АННОТАЦИЯ

6D072300 – «Техникалық физика» мамандығы бойынша философия докторы (PhD) дәрежесін алу үшін диссертациясы»
(қолдану салалары бойынша)

Чучвага Николай Алексеевич

Кремний негізіндегі гетероөткізгіш күн элементтерін зерттеу және оңтайландыру

Диссертациялық жұмыста компьютерлік үлгілеудің гетероөткізгіш күн элементтерінің құрылымын қалыптастырудың технологиялық параметрлерін оңтайландыру нәтижелері, сондай-ақ HIT фотоэлементтерінің физикалық қасиеттері мен құрылымын тәжірибелік зерттеу нәтижелері берілген.

Зерттеудің өзектілігі. p-n – гетероөткенді диффузияның көмегімен алынатын, нарықтағы ең кең таралған кристалды күн элементтері сияқты адамдардың ақыл-ойында қалыптасқан, пайдалы әрекеттің салыстырмалы жоғары коэффициенті және технологиялық жетілу сияқты қасиеттерге ие. Сонымен қатар, мұндай ФЭП кемшілігі 1000°C дейін жоғары температураны пайдалану қажеттілігімен, сондай-ақ жоғары ПӘК алу үшін кристалды кремнийдің жоғары тазалығына талап етумен байланысты дайындаудың салыстырмалы жоғары құны болып табылады. Аморфты кремний күн энергетикасына арналған арзан балама материалдардың бірі болып табылады, бірақ зертханалық күн элементтерінің ең жоғары тиімділігі оған жетеді 13,4%. Аморфты және кристалды кремний түрлі оптоэлектронды қасиеттерге ие, кең көлемді аморфты кремний (Eg = 1,9 эВ салыстырғанда с Eg = 1,12 эВ кристалды кремний) спектрдің көрінетін аймағында оптикалық жарықты жұтудың жоғары коэффициенті бар. «HIT» (heterojunction with intrinsic thin layer) ретінде белгілі гетероөткізгіш күн элементін құру үшін екі материалдардың артықшылықтарын біріктіру кремнийдің аз мөлшерін және 200-250°C аспайтын дайындау процесінің төмен температураларын пайдалану кезінде күн энергиясын жоғары тиімділікке қол жеткізу мүмкіндігін көрсетеді. Өнеркәсіптік масштабта кремний гетероөңдеу технологиясы 18%-ден астам тиімділікпен күн элементтерін алуға мүмкіндік береді.

Алғаш рет гетероөткізгіш кремний күн элементтерінің технологиясы 1990 жылдардың басында Sanyo компаниясымен патенттелген. Танака пен әріптестермен сипатталған бастапқы ұяшықтарда гетеропереход тегіс кристалды кремний (c-Si) пластина n-типті негізінде қалыптасты, оның бетіне аморфты гидрогенизацияланған кремнийдің жұқа қабаты тұнған (a-Si:H) p-өткізгіштік түрі. Күн элементінің осындай құрылымы үшін пайдалы әрекет коэффициентінің максималды мәні 12,3% - ға жетті, бұл ретте максималды тиімділік аморф қабатының қалыңдығы үшін шамамен 100 Å (10 нм). Сондай-ақ, n - және p-типті кремний қабаттары арасындағы меншікті өткізгіштіктің a-Si:H жұқа пленкасын енгізу кристалдық және аморфты

кремнийдің арасындағы бөлу шекарасындағы үстіңгі ақаулардың тығыздығын азайтуға мүмкіндік береді, бұл бос жүріс кернеуінің, қысқа тұйықталу тогының және күн элементін толтыру коэффициентінің жоғарылауына бір мезгілде әсер етеді. Бұл жағдайда КПД 14,8% - ға дейін өсті, бұл ретте өз өткізгіштігінің аморфты кремний қабатының оңтайлы қалыңдығы 60-70-ке тең болды Å. Sanyo компаниясының тағы бір жаңалығы жарықты тиімді сіңіру үшін күн элементінің текстурацияланған бетін құру, сондай-ақ аз бұрыштар астындағы пластинаға түсетін жарықты сіңіру мүмкіндіктері болды. Текстуралауды жүргізу шарттары көрсетілмеген, алайда a-Si шөгуінің алдында: H кристалды пластина сутекте плазмалық өңдеуге ұшыраған. Бұдан басқа, күн элементінің артқы жағында электр өрісін құру үшін кремний пластинаның кері жағына a-Si:H n қабаты тұнды-өткізгіштік түрі. Нәтижесінде, күн элементінің тиімділігі 1 $см^2$ көлеміндегі үлгі үшін 18,1% - ға жетті.

