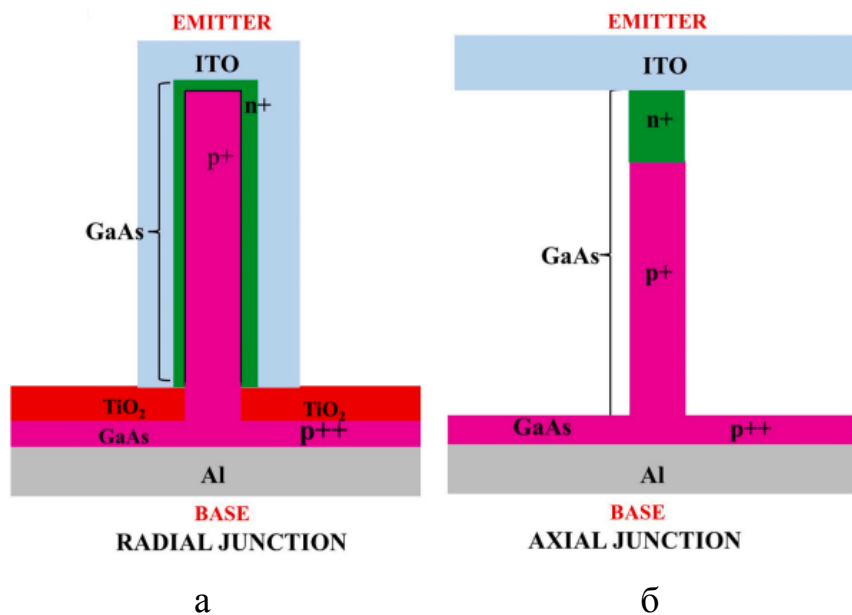


Рис. 1.2. Схематичне зображення одиначного ФЕП з радіальним (а) та аксіальним (б) p-i-n гетеропереходом [3]

Багатошарові структури з двома або більше сонячними елементами з різними ширинами забороненої зони дозволяють подолати це обмеження. Такі елементи відомі як багатоперехідні, каскадні або тандемні. Оскільки

вони працюють з більшою частиною сонячного спектра, ефект фотогальванічного перетворення у них вищий.

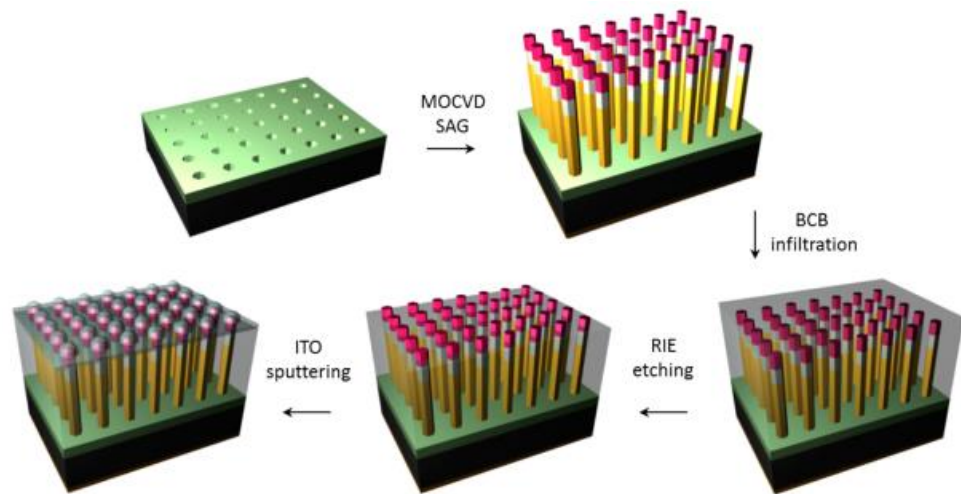
1.2.Огляд технології GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходів

Відомо, що високу ефективністю вирізняються нанодіодні ФЕП з p-i-n гетеропереходом. Під час виготовлення p-i-n структури першим формується р-шар. Для його створення потрібна певна кількість домішки ($<10^{18} \text{ см}^{-3}$). Під час формування суттєвого забруднення нелегованого шару не відбувається. Поряд з цим, якщо першим брати n-шар, то наявність залишкової домішки змінить властивості i-шару.

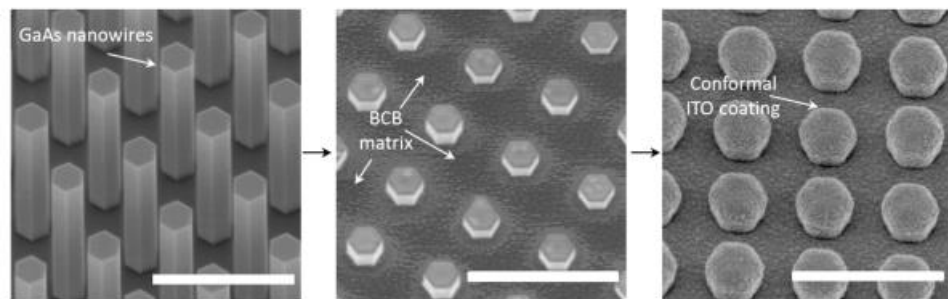
Формування р-шару на поверхні прозорого провідного електрода забезпечує електричний контакт. Однак товщина р-шару повинна бути мала (10 нм), щоб основна частина світла поглиналася в i-області.

Після зростання NWA планаризуються та травляться таким чином, щоб залишити відкритим тільки кінчик р-типового емітера. Зрештою, на NWA наноситься ІТО як прозорий передній контакт. Омичний контакт тоді як AuGe легується на задню сторону підкладки, щоб утворити. На рис.1.3 наведено етапи виготовлення сонячних елементів з масивом нанодіодів GaAs з аксіальним переходом та їх зображення, отримані методом растрової електронної мікроскопії (РЕМ).

На першому етапі технологічного процесу (рис.1.3.а) проводиться літографія за допомогою електронних променів для утворення отворів у масці з нітриду кремнію. Потім вибіркоче зростання масиву (SAG) з p-i-n GaAs нанодіодів за допомогою хімічне осадження металоорганічних компонент (MOCVD). Далі інфільтрація (залівка) полімером бензолциклобутеном (BCB), реактивне іонне травлення (RIE) для виходу на поверхню кінчиків нанодіодів, та осадження ІТО.



а



б

в

г

Рис.1.3. Процес виготовлення GaAs-нанодротових сонячних елементів з аксіальною структурою (а) та їх зображення (б), отримані в растровому електронному мікроскопі [4]

На рис.1.3б приведено РЕМ-зображення під кутом 30° вертикального масиву нанодротів GaAs на підкладці GaAs (111). Рівномірно розподілені нанодроти в електронно-літографічному шаблоні (EBL) визначеному і мають 6-кратно симетричний поперечний переріз, складений з боковин, паралельних площинам родини (110), що свідчить про високу якість кристалу. На рис.1.3в приведено РЕМ зображення після того, як нанодроти вбудовано в BCB та витравлено RIE для виходу на поверхню коротких кінчиків. На рис.1.3г приведено РЕМ-зображення після нанесення плівки ІТО методом розпилення. На кінчиках нанодротів формується конформний куполоподібний ковпачок.

Поверхневий опір планарної плівки ІТО, виміряний чотирьохзондовим методом, становить приблизно $10 \text{ Ом}/\square$. Високопровідна плівка ІТО дозволяє досягнути низького послідовного опору без формування додаткових металевих пальців поверх ІТО. Розпилення забезпечує конформальний шар ІТО на непланарній верхній поверхні і утворює оболонку форми купола над кінчиком нанодрота, що допомагає зосередити падаюче світло біля області переходу (рис.1.3г). На рис. 3в показане 30° нахиле РЕМ-зображення масиву нанодротів після інфільтрації ВСВ та реактивного іонного травлення (RIE). Для контактування відкрито близько 100 нм кінчика. На рис.3г показано, що плівка ІТО конформно огинає кінчики нанодротів, щоб забезпечити хорошу провідність на передньому електроді [4]. Фактично висока однорідність успадковується від рисунку, створеного методом EBL, за допомогою наступного процесу та демонструє високу здатність SAG у контролірованні морфології та розташування нанодротів.

1.4. Сонячні елементи з локалізованими поверхневими плазмонами

Плазмонні сонячні батареї використовують наноструктури з металів (найчастіше золото або срібло), які мають здатність утворювати локалізовані поверхневі плаزمони. Поверхневі плаزمони – це колективні коливання електронів на межі металу та діелектрика, які виникають при взаємодії світла з металевими наночастинками. Ці коливання здатні значно підсилювати електромагнітне поле на поверхні наночастинок, що сприяє кращому поглинанню світла активним матеріалом сонячної батареї.

Було проведено значну кількість досліджень NWA, але дослідження, що зосереджені на комбінаціях матеріалів із використанням плазмонних напівпровідникових NW's як активних систем, отримали обмежену увагу, особливо в контексті нанодротів на основі структур III-V. Серед численних стратегій уловлювання світла, підвищення оптичного поглинання на основі резонансу поверхневих плазмонів (SPR) з використанням металевих

наночастинок (NP - nanoparticles) виявилось перспективним методом як у тонкоплівкових, так і в сонячних елементах з нанодротів [3–8]. Причина цього покращення полягає в тому, що зміна розмірів, складу та оточуючого діелектричного середовища металевих наночастинок підсилює електромагнітне поле (ЕМ поле) та поглинання фотонів на відповідній довжині хвилі [5]. Як результат, ми використовували метод уловлювання світла з підсиленням плазмонів для оцінки ЕМ полів, які дозволяють значне спрямування світла в нанодроти.

