

Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника

Фізико-технічний факультет

Кафедра фізики і хімії твердого тіла

## **ДИПЛОМНА РОБОТА**

на здобуття другого (магістерського) рівня вищої освіти

на тему «Симуляція фотоелектричних процесів у програмному середовищі

SCAPS: квантова ефективність та фактор заповнення»

Виконав: студент II курсу, групи ФА(м)-21  
спеціальності 104 «Фізика та астрономія»

Михайло ЧОБАНЮК

Керівник: кандидат фізико-математичних  
наук, професор Любомир НИКИРУЙ

Рецензент: доктор фізико-математичних  
наук, професор кафедри матеріалознавства  
і новітніх технологій

Богдан РАЧІЙ

Івано – Франківськ– 2023 р.

## АНОТАЦІЯ

**Актуальність роботи** – з року в рік зростають потреби людства у все більшій кількості енергії. Але в останні роки ці виклики набули нового характеру: для життя людству не лише потрібна енергія, але вона повинна бути «зеленою» (екологічною) та економічно дешевою. Це спричинює розвиток альтернативних джерел енергії, серед яких найбільш цікавою є фотоелектрична енергія через наявність безкоштовного джерела такої енергії – Сонця. І якщо поширені на сьогодні кремнієві фотоелектричні панелі уже практично досягли свого піку промислової ефективності, то нові види, такі як тонкоплівкові фотоелектричні перетворювачі мають всі шанси стати дешевшими та мати вищий коефіцієнт корисної дії. Тому дослідники-фізики та матеріалознавці активно вивчають процеси, які відбуваються у напівпровідниках під дією світла, розробляють нові технологічні рішення отримати матеріали із визначеною системою дефектів та прогнозованими властивостями.

Відповідно, матеріали на основі сполук II-VI, гетероструктури на їх основі, а також потрійна та складніші сполуки активно досліджуються. Сучасний рівень наукових досліджень потребує дорогого діагностичного обладнання та високочистих матеріалів для отримання переконливих результатів. З іншої сторони, експериментальні дослідження часто є затратними у часі. Тому чільне місце займають процеси комп'ютерної симуляції та моделювання фізичних процесів. І одним із найбільш відомих пакетів комп'ютерної симуляції саме фотоелектричних матеріалів та систем є середовище SCAPS. Тому окрім наукової сторони, важливим є і навчальний компонент, щоб готувати майбутніх фахівців – розробників тонкоплівкових систем нового покоління.

**Наукове завдання** – дослідити динаміку зміни базових характеристик фотоелектричних шарів матеріалів CdTe, CdS, ZnO, CuO – квантової

ефективності, фактору заповнення, коефіцієнти поглинання і пропускання, та змодельовати фотоелектричну комірку на базі цих матеріалів.

**Метою роботи** є вивчити особливості середовища комп'ютерної симуляції SCAPS, застосувати можливості даного пакету для відомих на сьогодні фотоелектричних матеріалів та гетероструктур та запропонувати варіанти лабораторних робіт у цьому середовищі, які можуть бути корисними студентам фізичних та технічних спеціальностей.

**Об'єкт** дослідження – особливості оптичних та електрофізичних процесів у шарах напівпровідників CdTe, CdS, ZnO, CuO та їх вплив на ефективність фотоелектричної генерації енергії.

**Предмет** дослідження – система комп'ютерної симуляції фотоелектричних процесів SCAPS для напівпровідників II-VI.

Для досягнення зазначеної мети у роботі поставлені наступні **завдання**:

- Виконати огляд сучасних фотоелектричних матеріалів та систем;
- Розглянути існуючі системи моделювання фотоелектричних матеріалів та комірок;
- Дослідити можливості середовища комп'ютерної симуляції SCAPS;
- Розглянути базові принципи роботи та функціонал середовища комп'ютерної симуляції SCAPS;
- Визначити базові характеристики фотоелектричних систем у середовищі комп'ютерної симуляції SCAPS для двох найбільш поширених типів фотоелектричних комірок: квантова ефективність та потужність, а також визначити шляхи оптимізації цих параметрів.

**Стислий опис результатів дослідження:** виконано порівняння середовища комп'ютерної симуляції SCAPS із іншими програмними пакетами.

У середовищі комп'ютерної симуляції SCAPS розроблено дві лабораторні роботи: «Оптимізація ефективності фотоелектричної комірки за допомогою функціоналу середовища комп'ютерної симуляції SCAPS» та

«Симуляція квантової ефективності (QE, quantum efficiency) комірки сонячного фотоелемента у середовищі SCAPS».

Робота має обсяг: 41 аркуш, 15 рисунків, 6 таблиць, 24 посилання на джерела.

Ключові слова: АЛЬТЕРНАТИВНІ ДЖЕРЕЛА ЕНЕРГІЇ, СОНЯЧНІ ЕЛЕМЕНТИ, ГЕТЕРОСТРУКТУРА, КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ, СЕРЕДОВИЩЕ КОМП'ЮТЕРНОЇ СИМУЛЯЦІЇ SCAPS.