Соңғы жылдары HIT фотоэлементтерін зерттеуге арналған жұмыстар көп емес. Көп жағдайда HIT технологиясы саласындағы көшбасшылар Зертханалық жағдайларда жоғары ПӘК фотоэлементтерге қол жеткізу үшін неғұрлым таза және қымбат Материалдардың пайдаланылуы туралы хабарлайды. HIT фотоэлементтерінің дизайнын модификациялауға арналған жұмыстар негізінен компьютерлік модельдеуді пайдалануға негізделген, бірақ көбінесе жалпы HIT фотоэлементін қарастырмайды, тек оның кейбір бөліктері ғана. Айта кету керек, өнеркәсіптік жағдайларда HIT құрылымының фотоэлементтерінің сапасын арттыру мәселесі бар, және негізінен бұл мәселе технологиялық процестер мен жабдықтардың жұмыс режимдерін оңтайландыру жағынан қарастырылады, бірақ фотоэлемент құрылымының дизайнын жақсарту жағынан емес.

Өнеркәсіптік жағдайларда фотоэлементтердің сапасын жақсарту проблемасын шешу компьютерлік модельдеу әдістерін, теориялық және сандық есептеулерді, сондай-ақ өнеркәсіптік немесе жартылай өнеркәсіптік жабдықтарды пайдалана отырып эксперименттік зерттеулерді қолдана отырып, HIT құрылымының технологиялық параметрлерін оңтайландыруға кешенді тәсіл болып табылады.

Жұмыстың мақсаты 20% және одан да көп пайдалы әсер коэффициенттеріне қол жеткізу үшін гетерөткізгіш күн элементтерінің құрылымын қалыптастырудың технологиялық параметрлерін оңтайландыру болып табылады.

Қойылған мақсатқа жету үшін келесі **міндеттер** шешілді:

1) гетероөткізгіш кремний күн элементтерін алудың стандартты технологиясын зерделеу және оны жақсарту әдісін пысықтау.

2) AFORS-HET бағдарламалық пакетін пайдалана отырып, компьютерлік модельдеу көмегімен гетерөткізгіш кремний күн элементтерінің тиімділігіне әсер ететін параметрлерді анықтау.

3) жартылай өткізгіш электрониканың және фотовольтаиканың физикалық заңдылықтарына негізделген теориялық есептермен HIT

құрылымының фотоэлементінің компьютерлік моделін оңтайландыруды жүргізу.

4) НІТ құрылымының фотоэлементінің технологиялық параметрлерін оңтайландыру үшін, атап айтқанда, қалыңдығы: ФЭП-те Эмитент қабаты, фэп-те өзіндік өткізгіштігінің кіріктірілген алдыңғы қабаты, ФЭП-те өзіндік өткізгіштігінің кіріктірілген артқы қабаты, ФЭП-те BSF қабаты.

5) тиімділігі 20% - дан асатын оңтайландырылған эксперименттік hit прототиптерін дайындау және олардың сипаттамаларын оптикалық және ВАХ сипаттамаларын өлшеу әдістерімен зерттеу.

Зерттеу объектісі. n-өткізгіштік типті монокристалды кремнийден жасалған төсеніш негізіндегі жіңішке аморфты қабаты бар гетероөткізгіш фотоэлементтер.

Зерттеу пәні. НІТ гетерөткізгіш күн элементтері құрылымының технологиялық параметрлері.

Зерттеудің ғылыми-практикалық маңыздылығы.

- Жұмыста ұсынылған алгоритмді пайдалана отырып, компьютерлік модельдеу арқылы күн элементтері құрылымының технологиялық параметрлерін оңтайландыру мүмкіндігі көрсетілген.