Алюміній (Al) є одним із нових перспективних плазмонних матеріалів, що привернув значну увагу з низки причин, зокрема через його вищу частоту об'ємних плазмонів ($\omega_p \approx 15$ eV) порівняно з Au та Ag ($\omega_p \approx 8-9$ eV), що відображає широкий діапазон частот, у межах якого дозволені поверхневі плаزمони алюмінію, і також дозволяє зміщувати плазмонні резонанси від видимої області до ультрафіолетової області [3-8].

На рис. 1.4 наведено заборонені зони та зміщення зон матеріалів, що використовуються у запропонованій структурі.

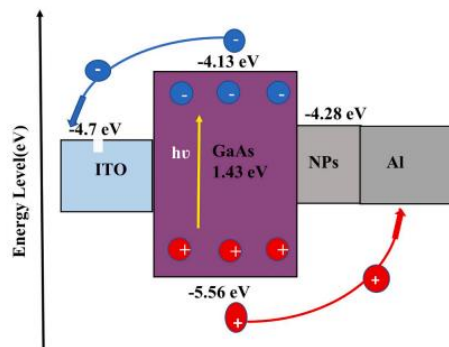


Рис. 1.4. Заборонені зони та зміщення зон матеріалів, що використовуються у структурі одиничної комірки NWSC [3]

При розгляді плазмонних систем необхідно налаштовувати баланс між поглинанням і розсіюванням для досягнення підвищення поглинання в сонячних елементах. Коли порівнювали ефективність поглинання і

розсіювання наночастинок з Au, Ag і Al, було виявлено, що тільки Al NP відповідають умовам для максимального розсіювання при найнижчому поглинанні у великій частині видимого спектру, що робить його бажаним кандидатом для застосувань у сонячній енергетиці. Крім того, Al є відносно стабільним, економічним і зручним для обробки матеріалом, що також розширює можливості для виготовлення та масового виробництва. Зокрема, багато груп досліджують плазмонну відповідь наноструктур Al. Проте Al є найменш вивченим плазмонним NP серед небагатьох досліджень, проведених у галузі плазмонних сонячних елементів на основі III-V. Робота [3] зосереджена на використанні плазмонних наночастинок Al для підвищення ефективності поглинання та коефіцієнта перетворення енергії сонячних елементів на основі масивів нанодротів GaAs.

На рис. 1.5. приведено структуру плазмонного сонячного елемента на основі нанодроту GaAs. Кожна комірка містить періодичний NWA, в якому розташовані окремі NW. Структура NWA містить періодичні NW GaAs з p-i-n гетеропереходом діаметром ($D=100$ нм) та періодичністю ($P=100-500$ нм). Бічна поверхня NW містить наночастинами золота діаметром від 30 нм до 60 нм. Загальну довжину нанодротів оптимізовано ($L=1$ мкм) для зменшення темнових струмів, що масштабується з довжиною.

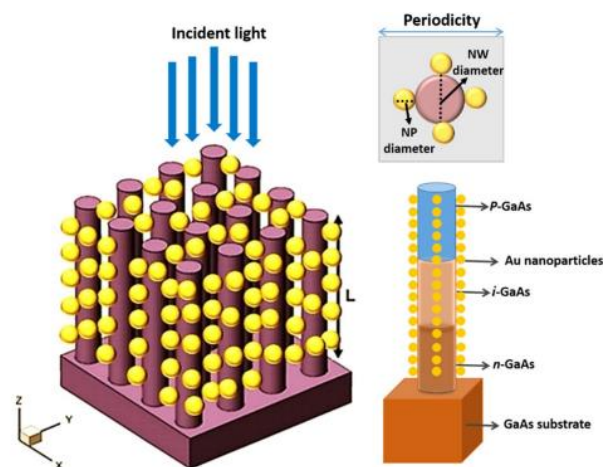


Рис.1.5. Структура плазмонної нанодротяної сонячної батареї GaAs з наночастинками Au. Вставки представляють вид зверху окремого нанодроту

GaAs з наночастинками Au (зверху) і аксіальна наноструктура p-i-n гетеропереходу (внизу) [5]

Для експериментальної перевірки результатів, отриманих у симуляціях, авторами [5] було виготовлено та виміряли сонячні елементи з масивами нанодротів GaAs з площею $1 \text{ мм} \times 1 \text{ мм}$. за допомогою SAG у MOCVD сегменти n-типу та p-типу зростають послідовно на підкладці n^+ з орієнтацією (111). Цей метод зростання не вимагає металевого каталізатора, як це робиться методом пара-рідина-тверде тіло (VLS - vapor-liquid-solid), який вважається джерелом глибоких рівнів пасток у процесі зростання. Парофазна епітаксіальна природа SAG також може уникнути ефектів резервуару, які часто зустрічаються у VLS, і досягти різкого інтерфейсу переходу. Задля i-області в даному моменті не відома фонові концентрація домішок, але вважається, що вона значно нижча, ніж в області p-i-n, і може бути в діапазоні 10^{14} – 10^{15} см^{-3} . Систематичне вивчення впливу зміни довжини i-області триває, остання з оптимізованою довжиною може допомогти у зборі носіїв заряду до певного ступеня, враховуючи коротку довжину дифузії в нанодротах. Нанодроти розділені на відстані 600 нм від центру до центру і мають висоту близько 2,5 мкм та діаметр 320 нм для досягнення практично оптимізованого поглинання сонячного випромінювання AM 1.5G. Хоча нанодроти покривають менше 20% від загальної площі, вони потенційно можуть поглинути практично 90% падаючого сонячного світла. Резонансні режими дозволяють поглинання світла в нанодротах значно вище межі оптики променів при використанні лише частки матеріалу, спожитого в масивному пристрої.

Пошук вдосконалення методів збору сонячної енергії та підвищення ефективності ФЕП обумовлює значний інтерес до коаксіальних p-i-n структур на основі нанодротів, насамперед до їх структурних, оптоелектричних, температурних та інших характеристик. NWA забезпечують оптимальне захоплення широкої частини сонячного спектру,

що сприяє ефективному збиранню сонячної енергії, зменшенню дифузійної довжини пробігу носіїв тощо. Для виготовлення нанодровових сонячних елементів найчастіше використовуються GaAs, GaAs/AlGaAs та ін. [1-10].

На прикладі на рис. 1.6 наведено структурний дизайн та вольт-амперні характеристики (ВАХ) ФЕП у аксіальних p-i-n переходів GaAs/AlGaAs одиночних NW's (типу I та типу II), вирощених на підкладці Si(111) [7].

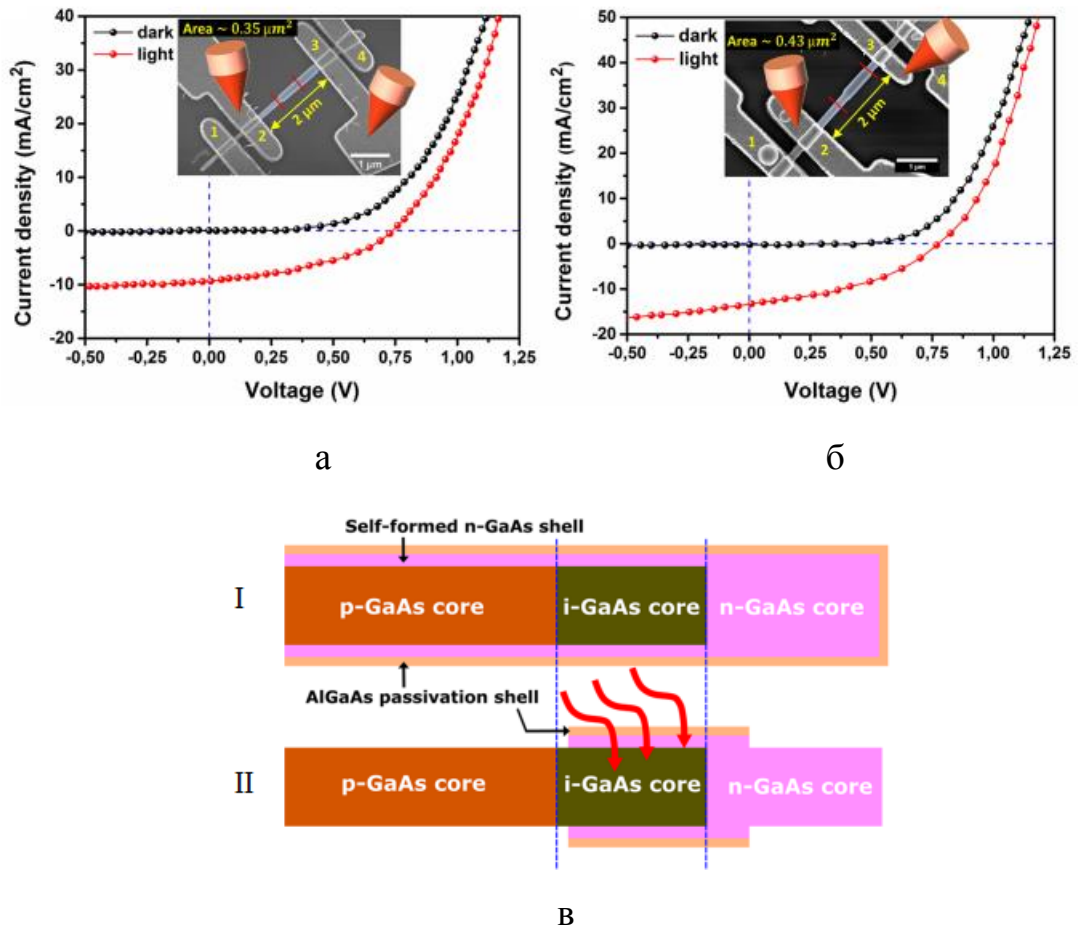


Рис.1.6. Темнові/світлові ВАХ одиночних структур NW's GaAs/AlGaAs типів I (а) та II (б) та відповідний структурний дизайн (в) [7]. На вставці наведено РЕМ-зображення та схему вимірювання ВАХ.