# **ЗМІСТ**

## **ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ**

### **ВСТУП**

#### **РОЗДІЛ 1. SCAPS: основні функції та призначення**

середовища комп'ютерної симуляції

1.1. Огляд середовищ моделювання фотоелектричних систем та матеріалів

1.1.1. AMPS 1-D

1.1.2. PC1D

1.1.3. wxAMPS

1.2. Пакет комп'ютерної симуляції SCAPS: призначення, основні функції та запуск програми

1.3. Фізичні принципи, закладені у середовищі SCAPS

#### **РОЗДІЛ 2. Оптимізація ефективності фотоелектричної**

комірки за допомогою функціоналу середовища комп'ютерної симуляції SCAPS

#### **РОЗДІЛ 3. Симуляція квантової ефективності (QE, quantum**

efficiency) комірки сонячного фотоелемента у середовищі

SCAPS

### **ВИСНОВКИ**

#### **ПЕРЕЛІК ВИКОРИСТАНИХ ЛІТЕРАТУРНИХ ДЖЕРЕЛ**

## ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

ITO – оксид індію і олова;

SCAPS – комп'ютерне середовище із власним програмним забезпеченням, призначеним моделювати одновимірні сонячні батареї;

QE – квантова ефективність;

ККД – коефіцієнт корисної дії;

TCO – прозорий провідний оксид;

BSF – поле задньої поверхні;

AMPS -- аналіз мікроелектронних і фотонних структур;

ASA -- аналіз аморфних напівпровідників;

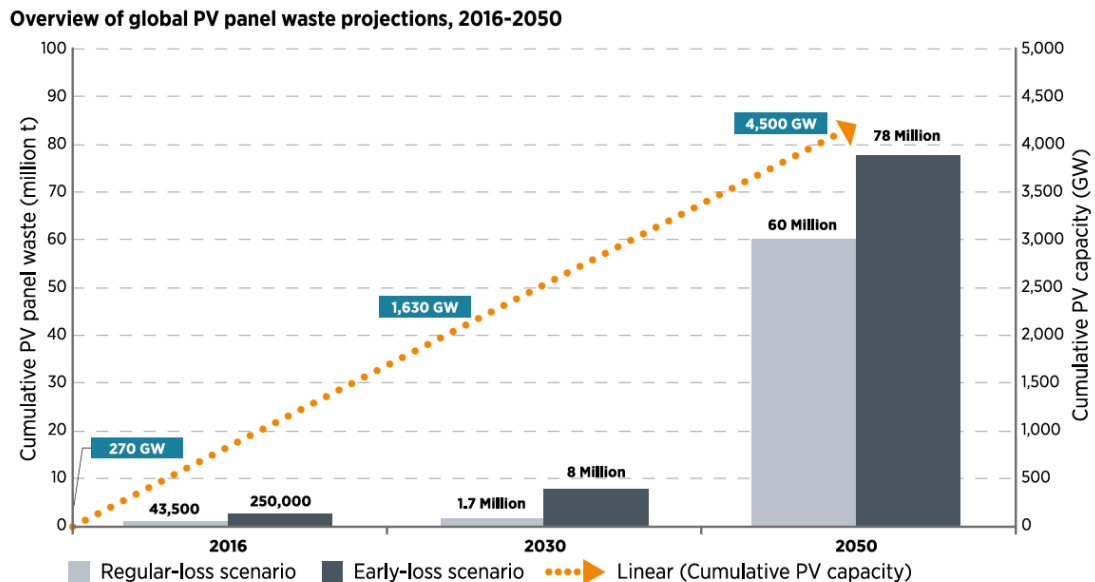
PC1D – комп'ютерна програма, розроблена для кремнієвих сонячних елементів та надалі розвинута для моделювання широкого спектру тонкоплівкових сонячних елементів;

SCAPS – середовище комп'ютерної симуляції фотоелектричних систем;

wxAMPS – удосконалена версія AMPS, як програмне забезпечення для моделювання сонячних батарей.

## ВСТУП

Згідно звіту Міжнародного агентства з відновлювальної енергетики – International Renewable Energy Agency (IRENA) за 2016 рік [1], – загальна потужність фотоелектричних джерел на той час становила 222 гігават (ГВт) на кінець 2015 року, а до 2050 року вона зросте до 4500 ГВт (рис. 1). Найвищі значення генерованої фотоелектричної енергії на той час матимуть Китай (1731 ГВт), Індія (600 ГВт), США (600 ГВт), Японія (350 ГВт) та Німеччина (110 ГВт). Це свідчить про важливість привернення уваги людства до генерування електроенергії із екологічно чистого та безкоштовного джерела – Сонця.



**Рис. 1.** Прогнозований ріст генерації фотоелектричної енергії у світі до 2050 року [1].

Відповідно, зусилля вчених спрямовані на розвиток нових матеріалів та технологій з метою здешевлення та більшого поширення фотоелектричних панелей по світу.

Серед базових фотоелектричних матеріалів, які використовуються сьогодні у фотопанелях, найбільш поширеними є об'ємні матеріали на основі полікристалічного, монокристалічного та аморфного кремнію та

тонкоплівкові матеріали типу CIGS (Copper indium gallium (di)selenide) та CdTe. Також певну популярність і перспективу мають органічні фоточутливі елементи, матеріали типу III-V, перовскіти та ін. Але ці останні матеріали ще недостатньо вивчені з точки зору комплексної характеристики «потужність – економічна привабливість матеріалу» [2]. Тому реальними конкурентами для кремнієвих панелей сьогодні є матеріали на основі CIGS та CdTe.

**Таблиця 1.**

Відсоток застосовуваних сонячних панелей різного типу [1].