- Фотоэлементтердің өнеркәсіптік өндірісінде қолдануға болатын НІТ ФЭП сипаттамаларының оңтайлы мәндері анықталды.

Жұмыстың ғылыми жаңалығы.

1) Алғаш рет тәжірибелік зерттеулерді, теориялық есептерді және компьютерлік үлгілеуді қамтитын кешенді тәсілді пайдалана отырып, зерттелетін НІТ фотоэлементінің Шығыс сипаттамаларына әсер ететін функционалды қабаттарды легирлеу деңгейлері мен оңтайлы геометриялық параметрлері табылды.

2) n типті коммерциялық монокристалды пластина негізінде өнеркәсіптік жағдайларда дайындалған НІТ құрылымының фотоэлементі үшін өткізгіштік Р-типті эмиттерлік аморфты қабаттың оңтайлы қалыңдығы анықталды.

3) n типті коммерциялық монокристалды пластина негізінде өнеркәсіптік жағдайларда дайындалған НІТ құрылымының фотоэлементі үшін бірінші рет өзінің өткізгіштігінің фронтальды және тылды кірістірілген аморфты қабаттары үшін қалыңдықтың оңтайлы мәндері анықталды.

4) Өнеркәсіптік жағдайларда өндірілген НІТ гетерөткізгіш фотоэлементтерінде құрылымның оңтайлы технологиялық параметрлерін пайдалана отырып, 20% - дан астам тиімділікке қол жеткізілді.

Қорғауға шығарылатын ғылыми ережелер:

1) Әзірленген әдіс негізінде оңтайландырылған p-a-Si құрылымы:H / i-a-Si:H / N-c-Si / i-a-Si:H/ N+ a-Si:H мынадай оңтайлы технологиялық параметрлері бар: қалыңдығы p-a-Si:H қабат, алдыңғы i-a-Si:H қабат, N-c-SI қабат және сыртқы i – a-Si:H қабат 7 нм, 5 7 нм, 200 мкм және 7 11 nm, тиісінше.

2) n өткізгіштік типті монокристалды пластина негізіндегі НІТ фотоэлементтерінің тиімділігі эмиттерлік p қабаттың қалыңдығына

байланысты, оның эксперименталдық оңтайлы мәні 10 нм құрайды, ал қалыңдықтың ең үлкен ұлғаюы қысқа тұйықталу тогының құлауымен және КПД азаюымен сүйемелденеді. Р қабатының қалыңдығын азайту 8 нм қабатының р қалыңдығына дейін болатын фотоэлементтің қысқа тұйықталу тогын арттыруға әкеледі.

3) n типті монокристалды пластина негізіндегі НІТ фотоэлементтерінің тиімділігі I типті аморфты кремнийдің алдыңғы және артқы қабаттарының қалыңдығына байланысты, олардың тәжірибелік оңтайлы мәндері тиісінше 7 және 9 нм құрайды, ал олардың одан әрі ұлғаюы бос жүріс кернеуінің және КПД мәнінің азаюына әкеледі.

4) Компьютерлік модельдеу деректері, теориялық есептер және эксперименттік нәтижелер негізінде оңтайландырылған НІТ фотоэлементтерінің тәжірибелік үлгілерінің тиімділік мәні 20 пайыздан астамды құрайды.

Жұмыстың жалпы сипаттамасы.

Соңғы уақытта фотовольтаикадағы елеулі жетістіктерге материалдардың қасиеттерін күшті іргелі түсіну және үлгілеу әдістерін пайдалана отырып, олардың құрылымын жұқа күйге келтіру мүмкіндігі ықпал етті. Ең кең қолданылатын және оңай қол жетімді пакеттердің арасында - AFORS-HET және PC1D. Осы құралдарды пайдалана отырып, ертерек зерттеулер электрод жұмысының функциясының құрылғысының сипаттамаларына және олардың легирлеу тығыздығына, гетерограницаға р + кері қабатты енгізуге, сондай-ақ Ферми деңгейінің легирленген, a-Si: H және a-Si: H / c-Si шекарасындағы ығысуларға әсер етуге шоғырланды.