Для дослідження структур та параметрів ФЕП використовується симуляція за допомогою Silvaco TCAD, Comsol Multiphysic та ін. Отримані результати моделювання дозволяють краще зрозуміти фізичні процеси, що відбуваються коаксіальних p-i-n-структур нанодровових сонячних елементах.

РОЗДІЛ 2

МЕТОДИКА І ТЕХНІКА ЕКСПЕРИМЕНТУ

2.1. Методика чисельного моделювання

Одним з найпоширеніших інструментів для чисельного моделювання фотоелектричних пристроїв є Silvaco TCAD (Technology Computer-Aided Design). Програмне забезпечення дозволяє моделювати складні напівпровідникові структури, враховуючи різні фізичні явища [11-16].

Радіальні та аксіальні структури нанодотових сонячних елементів можуть бути спроектовані та досліджені за допомогою інструментів Silvaco TCAD. Однією з особливостей програмного коду є те, що в Atlas3D загальна циліндрична структура створювалася за допомогою оператора `mesh cylindrical three.d`. Параметр `cylindrical` дозволяв задавати радіус, кут та Z-координати, а параметр `three.d` інформував симулятор про створення 3D-сітки. Під час виконання програмного коду [14] симулятор готував звіт у вигляді чисельних даних про електричні параметри спроектованих структур, виводив темнові та світлові (освітлення AM1.5G, 1 sun) вольт-амперні характеристики (ВАХ) та 3D геометрію.

Для чисельного моделювання використовуються рівняння Пуассона, рівняння безперервності та транспортні рівняння. Ці рівняння описують електростатичні, електричні та транспортні властивості напівпровідникової структури.

Електростатичний потенціал пов'язаний із просторовою густиною заряду, як вказано в рівнянні Пуассона [11-13]:

$$\operatorname{div}(\varepsilon \nabla \psi) = -\rho, \quad (2.1)$$

де ψ , ε та ρ - електростатичний потенціал, діелектрична проникність та локальна густина просторового заряду

Наступне рівняння встановлює зв'язок між напруженістю електричного поля та електричним потенціалом:

$$\mathbf{E} = -\nabla\psi. \quad (2.2)$$

Рівняння безперервності визначають швидкості зміни концентрацій носіїв заряду:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \operatorname{div} \mathbf{J}_n + G_n - R_n, \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{q} \operatorname{div} \mathbf{J}_p + G_p - R_p, \quad (2.4)$$

де \mathbf{J}_n та \mathbf{J}_p , G_n та G_p , R_n та R_p , q - щільність струму електронів і дірок, швидкість генерації електронів і дірок, швидкість рекомбінації для електронів і дірок, елементарний заряд.

Рівняння для визначення величин \mathbf{J}_n , \mathbf{J}_p , G_n , G_p , R_n і R_p різняться залежно від обраної транспортної моделі. Найпростішою в Atlas є базова дрейф-дифузійна транспортна модель. Недоліком її використання є менша точність для об'єктів малих розмірів. Рівняння базової дрейф-дифузійної транспортної моделі:

$$\mathbf{J}_n = qn\mu_n\mathbf{E}_n + qD_n\nabla n, \quad (2.5)$$

$$\mathbf{J}_p = qp\mu_p\mathbf{E}_p - qD_p\nabla p, \quad (2.6)$$

де μ_n та μ_p , D_n та D_p - рухливості для електронів і дірок, коефіцієнти дифузії для носіїв

Подальше розв'язання задачі пов'язане з визначенням коефіцієнтів дифузії. Для цього використовують відомі статистики Больцмана та Фермі-Дірака. Слід зазначити, що остання більш придатна для моделювання областей з високим легуванням та об'єктів малих розмірів.

Формули Ейнштейна для коефіцієнтів дифузії:

- в рамках статистики Больцмана:

$$D = \frac{kT_L}{q} \mu, \quad (2.7)$$

де k , T_L – постійна Больцмана та температура решітки

- в рамках статистики Фермі-Дірака для електронів (аналогічні співвідношення можна записати для дірок):

$$D = \frac{\left(\frac{kT_L}{q} \mu_n\right) F_{1/2} \left\{ \frac{1}{kT_L} [\varepsilon_{Fn} - \varepsilon_c] \right\}}{F_{-1/2} \left\{ \frac{1}{kT_L} [\varepsilon_{Fn} - \varepsilon_c] \right\}} \quad (2.8)$$

$$\varepsilon_{Fn} = -q\phi_n = \psi - \frac{kT_L}{q} \ln\left(\frac{n}{n_{ie}}\right), \quad (2.9)$$

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

Як недолік використання базової дрейфово-дифузійної моделі слід зазначити те, що вона не враховує квантових ефектів, таких як хвильова природа носіїв заряду. У нанодротовому сонячному елементі носії заряду обмежені в одному напрямку, що впливає на радіальну густину зарядів і густину станів. Квантові ефекти можуть бути змодельовані в рамках самозгодженої моделі Шредінгера-Пуассона, проте вона не може самостійно вирішувати транспортні проблеми. Тому цю модель використовують у поєднанні з дрейфово-дифузійним методом у просторі мод або методом простору мод нееквілібріумної функції Гріна.

Враховуючи розмірність досліджуваних структур, концентраційні розподіли домішок та температурну залежність, фізичні особливості транспорту заряду моделювалися за допомогою оператора `models fermi ni.fermi cvt srh temperature`. Параметр `fermi` дозволяв враховувати транспорт

заряду, який визначався згідно з дрейфово-дифузійною моделлю зі статистикою Фермі-Дірака. Параметр sth дозволяв враховувати багато фізичних процесів, включаючи рекомбінаційні механізми Шоклі-Рід-Холла, які є домінуючими в подібних структурах і повинні обов'язково враховуватися при моделюванні їх електричних характеристик. На рис. 2.1 наведено узагальнену блок-схему, що вказує на процедури, що використовуються для отримання оптимізованих результатів моделювання: Визначити геометрію пристрою, матеріали, граничні умови → Зробити початкове припущення параметрів → Запустити симулятор (рівняння безперервності, рівняння Пуассона, рівняння безперервності заряду, рівняння дрейф-дифузії) → обчислити ВАХ → Чи відповідає симуляція експериментальним ВАХ ? → Ні: Змінити параметр(и) → Так: Обчислити файли структури (внутрішні дані розподілу).

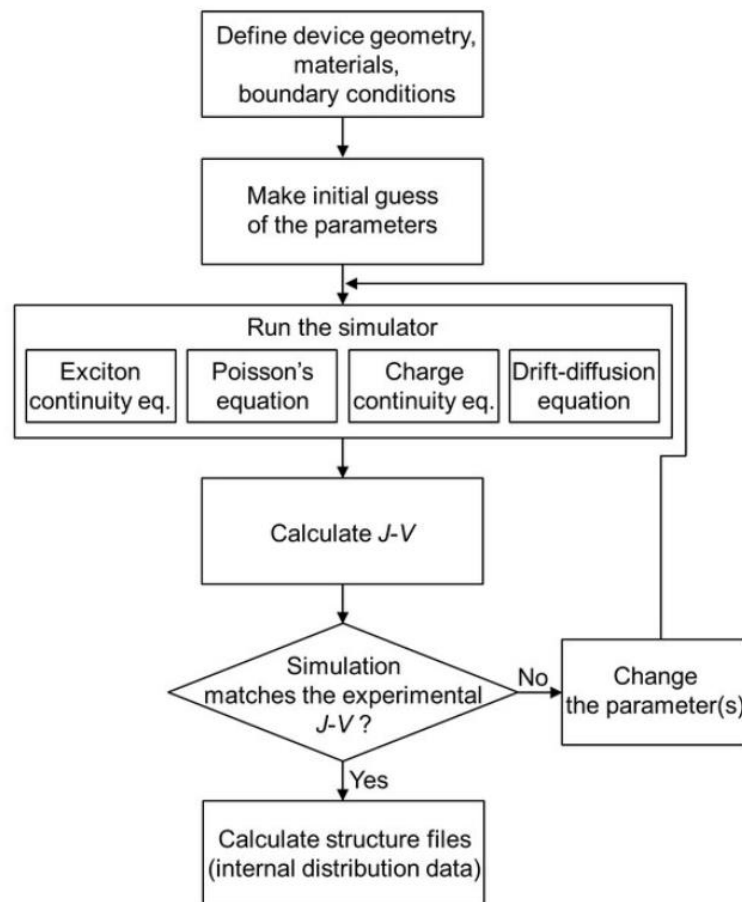


Рис. 2.1. Алгоритм процедури чисельного моделювання ВАХ ФЕП [16]

Варто зазначити, що для моделювання нанодротових пристроїв в Atlas розв'язується рівняння Шредінгера в циліндричних координатах.