Технологія		2014	2020	2023
Кремнієві технології	Монокристалічні	92 %	73,3 %	44,8 %
	Полікристалічні			
	Аморфні			
Тонкоплівкові	CIGS	2%	5,2%	6,4%
	CdTe	5%	5,2%	4,7%
Інші	Концентровані ФЕ	1%	1,2%	0,6%
	Органічні		5,8%	8,7%
	III-V, перовскіти		0,6%	9,3%

Як видно із таблиці 1, поширені на 2014 рік кремнієві фотоелектричні панелі ставатимуть все менш популярними, оскільки вони явно програють тонкоплівковим конкурентам за вартістю технології та перспективами збільшення ефективності генерування енергії. Крім того, їх виробництво є технологічно складним та екологічно небезпечним.

Із таблиці слідує можливий прогрес органічних фотопанелей через дуже дешеві технології, але низька потужність є певним стримуючим фактором для заповнення ринку саме цими фотопанелями.

Тому тонкоплівкові панелі різного типу активно вивчаються та впроваджуються провідними компаніями у світі. Відповідно і зусилля вчених світу спрямовані на підвищення ефективності тонкоплівкових



фотоелектричних панелей та систем, розроблення нових матеріалів, керування їх дефектною системою, створення багатошарових систем нового типу і складу.

У зв'язку із цим теоретичні дослідження та моделювання сьогодні є важливим інструментом дослідників. Це економить і кошти, і час, які потрібні на тривалі експериментальні дослідження.

Зважаючи на те, що тонкоплівкові сонячні батареї р-типу (CdTe, CIGS, CuO<sub>2</sub> та ін.) мають низку переваг, таких як високий коефіцієнт поглинання ( $>10^4$  см<sup>-1</sup>), пряму заборонену зону (1,4 ~ 1,5 eV), а також використання дешевих та поширених матеріалів, що є важливим для ефективного застосування у практичній фотоелектриці [3-6].

На сьогодні найкращою ефективністю характеризуються саме фотоелектричні системи на основі CdTe (~ 21,5%), CIGS (21,7%) [7]. Зважаючи на те, що теоретично розрахована максимальна ефективність тонкоплівкових фотоелементів може сягати до 32,2% (на основі розрахунку теоретичної межі Шоклі-Квейссера), потрібно проводити дослідження фотоелементів та удосконалювати їх склад, структуру, тощо.

Використання комп'ютерних симуляцій добре зарекомендувало себе, як надійний метод аналізу цілого спектру фізичних параметрів як окремого шару напівпровідникового матеріалу, так і цілої фотоелектричної комірки. З іншої сторони, такі симуляції дозволяють моделювати структуру комірки та прогнозувати її ефективність, змінюючи при цьому шари (чи додаючи нові), змінюючи їх геометрію (розміри). Таким чином, можна з великою точністю виконати ретельне моделювання, що дозволяє економити і кошти, і час, які були б потрібні для формування реального фотоелемента. Після цього, підібравши оптимальні значення, дослідники складають детальне планування експерименту для формування напівпровідникової фотоелектричної гетеросистеми із наперед заданими властивостями. Важливо зазначити, що моделювання таких параметрів здобуло визнання серед наукової спільноти, про що свідчать високого рівня наукові публікації

у найбільш відомих світових журналах [8, 9].

Самими відомими є такі програмні середовища, як SCAPS-1D, AMPS 1-D, PC1D, wxAMPS [10-12]. За допомогою цих програм вчені сьогодні не лише перевіряють свої гіпотези, але й будують нові теоретичні моделі, створюють умови для проектування кінцевих фотоелектричних систем високої ефективності.

У магістерській роботі досліджуються можливості програмного пакету SCAPS, наведено приклади застосування цієї програми для моделювання реальних фотоелектричних систем та визначення їх характеристик. Для аналізу розглянуто саме популярні фотоелектричні системи тонкоплівкових матеріалів на основі CIGS та CdTe. Основні завдання роботи спрямовані на дослідження базових характеристик, таких, як потужність, фактор заповнення, квантовий вихід (квантова ефективність). Розглянуто як варіанти моделювання фотоелектричних комірки різних шарів, так і вплив зміни деяких технологічних параметрів на кінцеву ефективність (регулювання матеріалу «віконного» шару, товщини робочого шару фотоелемента, тощо).

## **РОЗДІЛ 1.**

### **SCAPS: основні функції та призначення середовища комп'ютерної симуляції**

#### **1.1. Огляд середовищ моделювання фотоелектричних систем та матеріалів**

##### **1.1.1. AMPS 1-D**

AMPS 1-D – програмне забезпечення для аналізу мікроелектронних та фотонних структур [13]. Середовище розроблено проф. Стівеном Фонашем та колегами з Університету штату Пенсільванія (США). Метою розробки цього ПЗ було здійснення аналізу фізичних процесів, які відбуваються у фотоелементі під дією світла, зокрема, реакція фотоелектричної комірки на світлове опромінення, контроль напруги та температури через властивості матеріалу (ширина забороненої зони, спорідненість, легування, рухливість, легування, розподіл дефектів в об'ємі чи на інтерфейси тощо), а також дизайн/структуру комірки.

До переваг AMPS 1-D відносять можливість виведення ВАХ при освітленні та без освітлення, визначення квантової ефективності QE сонячних елементів і фотодіодів та їх зміни під впливом напругою та зміщенням світла; дослідження монокристалічних, полікристалічних та аморфних матеріалів чи будь-якої їх комбінації; пакетна обробка симуляції; а також, розробники забезпечили зручний інтерфейс користувача та гнучку програму виведення результатів.

Однак, середовище має і ряд недоліків, до яких можна віднести внесення вручну великої кількості інформації, необхідної для моделювання; повільна робота з даними.

