

УДК 517.938:536.759

ІНТЕГРОВАНІЙ ПРОГРАМНИЙ ПАКЕТ ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОЦЕСІВ ПЕРЕНОСУ СТРУМУ В НАПІВПРОВІДНИКОВИХ СТРУКТУРАХ

П. П. Горлей, О. А. Червінський

Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича
58012, м. Чернівці, вул. Коцюбинського, 2. Тел. : (380-3722) 46877,
e-mail: semicon@chnu.cv.ua

Анотація

ІНТЕГРОВАНІЙ ПРОГРАМНИЙ ПАКЕТ ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОЦЕСІВ ПЕРЕНОСУ СТРУМУ В НАПІВПРОВІДНИКОВИХ СТРУКТУРАХ

П. П. Горлей, О. А. Червінський

У роботі продемонстровано можливості створеного програмного пакету “Solar Cell Simulator” щодо моделювання процесів переносу струму в різних типах напівпровідникових бар’єрних структур у залежності від виду, величини та сукупності зовнішніх керуючих параметрів (типу випрямляючої структури, інтенсивності та частотного розподілу світлового опромінення, прикладеної напруги, типу та параметрів напівпровідникового матеріалу, концентрації легуючої домішки тощо).

Ключові слова: моделювання, програмний пакет, сонячні елементи, вплив домішки, модель напівпровідника.

Abstract

SOFTWARE FOR INVESTIGATION OF CURRENT TRANSPORT PROCESSES IN SEMICONDUCTOR STRUCTURES

P. P. Horley, O. A. Chervinskiy

The paper reports the development of the software “Solar Cell Simulator”, designed for numerical modeling of current transport phenomena in the different semiconductor barrier structures depending on the type and magnitude of external and internal parameters (such as intensity and spectrum of illumination, applied voltage, type and parameters of semiconductor materials, impurity concentration, etc.).

Key words: modelling, software, solar cell, impurities influence, semiconductor model.

Аннотация**ИНТЕГРИРОВАННЫЙ ПРОГРАММНЫЙ ПАКЕТ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА ТОКА В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУРАХ***П. П. Горлей, А. А. Червинский*

В работе продемонстрированы возможности созданного программного пакета “Solar Cell Simulator” в отношении моделирования процессов переноса тока в разного типа полупроводниковых барьерных структурах в зависимости от вида, величины и совокупности внешних управляющих параметров (типа выпрямляющей структуры, интенсивности и частотного распределения светового излучения, приложенного напряжения, типа и параметров полупроводникового материала, концентрации легирующей примеси и т.п.).

Ключевые слова: моделирование, пакет программ, солнечные элементы, влияние примеси, модель полупроводника.

Вступ

Сучасний стан енергетики потребує розробки нових перетворювачів сонячної енергії з характеристиками, що перевищують існуючі аналоги. Вирішення цього питання можливо двома взаємодоповнюючими шляхами. Перший із них, більш вартісний та енерговитратний, направлено на пошук нових матеріалів мікроелектроніки, які сприятимуть суттєвому зростанню ефективності фотоперетворювачів. Інший — розробка сучасних програмних продуктів, які дадуть змогу за допомогою чисельних розрахунків на основі адекватних фізичних моделей переносу струму у випрямляючих структурах значно прискорити вирішення глобальної проблеми розробки нових типів ефективних перетворювачів сонячної енергії. На даний час уже існує ряд програм, що дають змогу моделювати процеси струмопереносу у структурах на основі добре вивчених напівпровідникових матеріалів — кремнію та арсеніду галію (див., напр., [1]). Проте в останні роки досить інтенсивно досліджуються та уже створено лабораторні зразки сонячних елементів з порівняно високими значеннями коефіцієнту корисної дії на основі халькогенідних матеріалів (телуриду кадмію [2,3] та напівпровідників з халькопіритною структурою $\text{CuIn}(\text{Ga})\text{Se}(\text{Te})_2$ [4–6]), які характеризуються температурною стабільністю та радіаційною стійкістю [7]. Тому актуальною є задача розробки інтегрованого пакету прикладних програм для моделювання транспортних процесів у сонячних елементах на основі зазначених матеріалів, з урахуванням особливостей їх енергетичної зонної структури, стану дефектної підсистеми, поглинальної здатності тощо. Частковому вирішенню цієї задачі присвячено дану роботу.