В роботах [4-6] розглядається радіаційний механізм рекомбінації Шоклі-Ріда-Холла (SRH). У моделі SRH передбачається, що інтерфейс між GaAs та AlGaAs є ідеальним, без додаткових центрів рекомбінації, що може бути досягнуто завдяки епітаксії з узгодженням ґратки. Поверхневі ефекти враховуються лише для інтерфейсів між повітрям та нанодротом. Тому для поверхні нанодроту враховано поверхневе згинання зон через поверхневі пастки. Для простоти вибрано однакову густину пасток для електронів і дірок, і всі вони припущені на рівні внутрішнього рівня Фермі. Переріз захоплення електрон-дірки явно не доступний. Наявність поверхневих пасток тепер діє як поверхневі центри рекомбінації. Швидкість поверхневої рекомбінації також була змодельована, і S_n та S_p є швидкістю поверхневої рекомбінації (SRV) для електронів і дірок відповідно. Швидкість поверхневої рекомбінації для електронів і дірок вважається однаковою, і три різні значення SRV були використані для різних рівнів пасивації.

2.2. Моделювання одиничного елемента на основі GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходу

Для дослідження нанодротової матриці застосовують симуляції одиничної сонячної комірки з нанодроту на основі GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходу з періодичними граничними умовами. Використовується квадратна ґратка, де індивідуальні комірки мають круговий поперечний переріз, оскільки показано, що циліндрична геометрія є хорошим наближенням більш реалістичної шестикутної геометрії, а круговий поперечний переріз також спрощує обчислення, оскільки задачу можна звести до 2D моделювання.

При проектуванні структур використовувалася наступна конфігурація профілів легування базових шарів: концентрація акцепторної домішки в об'ємі ядра становила від $1 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ до $1 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$; проміжний і-шар був легований донорною домішкою з концентрацією $1 \times 10^{14} \text{ см}^{-3}$; зовнішній шар мав вищу концентрацію донорної домішки, рівну $5 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Як приклад на рис.2.3 приведено типові геометрії в режимі відображення окремих областей для радіальних нанодотових сонячних елементів на основі GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходів.

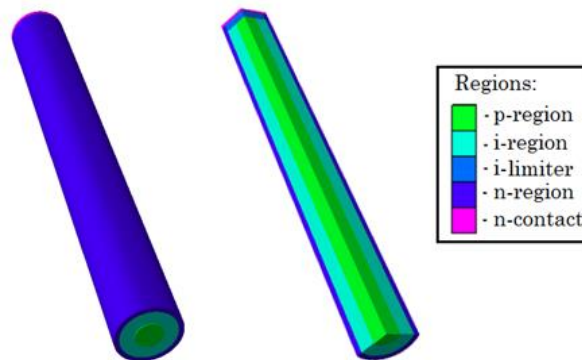


Рис. 2.2. Геометрія радіального нанодотового сонячного елемента на основі GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходу та відповідний зріз з відображенням окремих областей

Критичним параметром матеріалу, який потрібно обрати ретельно для досягнення належної поведінки сонячної комірки, є густина легування. У цій роботі проведено систематичне дослідження для визначення оптимальної густини легування для GaAs/AlGaAs гетеропереходів NW. Як відправну точку, подібну густина легування для обох p- і n-областей було встановлено на рівні $5 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Крім того, можна передбачити вищу густина легування для n-типу підкладки для досягнення добрих омичних контактів. Оскільки рухливість носіїв залежить від густини легування, ідеально було б розглянути модель концентраційно-залежної рухливості для об'ємних підкладок GaAs, однак для нанодотів не було систематичних досліджень, які б пов'язували рухливість носіїв із густиною легування.

**Вхідні параметри моделювання одиничного елемента на основі
GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходу**

№	Параметр структури	GaAs	AlGaAs
1.	Ширина забороненої зони E_g (eV), при $T=300K$	1,42	1,55
2.	Діелектрична проникненість	13,1	12,6
3.	Спорідненість електронів E_{ea} (eV)	4,07	3,96
4.	Густина станів у провідній зоні (N_C см ⁻³), при $T=300K$	$4,7 \times 10^{17}$	$1,39 \times 10^{17}$
5.	Густина станів у валентній зоні (N_V см ⁻³), при $T=300K$	$7,0 \times 10^{18}$	$9,78 \times 10^{18}$
6.	Рухливість електронів μ_n см ² /Вс	1200	2300
7.	Рухливість дірок μ_p см ² /Вс	100	146
8.	Відносна ефективна маса електрона	$0,067m_0$	$0,092m_0$
9.	Відносна ефективна маса електрона	$0,485m_0$	$0,690m_0$
10.	Коефіцієнт радіаційної рекомбінації см ³ /с	$7,2 \times 10^{-10}$	$7,2 \times 10^{-10}$
11.	Коефіцієнт оже-рекомбінації см ⁶ /с	$1,0 \times 10^{-30}$	$1,0 \times 10^{-30}$
12.	Швидкості поверхневої рекомбінації см/с	1300	1300

Сучасні дослідження у сфері сонячних елементів спрямовані на підвищення їх ефективності та продуктивності [17-30]. Один зі шляхів досягнення цієї мети полягає у модифікації електричних властивостей матеріалів, що використовуються в конструкції сонячних елементів. Зокрема, збільшення концентрації акцепторної домішки у радіальних сонячних елементах може суттєво вплинути на їх характеристики. Радіальні сонячні елементи відрізняються від традиційних плоских сонячних елементів тим, що їх активний шар має циліндричну структуру. Це дозволяє краще уловлювати світло та зменшити відбивання, що в свою чергу підвищує ефективність перетворення сонячної енергії. Акцепторні домішки вводяться у напівпровідниковий матеріал для створення р-типу провідності. Підвищення концентрації акцепторних домішок може змінити електричні властивості напівпровідника, зокрема, підвищити концентрацію дірок, що позитивно впливає на провідність матеріалу.

РОЗДІЛ 3

РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

3.1. Структура сонячного елемента на основі GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходу

Один з підходів до підвищення ефективності ФЕП полягає у використанні багатоперехідних сонячних елементів, що містять декілька p-n переходів, з'єднаних послідовно. Кожен перехід призначений для поглинання певного діапазону довжин хвиль сонячного світла, зменшуючи теплові втрати та тим самим підвищуючи ефективність. Традиційні монолітно інтегровані багатоперехідні сонячні елементи складаються з послідовно укладених тонких плівок. Константи кристалічної решітки використовуваних матеріалів узгоджені для забезпечення високоякісного епітаксiального росту.

Нанодротові ФЕП у порівнянні з плівковими, планарними, порошковими та іншими структурами включають можливість інтеграції високоякісних та недорогих матеріалів з відмінними оптоелектричними властивостями, а також покращені деякі електричні параметри. На сьогоднішні одиночні нанодротові сонячні елементи досягли ефективності 10,2% для горизонтальних структур і 40,0% для вертикальних структур. Ці досягнення сприяють розробці нових високоефективних і дешевих нанодротових фотоелектричних перетворювачів, зокрема таких, як радіальні, тандемні або аксіально тандемні, розгалужені, неорганічні/органічні гібридні, на гнучких підкладках та підкладках із скла, графену тощо.

У цій частині роботи представлені результати числового моделювання радіальних структур нанодротових сонячних елементів на основі GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходу. Фотогальванічний елемент, розташований між стандартними електродами, мав загальну довжину 3,11 мкм та діаметр 380 нм. Він складався з трьох шарів: позитивно зарядженого центрального (p-область), нейтрально зарядженого внутрішнього (i-область)

та негативно зарядженого зовнішнього (n-область). Коли фотон потрапляє в нанодріт, він створює електрон-діркову пару в і-області. Електрони переміщуються радіально від центру до збідненого шару зовнішньої n-оболонки, а дірки рухаються до збідненого шару p-області. Перевага кругового перерізу полягає в тому, що електрони і дірки долають значно меншу відстань до контактів, порівняно з плоскою коміркою.

Для розрахунку електричних характеристик аксіальних фотогальванічних елементів радіальної одиничної комірки нанодротового сонячного елемента на основі GaAs\AlGaAs p-i-n-гетеропереходу було обрано однакові геометричні структури з наступними параметрами: довжина p-області 3,00 мкм та діаметр 160 нм; довжина і-шару 2,95 мкм та товщина 80 нм; довжина n-шару 3,10 мкм та товщина 30 нм. Повітряний прошарок, який ізолює і- і n-області від анода, мав товщину 5 нм. Приконтактний шар біля катодного електрода мав товщину 3 нм і був легований донорною домішкою з концентрацією $5 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Матеріал електродів було вибрано за замовчуванням з мінімальною товщиною. Між катодним електродом та і-областю знаходився розділовий прошарок товщиною 8 нм, легований донорною домішкою з концентрацією $1 \times 10^{14} \text{ см}^{-3}$.

Як приклад на рис.3.1 приведено геометрії радіальних GaAs\AlGaAs p-i-n-гетеропереходів.

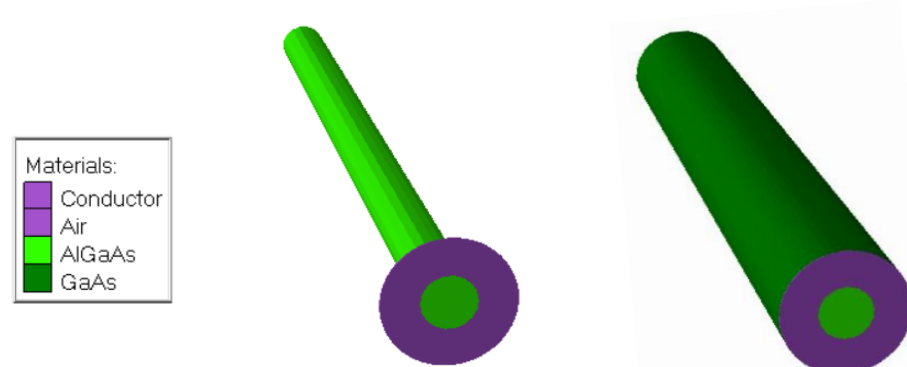


Рис. 3.1. Геометрії радіальної одиничної комірки сонячного елемента на основі GaAs\AlGaAs p-i-n-гетеропереходу з відображенням матеріалів окремих областей

Аналіз ВАХ для одиничних комірок сонячного елемента на основі GaAs\AlGaAs p-i-n-гетеропереходу покладений в основу подальшого обговорення отриманих результатів. Оптимальна товщина шарів визначається таким чином, щоб забезпечити максимальне поглинання світла у активному шарі та мінімізувати рекомбінацію носіїв заряду. Коефіцієнти дифузії визначають швидкість переносу носіїв заряду у структурі. Вибір оптимальних коефіцієнтів дифузії дозволяє зменшити втрати при перенесенні носіїв заряду.