##### **1.1.2. PC1D**

PC1D – комп'ютерна програма, розроблена для кремнієвих сонячних елементів та надалі розвинута для моделювання широкого спектру

тонкоплівкових сонячних елементів. PC1D дає розв'язки нелінійних рівнянь для квазіодновимірного руху електронів і дірок у кристалічних напівпровідникових структурах [14]. Програмне забезпечення було розроблене в Університеті Нового Південного Уельсу (Сідней, Австралія). ПЗ має зручний інтерфейс, на екрані відображається список параметрів для кожного шару та контакту в пристрої. Значення різних параметрів можна змінити, натиснувши на них.

До переваг PC1D можна віднести простий і зручний інтерфейс, легку зміну практично всіх параметрів, швидкий процес моделювання процесів.

Однак, можливості застосування PC1D обмежуються максимум 5 шарами фотоелектричної тонкоплівкової комірки, а сама програма може містити обмежену кількість (до 200) часових кроків у перехідному режимі збудження. Це означає, що користувачі не можуть виконувати довготривале моделювання, яке потребує невеликих кроків у часі одночасно [47].

### **1.1.3. wxAMPS**

wxAMPS – удосконалена версія AMPS, як програмне забезпечення для моделювання сонячних батарей. Фізичні принципи відповідають AMPS, але додатково включено тунельні струми, покращену швидкість, конвергенцію та візуалізацію. wxAMPS розроблено дослідниками двох університетів: Університету Іллінойсу в Урбана-Шампейн (США) та Нанкайського університету (Китай) [15].

Серед переваг wxAMPS можна назвати зручний інтерфейс із швидким введенням даних і покращеною візуалізацією, необмежена кількість шарів для кожної структури, яка моделюється чи аналізується, можливість коригувати заборонені зони носіїв, тощо. Однак, даний пакет не застосовний для моделювання таких характеристик, як  $C-V$  або  $C-f$ , а також не можна враховувати вплив глибоких станів чи дефектів матеріалу на характеристики сонячного елемента.

## 1.2. Пакет комп'ютерної симуляції SCAPS: призначення, основні функції та запуск програми.

SCAPS-1D (на час написання дипломної роботи актуальною є версія: 3.8) є комп'ютерним середовищем із власним програмним забезпеченням, призначеним моделювати одновимірні сонячні батареї [16]. У цьому середовищі можна чисельно розв'язувати диференціальні рівняння трьох типів: рівняння неперервності, рівняння Пуассона для електронів та рівняння Пуассона для дірок. Крім того, дане програмне середовище дозволяє прогнозувати характеристики фотоелектричної комірки: дозволяє отримати залежності густини струму та напруги, квантової ефективності від довжини хвилі, дає можливість визначити енергетичні зони та інші специфічні характеристики тонкоплівкової структури при її освітленні [17]. Спершу програмне забезпечення SCAPS було розроблено для моделювання та імітації електричних характеристик гетеропереходів і тонкоплівкових фотоелектричних сонячних елементів. А перші публікації застосування та результатів комп'ютерного моделювання стосувалися фотоелектричних структур на базі CdTe та CIGS. Розроблено це комп'ютерне середовище на кафедрі електронних та інформаційних систем університету Гента у Бельгії професором Марком Бургельманом та його колегами [18-20]. Автори показали, що модельовані дані отримали дуже добре узгодження із експериментом. До сьогоднішнього дня колектив розробників продовжує удосконалювати можливості цього комп'ютерного пакету, додаючи все нові функції. Так, наприклад, одними із останніх були спроби застосувати ці потужності для аналізу та прогнозування властивостей кристалічних сонячних елементів (Si та GaAs), а також аморфних елементів (a-Si та Si) [16]. А внутрішня база даних програмного пакету SCAPS містить різні типи сонячних елементів, файли даних із параметрами, які можна змінювати (регулювати, залежно від технологічних умов отримання тонких плівок: корекція товщини, додаткове легування, тощо).

Відповідно до даних офіційної сторінки розробників програми (кафедра електроніки та інформаційних систем університету Гент у Бельгії), її можливості доволі широкі [16]:

- Програма має можливість опрацьовувати структуру до 7 напівпровідникових шарів;

- Є можливість градування серії вихідних параметрів програми (можуть містити залежність від складу чи товщини елемента / гетероструктури):  $E_g$ ,  $chi$ ,  $epsilon$ ,  $N_C$ ,  $N_V$ ,  $v_{thn}$ ,  $v_{thp}$ ,  $\mu_n$ ,  $\mu_p$ ,  $N_A$ ,  $N_D$ , усі види дефектів  $N_i$ ;

- Визначення механізмів рекомбінації: зона-зона (прямі переходи), Оже, SRH-тип;

- Моделювання системи дефектів: в об'ємі чи на межі розділу; враховується їх зарядовий стан і рекомбінація;

- Моделювання системи дефектів, зарядовий тип: без заряду (ідеалізація), одновалентний (один донор, акцептор), двовалентний (подвійний донор, подвійний акцептор, амфотерний), багатовалентний (визначається користувачем);

- Моделювання системи дефектів, енергетичні рівні: однорівневі, рівномірні, гауссові, хвостові або комбінації;

- Моделювання системи дефектів, оптичні властивості: можливе пряме збудження світлом (домішковий фотоелектричний ефект, IPV);