Розроблене програмне забезпечення

Програмний пакет побудовано на використанні моделей трьох типів: моделі випрямляючої структури (зокрема, p-n-перехід, контакт метал-напівпровідник, гомо- та гетероперехід тощо), моделі напівпровідникового матеріалу та фізичних моделей механізмів перенесення струму через контакт, типів генерації та рекомбінації носіїв. Всі перераховані моделі задаються у вигляді аналітичних виразів або табличних даних, які базуються на основі сучасних результатів фізики напівпровідників і напівпровідникових приладів [8–10]. Програма дозволяє, зокрема, задавати кількість шарів фотоперетворювача із зазначенням їх протяжності, типу базового матеріалу, концентрації легуючої домішки тощо. При цьому тип матеріалу користувач вибирає зі списку матеріалів існуючої бази даних. Передбачена можливість внесення нового типу напівпровідникового матеріалу до бази: для цього необхідно вказати його назву, ширину забороненої зони, спорідненість до електрона, час життя та ефективні маси носіїв, спектральну залежність коефіцієнту поглинання світла, тип та параметри легуючої домішки (концентрацію та глибину залягання рівня) тощо. Важливо, що при цьому враховується залежність параметрів базового матеріалу від типу та величини зовнішніх впливів (наприклад, температури), що можуть бути вказані таблично або за допомогою аналітичних виразів. Спектр сонячного випромінювання може задаватися як повним, так і у вигляді окремої його частини з врахуванням географічного положення місцевості. Для порівняння враховано також спектр випромінювання абсолютно чорного тіла. Фізичні моделі окрім різних типів генераційно-

рекомбінаційних процесів (теплова генерація та рекомбінація, генерація під дією світла, Оже-рекомбінація, рекомбінація Холла-Шоклі-Ріда, рекомбінація на поверхні та контактах [8,9]) враховують також надбар'єрний струм та струм тунелювання носіїв. Розрахунок вольт-амперної характеристики (ВАХ) досліджуваної структури може проводитися на основі декількох запропонованих для неї моделей перенесення струму через бар'єр (наприклад, у випадку контакту метал-напівпровідник — дифузійної теорії, термоемісійної теорії, тунелювання через бар'єр; для надбар'єрного струму — в наближеннях діодної та дифузійної теорій тощо).

Інтегрований пакет програм "Solar Cell Simulator" розроблено для IBM- сумісних комп'ютерів і операційних систем Windows98/NT /2000/XP. Програма написана на об'єктно орієнтованій мові програмування C++ з використанням класів бібліотек Qt (для розробки візуального інтерфейсу), Qwt і Qwt3d (для відображення даних у вигляді двовимірних і тривимірних графіків, відповідно), QSA — для синтаксичного аналізу математичних виразів.

Інтерфейс програми "Solar Cell Simulator" має розвинену віконну структуру, що забезпечує ефективну роботу з різними модулями програми. Модулі чітко спеціалізовані для виконання певних завдань: розрахунок рівноважної та нерівноважної концентрації основних і неосновних носіїв і їх просторового розподілу, розрахунок рекомбінаційно-генераційних механізмів, розрахунок ВАХ для різних механізмів переносу струму, знаходження параметрів механізмів струмопереносу та пристрою за експериментальними залежностями ВАХ; оптимізація характеристик пристрою (напруги холостого ходу, струму короткого замикання, фактору заповнення та коефіцієнту корисної дії) за набором параметрів напівпровідника та типу випрямляючої структури, графічне представлення залежностей характеристик пристрою від величин керуючих параметрів і їх сукупності тощо. З метою дослідження залежностей характеристик пристрою від зміни декількох (більше ніж двох) параметрів у програмному пакеті передбачена функція знаходження мінімуму та максимуму певної характеристики на заданому проміжку зміни керуючих параметрів. З огляду на можливий великий час розрахунків для задач багатовимірної оптимізації у "Solar Cell Simulator" впроваджено метод "відкладених розрахунків": розрахунко-

вий процес може бути перервано у будь-якому місці, записано на диск, а потім продовжено з цього ж місця в інший зручний для користувача час. Результати розрахунків можна досліджувати, змінюючи масштаб отриманих кривих, а також записувати їх у бінарні або графічні файли.