3.2. Концентраційні залежності електричних параметрів

Концентрація легуючих домішок впливає на електричні властивості структури, такі як провідність та електричне поле. Оптимальна концентрація дозволяє досягти високої ефективності фотоелектричного перетворення.

Типові вольт-амперні характеристики при температурі 300 К та концентрації акцепторної домішки $5 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$ для запропонованої одиничної комірки сонячного елемента на основі GaAs\AlGaAs p-i-n-гетеропереходу приведені на рис. 3.2.

Збільшення концентрації акцепторної домішки призводить до зменшення напруги неробочого ходу. Це пов'язано зі збільшенням концентрації дірок у р-шарі, що сприяє кращому розділенню електрон-діркових пар. Зростання концентрації дірок збільшує ймовірність рекомбінації, але завдяки оптимальному розподілу домішок цей ефект можна мінімізувати. Підвищення концентрації акцепторної домішки також впливає на густину струму короткого замикання, зокрема призводить до його зростання. Точка максимальної потужності зміщується вбік величин меншої напруги та більшої густини струму короткого замикання, величина максимальної потужності при цьому зменшується.

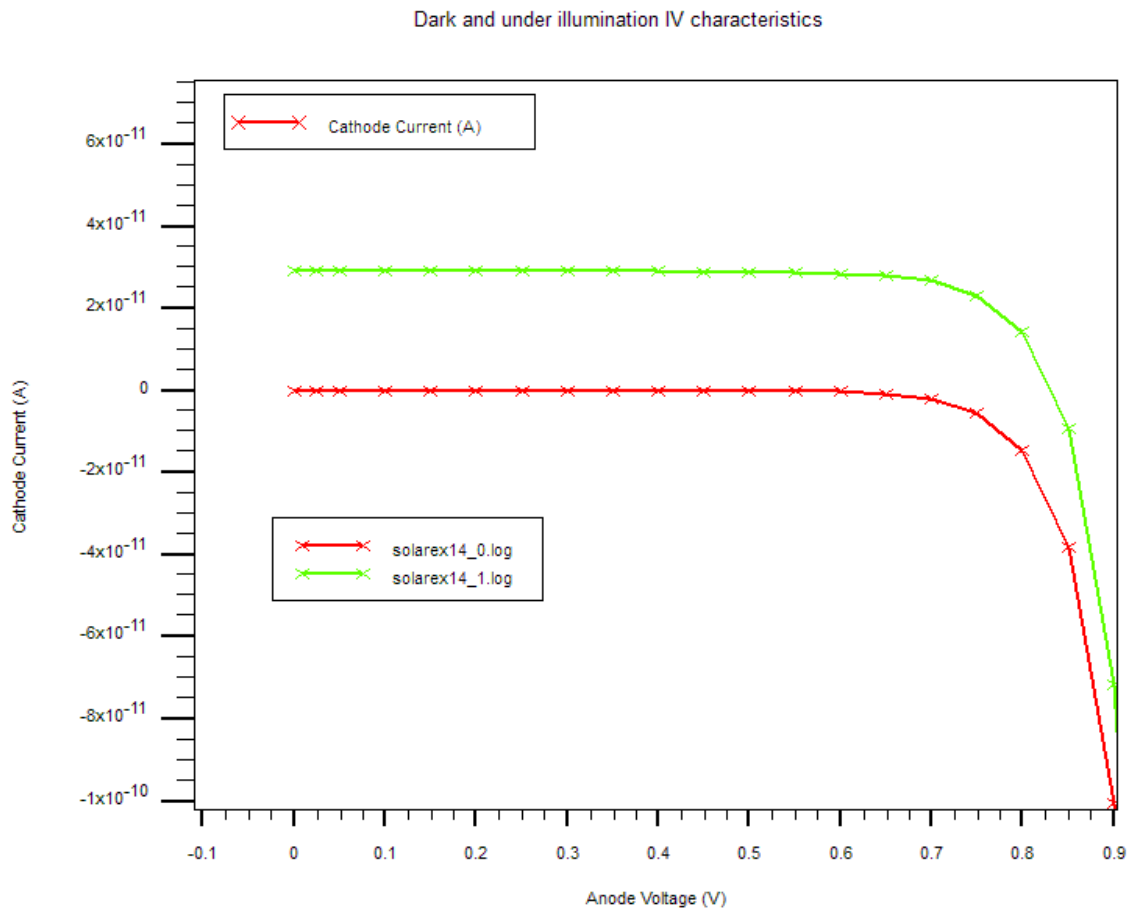


Рис.3.2. Світлова (зелена лінія) та темнова (червона лінія) ВАХ для ФЕП на основі GaAs\AlGaAs p-i-n-гетеропереходу отримані в Silvaco TCAD

В роботі обговорюється фізика процесів, які визначають концентраційну чутливість фотоелектричних перетворювачів, і наведено змодельовані величини електричних параметрів (густина струму короткого замикання J_{SC} , напруга неробочого ходу U_{OC} , максимальна потужність P_m , густина струму короткого замикання в точці максимальної потужності J_m , напруга в точці максимальної потужності U_m , форм фактор FF, ефективність η) нанодотових сонячних елементів. Актуальним напрямком досліджень є вивчення концентраційних або температурних залежностей параметрів сонячних елементів.

При збільшенні концентрації акцепторної домішки фіксується типові зміни ВАХ на ФЕП та їх електричних параметрів (табл.3.1).

Концентраційні залежності параметрів GaAs/AlGaAs NW сонячного елемента при температурі 300 К

Параметри	$5 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$	$5 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$	$5 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$
U_{oc}, V	0,90	0,86	0,83
$J_{sc}, \text{ mA/cm}^2$	25,32	28,98	29,21
U_m, V	0,80	0,75	0,70
$I_m, \mu\text{A}$	24,16	26,69	26,74
$P_m, \mu\text{W}$	19,33	20,02	18,72
$FF, \%$	84,41	80,03	77,18
$\eta, \%$	17,04	17,65	16,50

Коефіцієнт корисної дії та форм-фактор ВАХ також залежать від концентрації акцепторної домішки. Оптимізація цих параметрів дозволяє досягти максимальної ефективності радіального сонячного елемента.

3.3. Оптимізація характеристик за рахунок поверхневих плазмонів

В роботі досліджено вплив локалізованого поверхневого плазмонного резонансу (LSPR) наночастинок Al, рівномірно розташованих уздовж бічних стінок вертикально вирівняних сонячних елементів з нанодротів GaAs на оптичне поглинання, щільність струму та загальну ефективність з метою розробки високоефективних і економічно вигідних NW SC.

Результати електричних симуляцій вказують на те, що в порівнянні з аксіальним переходом, сонячний елемент з нанодротів з радіальним переходом досягає найвищих значень ефективності та J_{sc} , оскільки радіальний p-n перехід забезпечує покращений збір носіїв заряду та відокремлення оптичної та електричної товщини активного матеріалу.

В роботі [6] досліджено щільність струму (J_{SC}) і коефіцієнт корисної дії (ККД) для запропонованої структури плазмонного сонячного елемента на основі GaAs з наночастинками Al з різними співвідношеннями D/P. Схематичні діаграми NWA приведено на рис. 3.3. Діаметр NW приймається рівним 180 нм з коефіцієнтом заповнення $(D/P) = 0,5$ (D – діаметр нанодроту, P – період), що було показано як оптимальне для поглинання та продуктивності нанодротів. Висота приймається рівною 2 мкм, оскільки було виявлено [6], що при висоті понад 2 мкм немає значного покращення у поглинанні світла. Товщина підкладки GaAs приймається як напівнескінченна відповідно до граничних умов PML у FDTD-симуляціях.