- метастабільні дефекти: переходи між конфігураціями акцептора та донора для відомих метастабільних дефектів у CIGS: дефект  $V_{Se}$  та  $In_{Cu}$ ; а також різного типу метастабільні переходи, які може задавати користувач;

- контакти: робочі або смугові; фільтр оптичних властивостей (фільтр відображення пропускання);

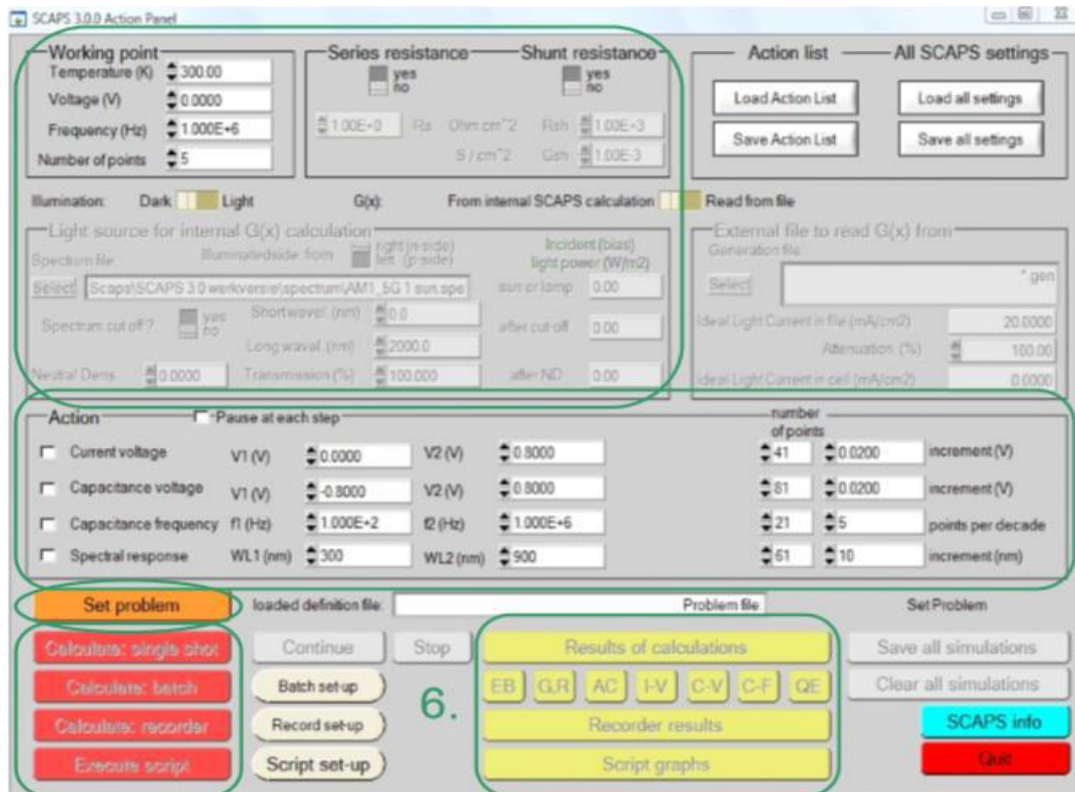
- тунелювання: внутрішньозонне тунелювання (всередині зони провідності або в межах валентної зони); тунелювання до та з інтерфейсних станів;

- генерація: або із розрахунку програми, або з наданого користувачем файлу  $G(x)$ ;
- освітлення: різноманітні стандартні та інші спектри (AM0, AM1.5D, AM1.5G, AM1.5Gedition2, монохроматичний, білий, ...);
- освітлення: або з боку  $p$ -шару, або з боку  $n$ -шару; обрізання спектру та ослаблення;
- робоча точка для розрахунків: напруга, частота, температура;
- розрахунок діапазонів енергії, концентрації та струмів у заданій робочій точці, характеристики  $SP$ , характеристики змінного струму ( $C$  і  $G$  як функції  $V$  та  $f$  або  $f$ ), спектральний відгук (також із зміщенням світла чи напруги);
- можливі пакетні розрахунки; представлення результатів і налаштувань як функції параметрів партії;
- завантаження та збереження всіх налаштувань; запуск SCAPS в персоналізованій конфігурації; мова сценаріїв, включаючи безкоштовні функції користувача;
- інтуїтивно зрозумілий інтерфейс користувача;
- засіб мови сценаріїв для запуску SCAPS із "файлу сценарію"; до всіх внутрішніх змінних можна отримати доступ і побудувати графік за допомогою сценарію;
- вбудований засіб підгонки кривої;
- панель для інтерпретації вимірювань провідності;
- оцінка всіх параметрів може бути встановлена з файлу; реалізовані аналітичні «закони оцінювання»;
- постійно оновлюються аналітичні моделі для спектру, генерації та коефіцієнта оптичного поглинання;
- підтримка сценаріїв для моделювання тандемних комірок;
- реалізація теоретичної межі ефективності Шоклі-Квейссера.

Як правило, алгоритм розрахунку є наступним:

- визначення проблеми;

- задання модельованих даних;
- запуск програми;
- визначення параметрів, які будуть досліджуватися;
- запуск програми симуляції.



**Рис. 1.1.** Робоча панель середовища SCAPS.

На рис. 1.1 наведено робочу панель середовища SCAPS 1D. Саме такий варіант у початковому вигляді бачить користувач, коли запускає програму симуляції. Окремо виділено блоки, які будуть використовуватися при виконанні лабораторних робіт та які нижче пояснено.