Програма створена таким чином, що базові рівняння, які описують, наприклад, розподіли концентрацій або різні типи механізмів перенесення струму, можна зберігати у власному форматі цього програмного пакету або у вигляді форматowanego текстового файлу, що містять основні параметри базових матеріалів структури, назву врахованих механізмів генерації та рекомендації носіїв, а також назви і значення проміжних змінних, що спрощує аналіз та використання отриманих числових даних.

Інтерфейс дозволяє наочно представляти конструкцію фотодіоду, його енергетичну діаграму, проводити вибір матеріалу, типу та концентрації легуючої домішки тощо. Результати розрахунків виводяться на екран у вигляді розподілів концентрацій і струмів основних і неосновних носіїв від координати, вольт-амперних характеристик пристрою. На рис. 1 для прикладу представлено декілька типових зображень графічного інтерфейсу цього пакету.

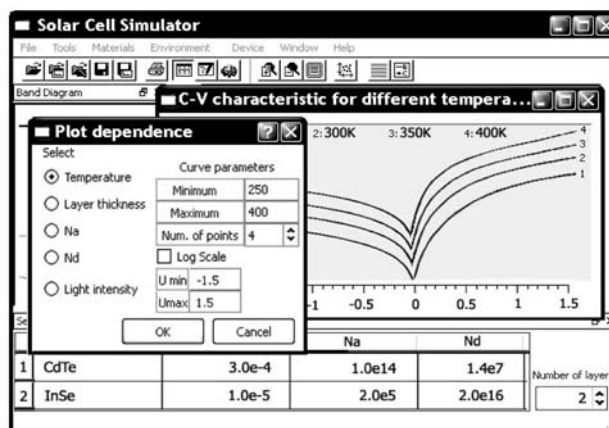


Рис. 1. Графічний інтерфейс програми: моделювання гетеропереходу p-CdTe/n-InSe.

Результати розрахунків та їх обговорення

Якість та точність роботи розробленого пакету програм "Solar Cell Simulator" було перевірено на прикладі відомих структур сонячних елементів на основі кремнію (рис. 2) та арсеніду галію (рис. 3). У результаті було отримано добру кореляцію з літературними даними інших авто-

рів щодо ефективності цих сонячних елементів [11], а також запропоновано шляхи оптимізації величин технологічних керуючих параметрів (типу та концентрації легуючої домішки, рівня її залягання, площі перерізу пасток, ширини області просторового заряду, молярного складу твердого розчину напівпровідника тощо) щодо покращення значень коефіцієнта корисної дії ККД (η) досліджуваних структур.

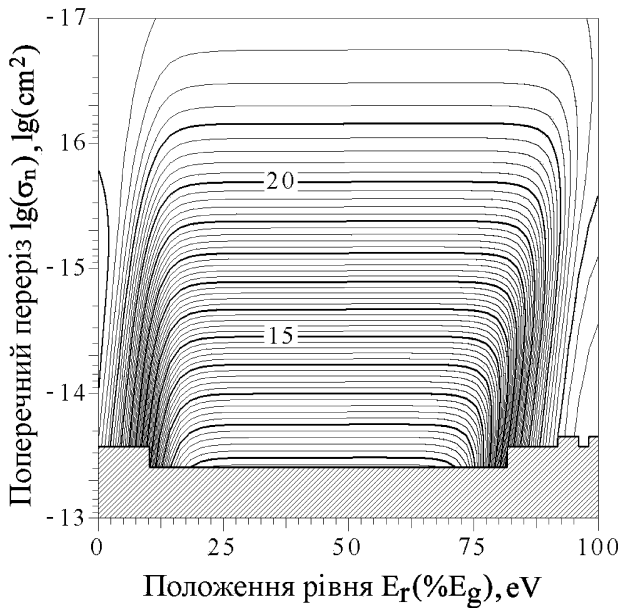


Рис. 2. Залежність ККД сонячного елемента η з кремнієвим р-п переходом від положення рівня домішки E_r та її площі поперечного перерізу захоплення σ_n .