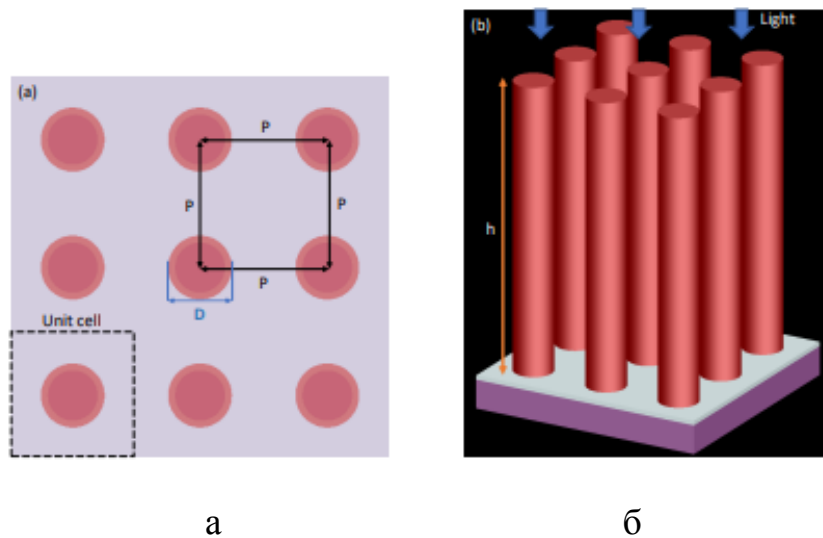
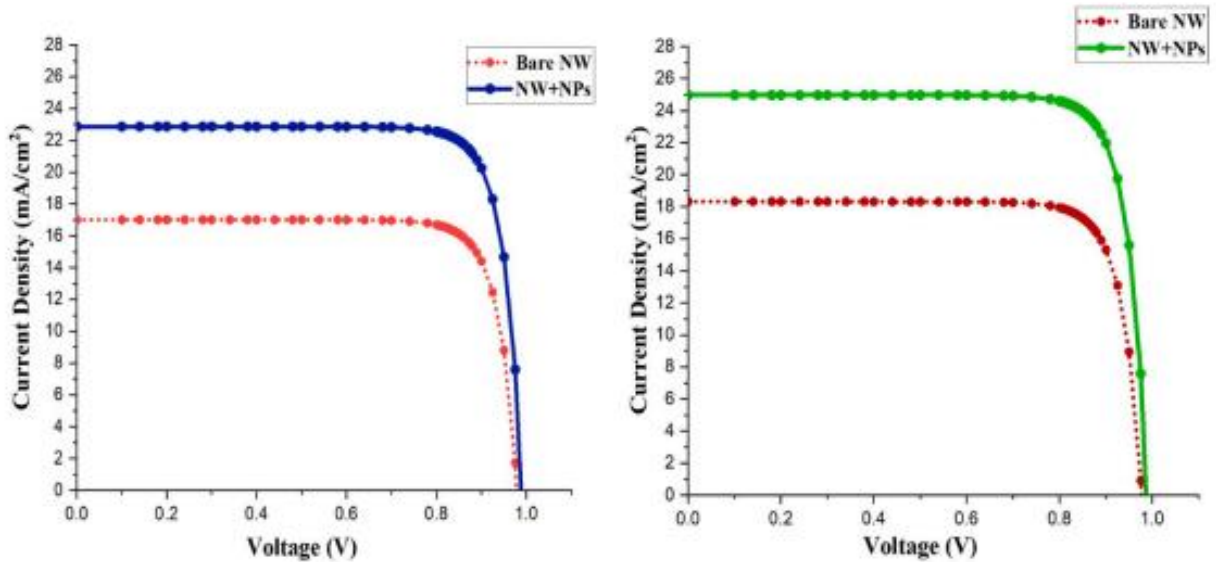


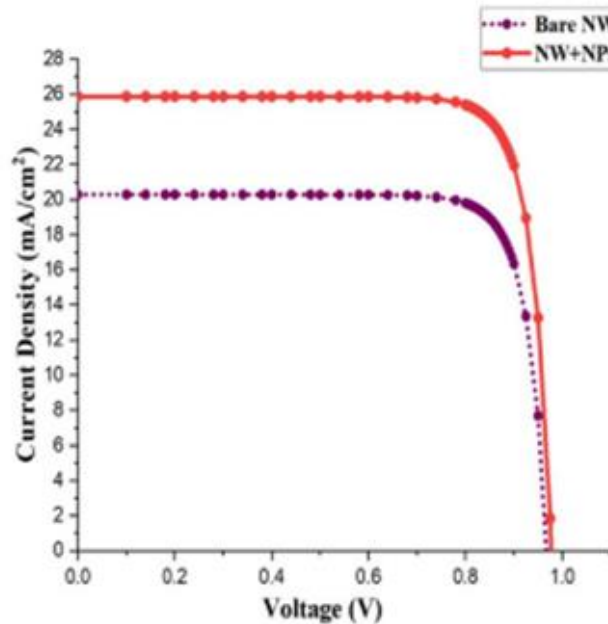
Рис. 3.3. Вид зверху на масив 3x3 (а) та перспективний вид вертикального масиву нанодротів (б) [6]

На рис. 3.4 та рис.3.5 відповідно приведені ВАХ та криві максимальної потужності для сонячного елемента з нанодротів GaAs, з включенням наночастинок Al ($D = 50$ нм) і без них, при освітленні AM 1.5 G для радіальних переходів відповідно. Оскільки максимальне підвищення поглинання досягається з наночастинками Al розміром $D = 50$ нм, в роботі [3] використовували їх для проведення електричного аналізу.



а

б



в

Рис. 3.4. Порівняльні ВАХ з наночастинками Al і без них при значеннях параметра D/P 0,3 (а), 0,4 (б) і 0,5 (в) для нанодротів GaAs з радіальним p-n переходом [3]

Видно, що зі включенням наночастинок Al значно збільшується значення J_{SC} , а також ефективність для всіх значень співвідношення D/P . Максимальне значення J_{SC} , отримане для радіальних та аксіальних переходів зі співвідношенням $D/P = 0,5$ та додаванням наночастинок Al ($D = 50$ нм),

становить 23,534 та 22,766 мА/см², що вказує на збільшення на 38,3 % та 39,4 % відповідно. Крім того, спостерігається збільшення ефективності на 40,9 % та 41,96 % для сонячних елементів з нанодротів з радіальним та аксіальним р-n переходами відповідно, з найвищими значеннями ефективності 19,3 % та 18,21 % відповідно при співвідношенні D/P 0,3 [3].

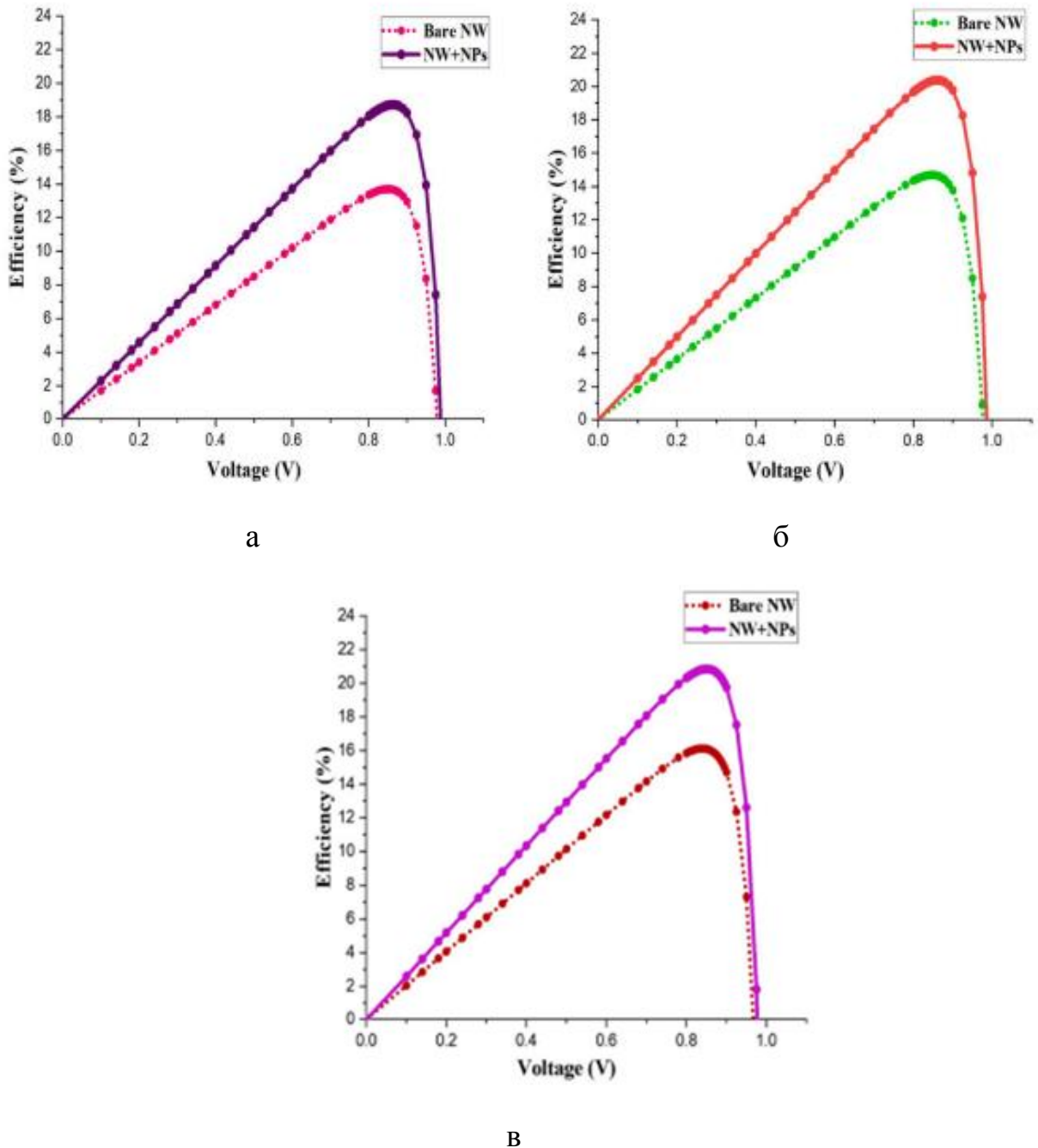


Рис. 3.5. Порівняльні характеристики ефективності перетворення енергії для нанодротів з наночастинками Al (50 нм) і без них при значенні параметра D/P 0,3 (а), 0,4 (б) і 0,5 (в) [3]