### ***Робочі точки (Working point).***

У верхньому лівому кутку розміщено блок «Робочі точки». У цьому блоці користувач чітко повинен визначити відповідні параметри, які важливі для конкретного вимірювання, та які при цьому не змінюються. Робоча температура при цьому за замовченням вказана, як кімнатна, 300 К. Перемикач «Підсвічування» задає світлу або темну дію: таким чином обирається сторона, на яку падає світло та спектр освітлення. Незважаючи на те, що існує широкий діапазон монохроматичного світла та спектру, за



замовчуванням використовується сонячне освітлення ( $1000 \text{ Вт/м}^2$ ) зі спектром «air mass 1.5, global» (AM 1.5).

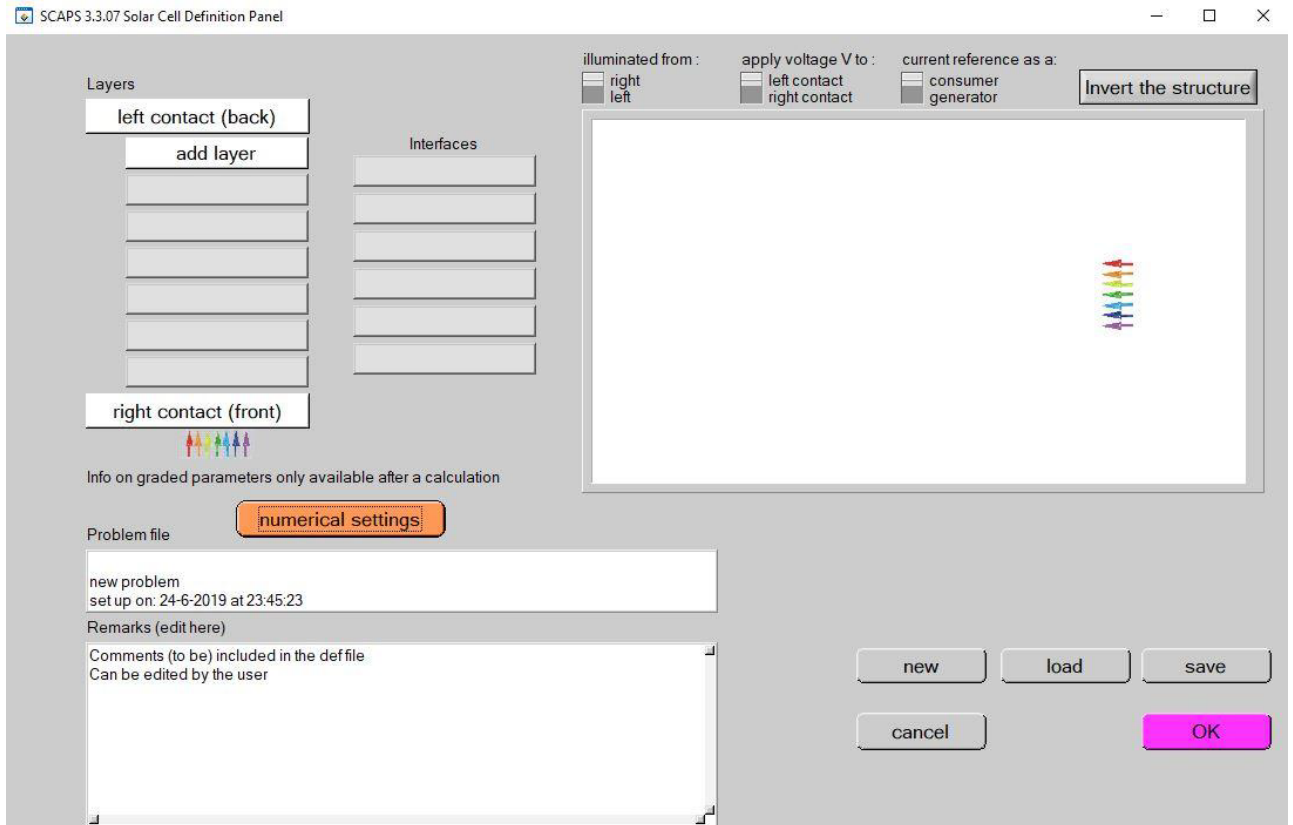
### ***Панель дії (Action point).***

Ця панель розміщена нижче, відразу під панеллю робочої точки. На цій панелі користувач обирає тип вимірювань, які потрібно буде далі моделювати, наприклад, це можуть бути залежності I-V, C-V, C-f чи QE. Розміщена нижче помаранчева кнопка «Задати проблему» (Set problem) використовується для перенаправлення користувача на інтерфейс для визначення різних властивостей шару, який формує сонячну батарею для певного моделювання.

Виділені червоні кнопки під нею задають початок моделювання:

- **«Single calculation»** (одинарний розрахунок) – при цьому моделювання виконується на комірці із використанням всіх параметрів, які залишаються постійними;
- **«Batch calculation»** (пакетний розрахунок) – властивості шарів комірки варіюються. Це дозволяє дослідити вплив кожного шару на сонячну батарею.

Панель визначення сонячної батареї – це панель, на якій визначено різні шари, що утворюють комірку. Ця панель відкривається, коли на панелі дій натискається кнопка **«Визначити завдання»** («Set problem»). Ця панель допомагає створювати нові шари або редагувати структури сонячних батарей (рис. 1.2). Властивості шару, контактів та інтерфейсу обирають відкриттям відповідного поля.