Олардың тиімділігіне әсер ететін негізгі факторларды анықтау үшін «PC1D» және «AFORS-HET» бағдарламалық пакеттерінің көмегімен күн элементтерін модельдеу жүргізілді. Атап айтқанда, кристалды кремний негізіндегі стандартты күн фотоэлементтері, сондай - ақ аморфты кремний күн элементтері және "аморфты кремний-кристалды кремний"гетеропереход негізіндегі элементтер үлгілендірілді. Диссертацияда қабаттың қалыңдығындағы жұқа өлшеу диапазондарын іздеу және көп қабатты күн элементтеріндегі легірлеу қарапайым жүйелердің көмегімен жүзеге асырылатын тәсіл көрсетілді.

Күн элементтерінің оңайлатылған құрылымдарын пайдалана отырып, модельдеу нәтижелеріне негізделе отырып, әрбір дайындау параметрлерінің НІТ неғұрлым күрделі күн элементінің тиімділігіне әсер ету деңгейін бағалауға және бағалауға болады.

Жоғары тиімді гетеröткізгіш кремний күн элементінің үлгі жүйесін пайдалана отырып, AFORS-HET модельдеу құралын пайдалана отырып, күн элементтерін оңтайландырудың оңтайлы алгоритмі табылды. Бастапқыда құрылғының әр параметрлерінің өзгеруінің салыстырмалы әсерін, атап айтқанда, әрбір қабат үшін легірлеу қалыңдығы мен деңгейлерін сәйкестендірді. Бұл НІТ құрылымының белгілі бір элементтері бар құрылғылардың қарапайым құрылымдарын қарастыру арқылы жасалды. Содан кейін бұл параметрлерді құрылғының қуатын түрлендіру тиімділігіне

әсер ету арқылы бағалады. Нәтижесінде стандартты hit күн элементін оңтайландыру қадамдарының үш түрлі реттілігін пайдалана отырып оңтайландырды: өсу тәртібі, кему тәртібі және кездейсоқ тәртіп. Оңтайландырудың әр түрлі кезектілігі құрылғының әр түрлі соңғы параметрлеріне және олардың пайдалану сипаттамаларына әкеледі, сонымен қатар оңтайландыру қадамдарының кему тәртібі жоғарылау және кездейсоқ тәртіптерге қарағанда жоғары тиімділікті көрсетеді.

HIT ұяшығын оңтайландырудың ұсынылған тәсілі төмендеу реттілігі негізінде оңтайландырудың кері, өсу қадамдарын және кездейсоқ оңтайландыру қадамдарының тәртібін пайдалана отырып оңтайландырумен салыстырды. Оңтайландыру тәсілдерінде қолданылатын параметрлер үшін мәндердің қолданылатын диапазоны бірдей болғанымен, оңтайландыру қадамдарының кему тәртібі өсу үшін 20,78% және кездейсоқ оңтайландыру тәртібі үшін 20,49% салыстырғанда 21,02% тиімділіктің анағұрлым жоғары нәтижелілігіне әкелді. Ұсынылған тәсіл көптеген оңтайландыру параметрлері бар күн элементтерінің басқа түрлерін оңтайландыруда, мысалы, симуляциялауда да, зертханалық зерттеулерде де көп Өтпелі және каскадты күн элементтері сияқты қолдануды таба алады.

AFORS-HET бағдарламасында HIT құрылымының фотоэлементі кодталған, содан кейін авторлық әдістеме бойынша оңтайландырылған. Сонымен қатар оңтайландыру әдісіне Андерсон моделі бойынша ФЭП қабаттары арасындағы гетерөткізудің қосымша есептері енгізілді. Бұдан басқа, кремний монокристалды пластиналардың бетіндегі ақауларды пассивациялау бойынша тәжірибелік нәтижелер ескерілді. Компьютерлік оңтайландыру және қосымша есептеулер, сондай-ақ кремнийді пассивациялау бойынша эксперименттік деректерді есепке алу деректерінің жиынтығында фотоэлементтің компьютерлік оңтайландырылған моделі көрсетілді. HIT құрылымы фотоэлементінің функционалдық қабаттарының оңтайлы параметрлері:

- p аморф қабатының қалыңдығы өткізгіштің түрі 7 нм, ал қоспалармен легирлеу деңгейі шамамен 10^{20} $см^{-3}$ мәні бар;