Було використано методи 3D-FDTD і DEVICE [3] для чисельного аналізу покращеної оптоелектронної продуктивності запропонованої структури. Наночастинки Al сприяють уловлюванню падаючих фотонів шляхом розсіювання світла, тим самим покращуючи поглинання фотонів. Для досягнення максимального підвищення поглинання при низькому співвідношенні D/P зроблено підбір геометричних параметрів плазмонних наночастинок Al. Це знижує вартість виготовлення оптимізованих NW SC шляхом економії матеріалу. Оптимізуючи діаметр NP, які викликають збудження локалізованого поверхневого плазмонного резонансу, було досягнуто значного підвищення поглинання на 45 % при 800 нм у порівнянні з базовою структурою NW SC. Це є значно вищим, ніж у тонких плівках. Величина коефіцієнта перетворення енергії (ККД) 20,85 % і щільності струму (J_{SC}) 25,87 мА/см² для ФЕП GaAs з наночастинками Al. Порівняння отриманих результатів з попередніми роботами [3-5], що використовують Au і Ag як плазмонні наночастинки, і було встановлено, що Al перевершує обидва матеріали, забезпечуючи більш високе широкосмугове підвищення поглинання, а також відносно вищі значення J_{SC} і ККД. Результати симуляцій показують, що запропонована композитна структура уловлювання світла є потенційним кандидатом для досягнення низьковартісних високоефективних наноструктурованих сонячних елементів. Таким чином, робота [3], яка поєднує переваги уловлювання світла масивом нанодротів GaAs з LSPR в наночастинках, є перспективною для подальших досліджень і може допомогти надати цінні рекомендації для розробки інших структур уловлювання світла для NW SC.

ВИСНОВКИ

Проектовані одновимірні структури радіальних нанодіотових сонячних елементів на основі GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходів в рамках дрейф-дифузійної транспортної моделі зі статистикою Фермі-Дірака демонструють прийнятні величини електричних параметрів: напругу неробочого ходу (U_{oc}), густину струму короткого замикання (J_{sc}), максимальну потужність (P_m), форм-фактор (FF) та фотовольтаїчну ефективність (η).

Досліджено вплив концентрацій акцепторної домішки в об'ємі ядра на вольт-амперні характеристики та електричні параметри нанодіотових сонячних елементів на основі GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходів. При концентрації акцепторної домішки $5 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$ отримано найбільшу величину ефективності $\eta = 17,65 \%$. Товщина активного шару, концентрація легуючих домішок та коефіцієнти дифузії мають значний вплив на ефективність фотоелектричного перетворення. Отримані дані добре узгоджуються з відомими експериментальними даними для сонячних елементів на основі GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходів.

Чисельне моделювання та оптимізація параметрів GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходів дозволяють значно підвищити ефективність фотоелектричних перетворювачів. Отримані результати можуть бути використані для подальшого вдосконалення технології виробництва високоефективних сонячних елементів.

Плазмонні сонячні батареї представляють собою перспективний напрямок в галузі відновлювальної енергетики. Подальші дослідження мають бути спрямовані на вирішення викликів, пов'язаних з матеріалами та виробничими процесами, що дозволить значно підвищити ефективність та доступність цієї технології.

література :


СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Axial vs radial junction nanowire solar cell / V. Raj, H.H.Tan, C.Jagadich // *Asian J. Phys.* – V. 28, No 7-9, – 2019. – P.719-747.
2. Nanowires for high-efficiency, low-cost solar photovoltaics / Y. Zhang, H. Liu // *Crystals.* – V. 9, 87. – 2019.– P. 1-25.
3. Efficiency enhancement of GaAs nanowire array-based solar cell by plasmonic Al nanoparticles / M. Rautela, J. Kumar // *Materials Today Communications.* – 2023. – V.37.– P.106984.
4. GaAs Nanowire Array Solar Cells with Axial p–i–n Junctions / M. Yao, N. Huang, S.Cong et al. // *Nano Lett.* – 2014. – 14. – P. 3293–3303.
5. Plasmon-Enhanced Light Absorption in (p-i-n) Junction GaAs Nanowire Solar Cells: An FDTD Simulation Method Study / E.A. Dawi, A.A. Karar, E. Mustafae et al. // *Nanoscale Res Lett.* – 2021. – V.16 . – P. 149.
6. Optimization of a GaAs/AlGaAs p-i-n heterojunction nanowire solar cell for improved optical and electrical properties / S. Majumder, K. R. A., S. Ravindran // *J. Opt. Soc. Am. B.* – 2023. – V. 40.– P. 2684-2695.
7. GaAs/AlGaAs Nanowire Array Solar Cell Grown on Si with Ultrahigh Power-per-Weight Ratio / A.Mukherjee, D.Ren, Per-Erik Vullum et al. // *ACS Photonics.* – 2021. – 8. – P. 2355–2366.
8. Optimizations of GaAs Nanowire Solar Cells / A. H. Trojnar, C. E. Valdivia, R. R. LaPierre, K. Hinzer and J. J. Krich// *IEEE Journal of Photovoltaics.* – 2016. –V. 6, № 6. – P. 1494-1501.
9. 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.
10. Calculation of Hole Concentrations in Zn Doped GaAs Nanowires / J. Johansson, M. Ghasemi, S. Sivakumar et al. // *Nanomaterials.* – 2020. – V.10, 2524.– P. 1-12

11. Silvaco, ATLAS user's manual device simulation software, Santa Clara CA: Silvaco International, 2018 – 1776 p. Silvaco, DeckBuild User's Manual Device Simulation Software, Santa Clara CA: Silvaco International, 2018. – 241 p.
12. Silvaco, ATHENA User's Manual Device Simulation Software, Santa Clara CA: Silvaco International, 2018 – 444 p.
13. Simulating Solar Cell Devices Using Silvaco TCAD Tools/ Silvaco// Simulation Standard.- Santa Clara CA: Silvaco International, 2008.- V. 18, No 2.- P. 1-12
14. <https://silvaco.com/examples/tcad> – Silvaco, TCAD Exaples, дата доступу: 24.05.2024 p.
15. Приладово-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.
16. Numerical simulation of FinFET transistors parameters/ I.P Buryk, A.O. Golovnia, M.M. Ivashchenko, L.V.Odnodvorets // J. Nano- and electronic Physics. . – 2020. – V.12, №3– P. 03005-4.
17. Simulation of parameters of coaxial solar cells based on Si and InP nanowires/ I.P. Buryk, L.V. Odnodvorets, Ya.V. Khyzhnya // J. Nano- Electron. Phys. – 2021. – V. 13, No 1. – P. 01012-4.
18. Василюха Х. В. Вдосконалення нормативно-технічної бази випробувань сонячних перетворювачів: автореф. дис. на здобуття наук. ступеня канд. техн. наук: спец. 05.01.02 / Національний університет «Львівська політехніка». – Львів, 2017. – 20 с.
19. Божко К.М. Вдосконалення методів та засобів контролю дефектів фотоелектричних сонячних батарей: автореф. дис. на здобуття наук. ступеня канд. техн. наук: спец. 05.11.13 / Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут». – Київ, 2016. – 24 с.

20. Zavorotnyi V.F. The laboratory tester of solar cells with dynamic reconfiguration of measuring system / V. F. Zavorotnyi, O.V. Borisov // *Microsyst Electron Acoust.* – 2018. – V. 23, №. 1. – P. 23-29.
21. Single-nanowire, low-bandgap hot carrier solar cells with tunable open-circuit voltage / S. Limpert, A. Burke, I-Ju Chen et al. // *Nanotechnology.* – 2017. – V. 28, (43).– P. 434001.
22. 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.
23. 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.
24. 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.
25. Topical review: pathways toward cost-effective single-junction III–V solar cells / Vidur Raj et al // *J. Phys. D: Appl. Phys.* – V. 55. – 2022. –P. 143002.
26. 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.
27. 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.
28. 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. – P. 04029-6.
29. 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.
30. 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.

СЛАЙДИ ПРЕЗЕНТАЦІЇ ДО РОБОТИ



МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ КРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
КЛАСИЧНИЙ ФАХОВИЙ КОЛЕДЖ
Центр заочної, дистанційної та вечірньої форм навчання

Кваліфікаційна робота бакалавра

**КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ОПТИМІЗАЦІЯ
ОДНОВИМІРНИХ ФОТОЕЛЕКТРИЧНИХ
ПЕРЕТВОРЮВАЧІВ**

Студента гр. ЕІ-01

С.А. Приймака

Науковий керівник,
Викладач, к. ф.-м. н, доцент

І.П. Бурик

Кіровоград 2024

ВСТУП

2

Об'єктом дослідження кваліфікаційної роботи є фізичні основи принципу дії, структурні та робочі характеристики нанодіодних фотоелектричних перетворювачів сонячної енергії на основі GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходу.

Мета роботи полягає у вивченні фізичних моделей нанодіодних сонячних елементів на основі GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходу, алгоритмів їх комп'ютерного моделювання, аналізу отриманих експериментальних результатів.

При виконанні роботи для розробки та створення наноструктур сонячних елементів на основі GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходу використовувалися методи комп'ютерного приладно-технологічного моделювання у програмному середовищі Silvaco TCAD.

У результаті проведених досліджень було виконано ряд моделювань наноструктур фотоелектричних перетворювачів сонячної енергії, набуто назвчок роботи з транспортними моделями, зроблено висновки про особливості застосування таких елементів в сучасній мікроелектроніці.

Робота складається із вступу, трьох розділів основної частини та висновків. У першому розділі наведено огляд фізичних основ принципу дії, особливостей будови нанодіодних фотодіодних елементів. У другому розділі описано методи симуляції структур, розробку та опис програми для моделі фотоелектричного перетворювача на основі GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходу. У третьому розділі аргументовано вибір транспортних моделей для p-i-n наноструктур, проаналізовано та порівняно результати моделювання з реальними характеристиками, розглянуто методи оптимізації ФЕП.