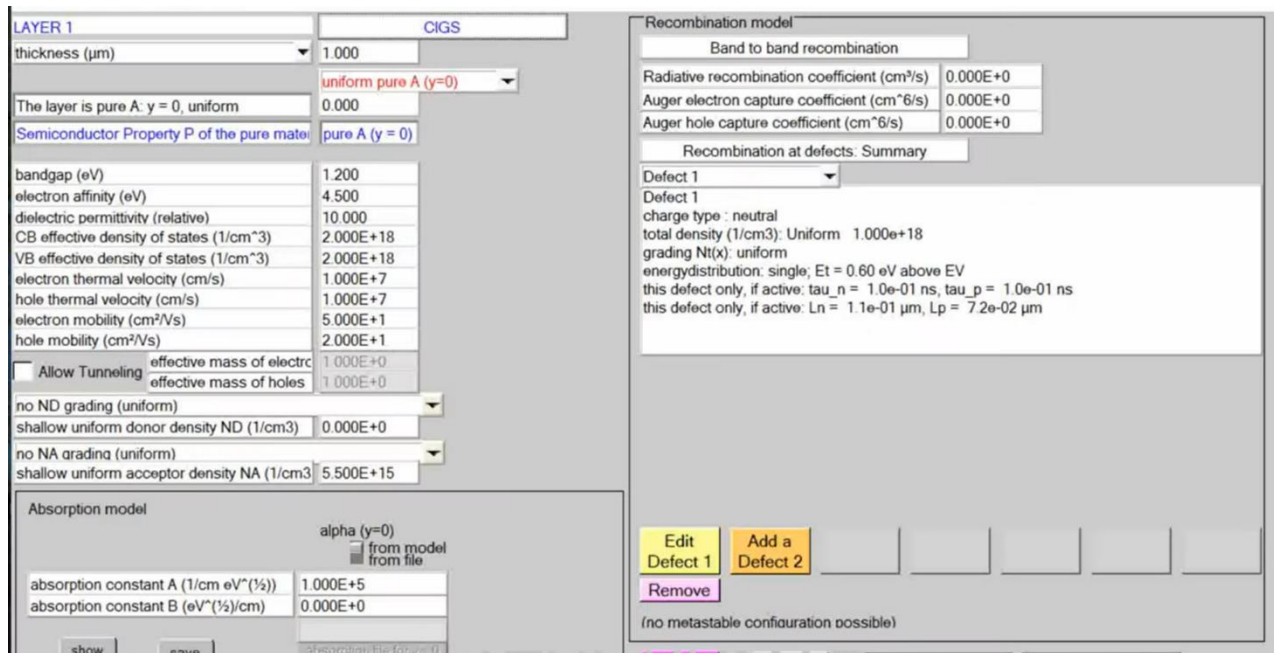


**Рис. 1.2..** Панель визначення типу фотоелектричної комірки.

*Визначення властивостей окремих шарів.*

Для того, щоб задати структуру сонячної батареї, потрібно чітко визначити всі властивості кожного шару (приклад наведено на рис. 1.3). Зокрема, для цього потрібно мати наступні дані: товщину відповідного шару, значення ширини забороненої зони ( $E_g$ ), спорідненість до електрона (eV), діелектричну проникність ( $\epsilon$ ), валентність, густину станів валентної зони та зони провідності ( $N_v$  і  $N_c$ ), теплові швидкості електронів і дірок, рухливості носіїв заряду ( $\mu_n$  і  $\mu_p$ ), концентрації акцепторної та донорної домішок, коефіцієнт поглинання ( $\alpha$ ), густину дефектів ( $N_t$ ) та ін.

І лише після визначення параметрів кожного шару, симуляції вимірювань та умов моделювання можна ввімкнути кнопку «single calculation» або «batch calculation» залежно того, який саме розрахунок є потрібним. Програма показує результати ВАХ, C-F, C-V, енергетичну зонну діаграму, профілі носіїв, електричне поле всередині комірки, генерацію та рекомбінацію електронів, час життя носіїв і криву квантової ефективності.



**Рис. 1.3.** Панель задання властивостей кожного шару фотоелектричної комірки.

### 1.3. Фізичні принципи, закладені у середовищі SCAPS.

Базовими рівняннями, які закладено в основу середовища комп'ютерної симуляції SCAPS є рівняння Пуассона та рівняння неперервності для електронів і дірок [21]:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = -\frac{q}{\epsilon_0\epsilon_r} \left( p - n - N_A^- + N_D^+ + \frac{\rho_t}{q} \right) \quad (1)$$

$$\begin{cases} \frac{1}{q} \frac{dJ_x}{dx} = G - R_n \\ -\frac{1}{q} \frac{dJ_p}{dx} = G - R_p \end{cases} \quad (2)$$

де  $\phi$  – потенціал електричного поля,  $q$  – одиничний заряд,  $\epsilon_0$  та  $\epsilon_r$  – діелектричні проникності вакууму та напівпровідника відповідно;  $n$  і  $p$  – концентрації електронів і дірок відповідно;  $N_A^-$  і  $N_D^+$  – густина іонізованих акцепторів та донорів,  $\rho_t$  – густина заряду дефектів,  $J_n$  і  $J_p$  – густина потоку електронів і дірок;  $G$  – швидкість генерації, а  $R_{n(p)}$  – втрати на рекомбінацію.

$$\begin{cases} J_n = -qD_n \frac{dn}{dx} + q\mu_n \frac{d\varphi}{dx} \\ J_p = -qD_p \frac{dp}{dx} - q\mu_p \frac{d\varphi}{dx} \end{cases} \quad (3)$$

тут  $\mu_{n(p)}$  – рухливості електронів/дірок, а  $D_{n(p)}$  – коефіцієнт дифузії.