- кристалды кремний төсенішінің қалыңдығы n–өткізгіштік типі 200 мкм құрайды, қоспалармен легирлеу дәрежесі ең кристалды пластина параметрлеріне байланысты, зерттелетін үлгілерде шамамен 10^{17} $см^{-3}$ мәні;

- N өткізгіштік типті аморф қабатының қалыңдығы зарядтың негізгі емес тасымалдаушылары үшін қажетті энергетикалық кедергіні қамтамасыз ететін кез келген мәнді қабылдай алады, қоспалармен легирлеудің оңтайлы деңгейі шамамен 10^{20} $см^{-3}$ болуы тиіс.

- Өз өткізгіштігінің аморфты кремнийдің кірістірілген қабатының қалыңдығының ұлғаюымен үстіңгі ақаулардың саны азаяды, бірақ бұл ретте құрылым кедергісі артады. Өз өткізгіштігінің алдыңғы қабаты үшін оңтайлы қалыңдығы 5–7 нм құрайды. Өз өткізгіштігінің сыртқы қабаты үшін оңтайлы қалыңдығы 7–11 нм ауқымында.

Параллельді кезең нақты үлгілердегі құрылымдарды зерттеу жүргізілді. Эксперимент жүргізу үшін әр түрлі параметрлермен келесі түрлі параметрлер бойынша салыстырылған НІТ құрылымының фотоэлементтері жасалды: өзінің өткізгіштігінің аморфты кремнийінің қалыңдықтары, артқы жағынан да, алдыңғы жағынан да; ФЭП алдыңғы жағынан өткізгіштік р-типті қабаттардың қалыңдықтары; n – өткізгіштік үлгісіндегі аморфты кремнийдің артқы BSF-қабаттарының қалыңдықтары.

Қатты фотоэлементтердегі дизайнның маңызды элементтерінің бірі p-n немесе p-i-n күн сәулесінің әсерінен электр зарядының генерациясы болатын ауысу болып табылады. Бұл жұмыста N-қабат ретінде кристалды кремнийдің коммерциялық пластинасы пайдаланылды, ал і - және р - қабаттар газ фазасынан плазмохимиялық тұндыру әдісімен тозаңданды (PECVD). Әдіс газразрядты плазма көмегімен реакциялық газдардың радикалдарға ыдырауынан тұрады. Одан әрі радикалдар төсектің бетіне тұнады. Тұндыру процесінде төсеніш 200^0С температура ұстап тұратын қыздырылған ұстағышта болады. Реакциялық және ілеспе газдармен толтырылған камерадағы электродтарға жоғары жиілікті кернеу беріледі. Сыйымдылықты разрядты от алдырғаннан кейін газ қоспасының электрондарға, иондар мен радикалдарға ыдырауы орын алады. Бұдан әрі иондар мен радикалдар аморфты пленканың өсуі болатын төсекке отырғызылады.

Үлгілерді дайындағаннан кейін электр қасиеттерін өлшеу жүргізілді. Вольт-амперлік сипаттамаларды (ВАХ) және кванттық тиімділікті өлшеу "IV-16 L"қондырғысында жүргізіледі.

Әртүрлі параметрлермен НІТ құрылымының гетероөткізгіш күн элементтері зерттелді. Бос жүріс кернеуі, қысқа тұйықталу тогы, форм-фактор және тиімділік сияқты дайындалған фотоэлементтердің сипаттамаларына талдау жүргізілді.

р-қабаттың қалыңдығын азайту әсері қысқа тұйықталу тогын арттыру болып табылатыны анықталды. Токтың ұлғаюы р-қабатының 8 нм қалыңдығына дейін жалғасады, содан кейін азаяды. Қысқа тұйықталу тогының ұлғаюынан басқа, р-қабаттың қалыңдығының азаюы бос жүріс кернеуінің және форм-фактордың азаюына әкеледі. Бос жүрістің кернеу мәнінің азаюы құрылымдағы заряд тасығыштардың рекомбинациясымен байланысты. Бұл барлық факторлардың әсері ФЭП тиімділігінің максимумы р-қабатының қалыңдығы 10 нм болғанда байқалады.