РОЗДІЛ 1. ОГЛЯД ХАРАКТЕРИСТИК ОДНОВИМІРНИХ ФОТОЕЛЕКТРИЧНИХ ПЕРЕТВОРЮВАЧІВ

1.1. БУДОВА ТА ПРИНЦИП ДІЇ СОНЯЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ

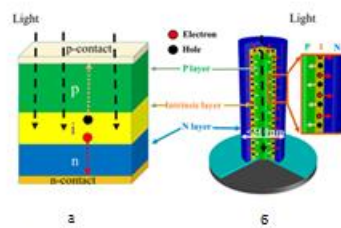


Рис.1.1. Схеми поширення фотонів та носіїв у 2D - плівкових (а) та 1D - нанодротових (б) ФЕП

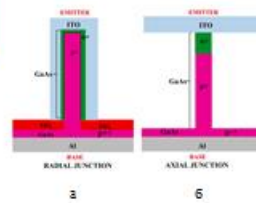


Рис.1.2. Схематичне зображення
одиночного ФЕП з радіальним (а) та
аксіальним (б) р-і-п гетеропереходом

1.2. Огляд технології GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходів

4

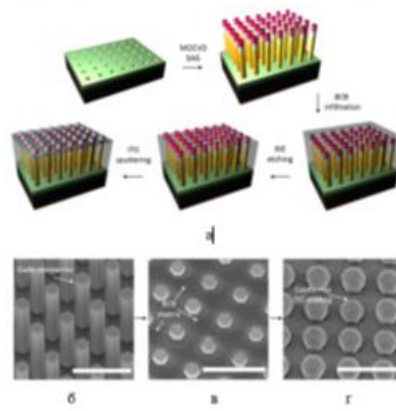


Рис.1.3. Процес виготовлення GaAs-надротових сонячних елементів з аксіальною структурою (а) та їх зображення (б) отримані в растровому електронному мікроскопі (РЕМ)

1.3. Плазмонні фотоелектричні перетворювачі та їх оптимізація наночастинками

5

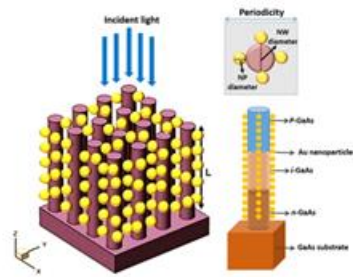


Рис.1.4. Структура плазмонної нанодротяної сонячної батареї GaAs з наночастинками Au. Вставки представляють вид зверху окремого нанодротя GaAs з наночастинками Au (зверху) і аксіальна наноструктура p-i-n гетеропереходу (знизу)

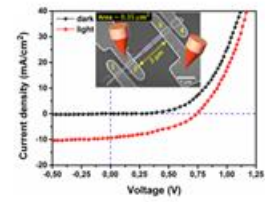


Рис.1.5. Темнові/світлові ВАХ одиночних структур NW з GaAs/AlGaAs. На вставці наведено РЕМ-зображення та схему вимірювання ВАХ.

РОЗДІЛ 2 МЕТОДИКА І ТЕХНІКА ЕКСПЕРИМЕНТУ 6

2.1. Методика моделювання в Silvaco TCAD

Процедури, що використовуються для отримання оптимізованих результатів моделювання: Визначити геометрію пристрою, матеріали, граничні умови → Зробити початкове припущення параметрів → Запустити симулятор (рівняння безперервності, рівняння Пуассона, рівняння безперервності заряду, рівняння дрейф-дифузії) → обчислити ВАХ → Чи відповідає симуляція експериментальним ВАХ? → Ні: Змінити параметр(и) → Так: Обчислити файли структури (внутрішні дані розподілу).



Рис. 2.1. Геометрії радіального нанодіодового сонячного елемента на основі GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходу та відповідний зріз з відображенням робочих областей (а) та відповідних матеріалів (б)

2.2. Моделювання одиничного елемента на основі GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходу

Таблиця 2.1

Вхідні параметри моделювання одиничного елемента на основі GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходу

№	Параметр структури	GaAs	AlGaAs
1.	Ширина забороненої зони E_g (eV), при $T=300\text{K}$	1,42	1,55
2.	Діелектрична проникність	13,1	12,6
3.	Спорідненість електронів E_{cv} (eV)	4,07	3,96
4.	Густина станів у провідній зоні (N_C см ⁻³), при $T=300\text{K}$	$4,7 \cdot 10^{17}$	$1,39 \cdot 10^{17}$
5.	Густина станів у валентній зоні (N_V см ⁻³), при $T=300\text{K}$	$7,0 \cdot 10^{18}$	$9,78 \cdot 10^{18}$
6.	Рухливість електронів μ_n см ² /Вс	1200	2300
7.	Рухливість дірок μ_p см ² /Вс	100	146
8.	Відносна ефективна маса електрона	$0,067m_0$	$0,092m_0$
9.	Відносна ефективна маса електрона	$0,485m_0$	$0,690m_0$
10.	Коефіцієнт радіаційної рекомбінації см ³ /с	$7,2 \cdot 10^{-10}$	$7,2 \cdot 10^{-10}$
11.	Коефіцієнт оже-рекомбінації см ³ /с	$1,0 \cdot 10^{-10}$	$1,0 \cdot 10^{-10}$
12.	Швидкості поверхневої рекомбінації см/с	1300	1300

3.1. Робочі характеристики ФЕП на основі GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходу

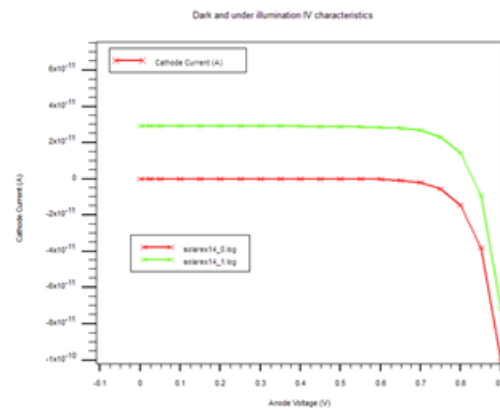


Рис.3.1. Світлова (зелена лінія) та темнова (червона лінія) ВАХ для ФЕП отримані в Silvaco TCAD

3.2. Концентраційні залежності електричних параметрів

9

Таблиця 3.1
 Концентраційні залежності параметрів GaAs/AlGaAs NW сонячного
 елемента при температурі 300 К

Параметри	$5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$	$5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$	$5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
U_{oc}, V	0,90	0,86	0,83
$J_{sc}, \text{mA/cm}^2$	25,32	28,98	29,21
U_m, V	0,80	0,75	0,70
I_m, pA	24,16	26,69	26,74
P_m, pW	19,33	20,02	18,72
$FF, \%$	84,41	80,03	77,18
$\eta, \%$	17,04	17,65	16,50

3.3. Оптимізація характеристик за рахунок поверхневих плазмонів

10

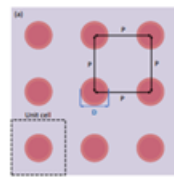
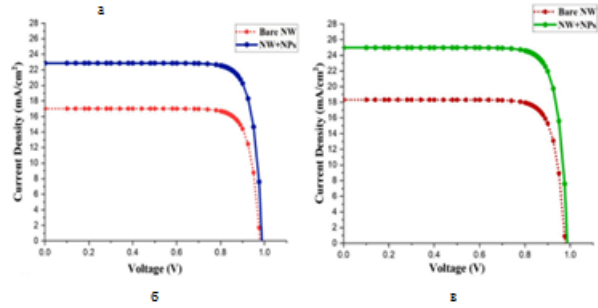


Рис. 3.4. Вид зверху на масив 3x3 нанодротів (а), порівняльні ВАХ з наночастинками Al і без них при значеннях параметра D/P 0,3 (б) та 0,4 (в) для нанодротів GaAs з радіальним р-п переходом



1. Проєктовані одновимірні структури радіальних нанодіодових сонячних елементів на основі GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходів в рамках дрейф-дифузійної транспортної моделі зі статистикою Фермі-Дірака демонструють прийнятні величини електричних параметрів: напругу неробочого жоду (U_{oc}), густину струму короткого замикання (J_{sc}), максимальну потужність (P_m), форм-фактор (FF) та фотовольтаїчну ефективність (η).
2. Досліджено вплив концентрацій акцепторної домішки в об'ємі ядра на вольт-амперні характеристики та електричні параметри нанодіодових сонячних елементів на основі GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходів. При концентрації акцепторної домішки $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ отримано найбільші величини ефективності $\eta = 17,65 \%$. Було виявлено, що товщина активного шару, концентрація легуючих домішок та коефіцієнти дифузії мають значний вплив на ефективність фотоелектричного перетворення. Отримані дані добре узгоджуються з відомими експериментальними даними для сонячних елементів на основі GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходів.
3. Чисельне моделювання та оптимізація параметрів GaAs/AlGaAs p-i-n-гетеропереходів дозволяють значно підвищити ефективність фотоелектричних перетворювачів. Отримані результати можуть бути використані для подальшого вдосконалення технології виробництва високоефективних сонячних елементів.
4. Плазмонні сонячні батареї представляють собою перспективний напрямок в галузі відновлювальної енергетики. Подальші дослідження мають бути спрямовані на вирішення викликів, пов'язаних з матеріалами та виробничими процесами, що дозволить значно підвищити ефективність та доступність цієї технології.