Зокрема, на рис. 2 представлено залежність ККД сонячного елемента з кремнієвим р-п переходом від положення рівня залягання E_r та поперечного перерізу σ_n центрів захоплення (пасток). Як видно з рисунку, для випадку, коли енергетичний рівень домішки знаходиться у межах $(0.20 \div 0.65)$ ширини забороненої зони E_g , величина ККД фотоперетворювача є майже постійною і практично лінійно залежить від логарифма σ_n (зменшуючись від 21.7% до 11% при збільшенні σ_n від $2 \cdot 10^{-16}$ до $6 \cdot 10^{-13} \text{ см}^{-2}$). Тому для забезпечення в досліджуваних структурах ККД $\approx 20\%$ необхідно при вирощуванні монокристалічного кремнію легувати його домішками, які у забороненій зоні напівпровідника створюють центри рекомбінації з поперечним перерізом $\sigma_n < 6 \cdot 10^{-15} \text{ см}^{-2}$ і характеризуються енергією залягання $\approx (0.20 \div 0.25) E_g$. Для такої конфігурації розрахунки передбачають лише незначні втрати фотоносіїв за рахунок рекомбінації Холл-Шоклі-Ріда.

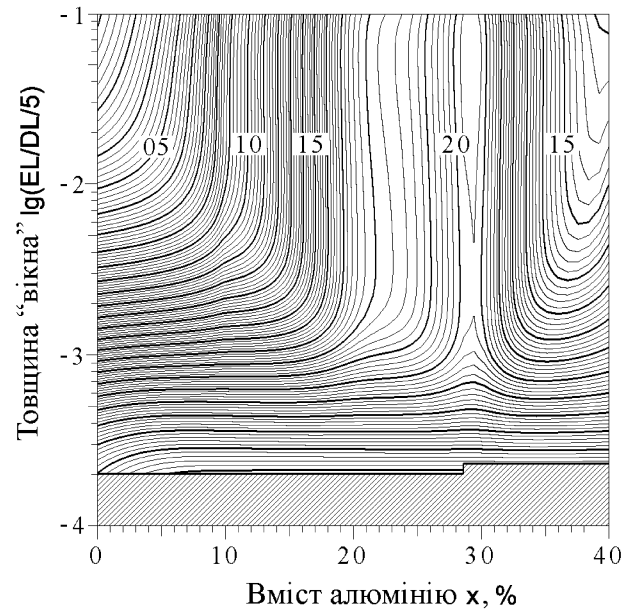


Рис. 3. Приклад двомірної залежності коефіцієнту корисної дії сонячного елемента $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ від молярного складу x та безрозмірної товщини "вікна" D_w/DL .

Залежність ефективності фотоперетворення гетероструктури $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ від безрозмірної товщини "вікна" (D_w/DL , де D_w — товщина $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (вікна), а DL — загальна товщина гетероструктури) та молярного складу (x) подано на рис.3. Видно, що при $x < 0.20$ і $x > 0.31$ значення η швидко змінюється з величиною D_w/DL . При товщинах $0.1 > D_w/DL > 0.01$ та молярному складі $x = 0.29$ на залежності $\eta = f(x, D_w/DL)$ реалізується максимальне значення $\eta = 20.2\%$, яке можна рахувати оптимальним для сонячного елемента з параметрами гетероструктури $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. Визначені діапазони зміни параметрів D_w/DL та x , які забезпечують значення $\eta \geq 20\%$, можуть бути використані при оптимізації технологічних процесів виготовлення даної структури.

Слід зауважити, що приведені вище величини максимальної ефективності фотоперетворення (21,7% для Si і 20,2% для GaAs) отримано для випадку структур без текстурування поверхні сонячного елемента або застосування просвітлюючих технологій. Використання останніх приводить до суттєвого підвищення величини η [11].

Як приклад можливостей пакету програм "Solar Cell Simulator" щодо моделювання властивостей маловивчених випрямляючих структур на рис. 4 представлено отримані за його допомогою результати розрахунків для темпе-

ратур 251К і 330К оберненої гілки ВАХ гетеро-структури p-CdTe/n-InSe при врахуванні у ви-разі для оберненого струму рекомбінаційної та тунельної складових [9]. Важливість досліджен-ня цієї структури обумовлена перспективою її використання, як і n-InSe/p-GaSe фотодіодів [12], здатних ефективно та стабільно працюва-ти в умовах підвищеної радіації при кімнатній і вищих температурах. Видно, що в залежно-сті від робочої температури існують як інтерва-ли прикладеної напруги U , для яких у процесі перенесення струму через структуру превалює один із зазначених механізмів, так і інтервали U , для яких вклади у загальний струм від обох механізмів є співмірними. Приведені на рис. 4 дані слід враховувати при удосконаленні кон-струкції гетероструктури p-CdTe/n-InSe, зокре-ма, при виборі товщини бар'єру.