Эксперимент барысында р-қабаттың оңтайлы қалыңдығы әртүрлі пластиналар үшін өзгеше болуы мүмкін.

Фронтальды i-a-Si қалыңдығының оңтайлы мәні көрсетілген: Н қабат 7 нм, ал сыртқы қабат үшін I-a-Si: Н оңтайлы мән 9 нм болып табылады. Аморфты пленканың бос жүріс кернеуіне әсер етуімен байланысты, бұл құрылымдағы заряд тасығыштардың рекомбинация ықтималдығының өзгеруіне байланысты болуы мүмкін.

ФТИ аумағында А.Ф. Иоффе РАН шетелдік тағылымдама кезінде НІТ құрылымының ФЭП өндіру технологиясы игеріліп, жоғарыда сипатталған

құрылымның фотоэлементтері дайындалды. Ең жақсы оңтайландырылған фотоэлементтер шамамен 21% тиімділікке ие болды.

Зерттеудің әдіснамалық базасы көп қабатты гетероқұрылымды кремнийлі фотоэлементтер алу әдістері және өндірілген элементтердің электрлік және оптикалық сипаттамаларын өлшеу әдістері болып табылады. Сонымен қатар, зерттеу әдістерінің бірі компьютерлік моделдеу және компьютерлік моделді есептеудің сандық әдістері, гетерөңдеу есебінің аналитикалық әдістері болып табылады.

Ғылыми жаңалыққа келесі нәтижелер ие:

1) Алғаш рет тәжірибелік зерттеулерді, теориялық есептерді және компьютерлік үлгілеуді қамтитын кешенді тәсілді пайдалана отырып, зерттелетін hit фотоэлементінің Шығыс сипаттамаларына функционалды қабаттарды легирлеудің оңтайлы геометриялық параметрлері мен деңгейлері табылды.

2) n-типті коммерциялық монокристалды пластина негізінде өнеркәсіптік жағдайларда дайындалған HIT құрылымының фотоэлементі үшін өткізгіштік n-типті эмиттерлік аморфты қабаттың оңтайлы қалыңдығы анықталды.

3) n-типті коммерциялық монокристалды пластина негізінде өнеркәсіптік жағдайларда дайындалған HIT құрылымының фотоэлементі үшін өзінің өткізгіштігінің фронтальды және тылды кірістірілген аморфты қабаттары үшін қалыңдықтың оңтайлы мәндері анықталған.

4) Өнеркәсіптік жағдайларда өндірілген HIT гетерөткізгіш фотоэлементтерінде құрылымның оңтайлы технологиялық параметрлерін пайдалана отырып, 20% - дан астам тиімділікке қол жеткізілді.

Жүргізілген зерттеулерді сынақтан өткізу. Диссертациялық жұмыстың негізгі нәтижелері келесі конференциялар мен семинарларда баяндалды және талқыланды:

1. 2016ж. «Science and Applications of Thin Films, Conference & Exhibition (SATF 2016) », Измир, Түркия.
2. 2016г. «Аморфные и микрокристаллические полупроводники», Санкт-Петербург, Ресей.
3. 2017ж. «Новые материалы и технологии: порошковая металлургия, композиционные материалы, защитные покрытия, аддитивные технологии и робототехника», Алматы, Қазақстан.
4. 2017ж. «Физико-химические проблемы возобновляемой энергетики», Санкт-Петербург, Ресей.
5. 2017ж. «19 Всероссийская молодёжная конференция по физике полупроводников и наноструктур, опто- и наноэлектронике», Санкт-Петербург, Ресей.
6. 2018ж. Халықаралық ғылыми-практикалық конференция студенттер мен жас ғалымдардың «ФАРАБИ ӘЛЕМІ», Алматы, Қазақстан.
7. 2018ж. Халықаралық ғылыми-практикалық конференция «Глобальная наука и инновации 2018», Астана, Қазақстан.

Диссертацияның көлемі мен құрылымы. Диссертациялық жұмыс кіріспеден, төрт бөлімнен, қорытындыдан және 119 атаудан тұратын әдебиеттер тізімінен тұрады. Жұмыс машинкамен басылған мәтіннің 110 беттерінде, оның ішінде 54 сурет пен 18 кесте.