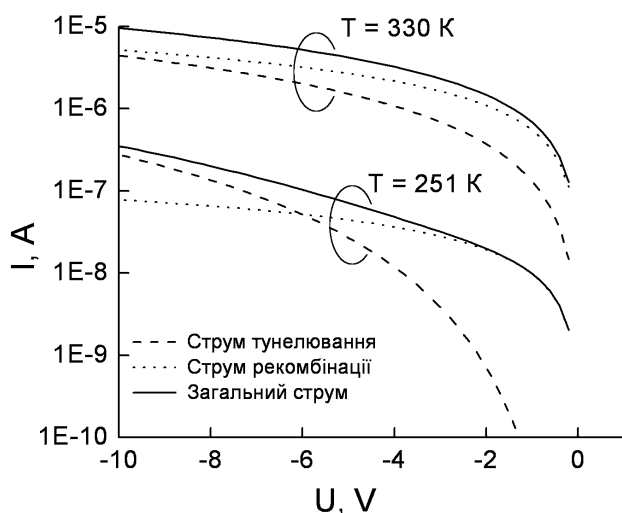


Рис.4. Вклад тунельного та рекомбінаційного струму в обернений струм гетеропереходу p-CdTe/n-InSe при $T=330\text{K}$ і $T=251\text{K}$.

Висновки

Розроблений програмний продукт є багатофункціональним інструментом для моделювання процесів перенесення струму у напівпровідникових фотоперетворюючих структурах і може слугувати, наприклад, для дослідження складних (у тім числі, багат шарових) сонячних елементів на основі перспективних (об'ємних і тонкоплівкових) матеріалів, а також для моделювання властивостей цих структур з метою розробки рекомендацій щодо оптимізації як технологічних процесів вирощування базових

матеріалів, так і конструкції самих фотоперетворювачів. Широкий спектр функціональних можливостей, спроможність легко приймати дані від інших програм і передавати результати розрахунків у вигляді файлів різного формату іншим програмам для подальшого аналізу або візуалізації роблять його потенційно цікавим як для наукових досліджень так і для навчального процесу, де він може бути використаний, зокрема, при проведенні лабораторних занять зі студентами з професійно-орієнтованих дисциплін інженерних напрямів підготовки.

Список літератури

1. Castaner L., Santiago S. Modelling Photovoltaic Systems Using PSpice. — Wiltshire, GB: WILEY, 2002. — 376 p.
2. Wu X. et al. 16,5%-efficient CdS/CdTe polycrystalline thin-film solar cell. — Conf. Proceedings, 17th European Photovoltaic Solar Energy Conference. — Munich, 2001. P.995-1000.
3. Косяченко Л.А. Проблемы эффективности фотоэлектрического преобразования в тонкопленочных солнечных элементах CdS/CdTe // ФТП. — 2006. — т.40. — вып.6. С.730-746.
4. Contreras M.A. et al. Progress towards 20% efficiency in Cu(In,Ga)Se polycrystalline thin-film solar cell // Progr. in photovoltaics: Res. Appl, 7(1999) P. 311-316.
5. Ковалюк З.Д., Сидор О.Н., Нетяга В.В.. Механизмы токопереноса и фоточувствительность диодов Шоттки Zn/CuInSe₂ // ПЖТФ. — 2006. — т.32. — вып.10. С.88-94.
6. Rockett A., Birkmire R. W. CuInSe₂ for photovoltaic applications // Journal of Applied Physics. — 1991. — vol.70. — Issue 7. P. R81-R97.
7. Meneses-Rodriguez D., Horley P.P., Gonzalez-Hernandez J., Vorobiev Y.V., Gorley P.N. Photovoltaic solar cells performance at elevated temperatures // Solar Energy, 78(2005).
8. Smestad G. P. Optoelectronics of solar cells. — Washington, USA: SPIE PRESS, 2002. — 99p.
9. Сердюк В.В. Физика солнечных элементов. — Одесса: Логос, 1994. — 333С.
10. Cardona P. Y. Yu, M. . Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties. Second edition. — New York: Springer, 2005. — 623 p.
11. Green M.A. et al. Solar Cells Efficiency Tables (Version 30) // Progr. in photovoltaics: Res. Appl, 15(2007) P. 425-430.
12. Kovalyuk Z.D., Makhniy V.P., Yanchuk O.I. Mechanisms of forward current transport in p-GaSe-n-InSe heterojunctions // Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics. — 2003. — V.6. — N.4. — P. 458-460.