Швидкість генерації фотоносіїв:

$$G(\lambda, x) = \varphi_0(\lambda) e^{-\alpha(\lambda)x} \quad (4)$$

$\varphi_0$  – потік фотонів, які налітають на комірку,  $x$  – глибина,  $\alpha$  – коефіцієнт поглинання активного матеріалу,  $\lambda$  – довжина хвилі поглиненого фотона.

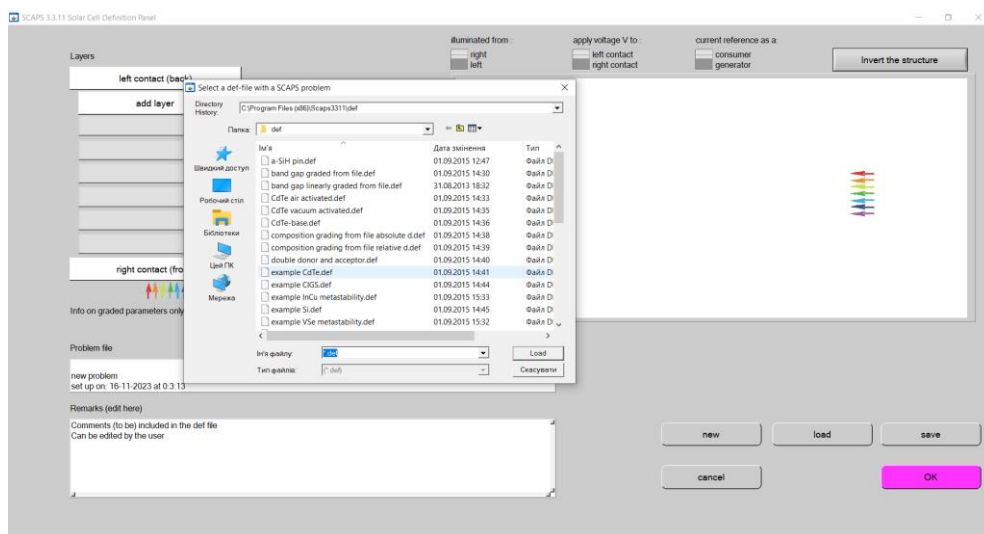
## РОЗДІЛ 2.

### Оптимізація ефективності фотоелектричної комірки за допомогою функціоналу середовища комп'ютерної симуляції SCAPS

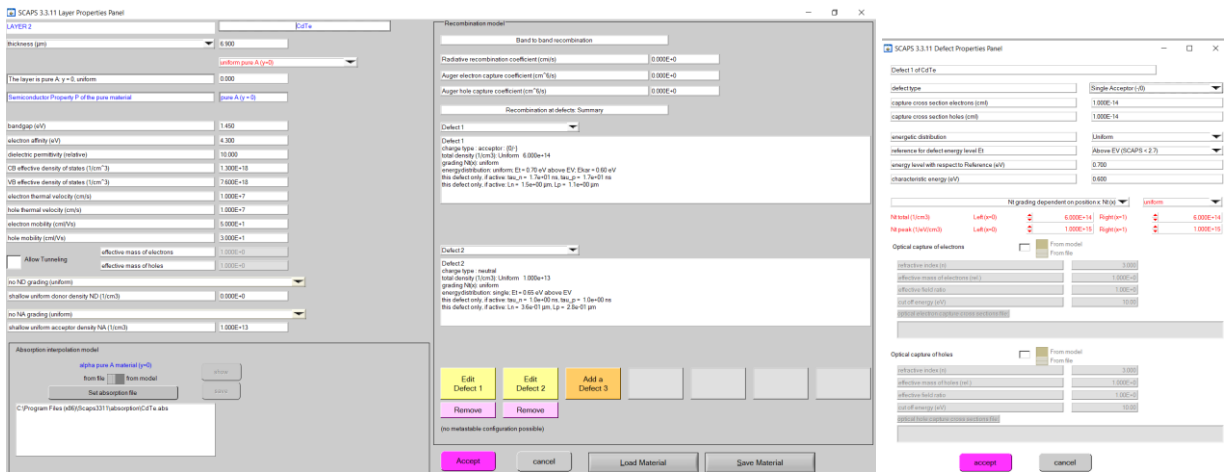
Особливістю середовища комп'ютерної симуляції SCAPS є наявність у неї повноцінної бази даних окремих шарів фотоелемента. Таким чином, розробники програмного продукту ввели основні фізико-хімічні та енергетичні характеристики різних перспективних фотоелектричних матеріалів, щоб полегшити вибір дослідникам.

Однак, слід знати, що у базі наведено дані за певних умов. Залежно від умов синтезу кожного окремого матеріалу, деякі дані можуть мати інші значення. Тому вчені можуть «вручну» вносити корекції для проведення кожного планованого теоретичного моделювання. Такі введені дані беруться, як правило, із експерименту або із літератури. Для ще точнішого моделювання можна додатково ввести дані про можливі дефекти (концентрація та енергетичні положення).

На рис. 2.1 наведено зображення діалогового вікна програми із можливістю обрати певний матеріал у якості одного із базових шарів фотоелектричної комірки, а також показано набір даних на прикладі перспективного матеріалу – CdTe.



a)



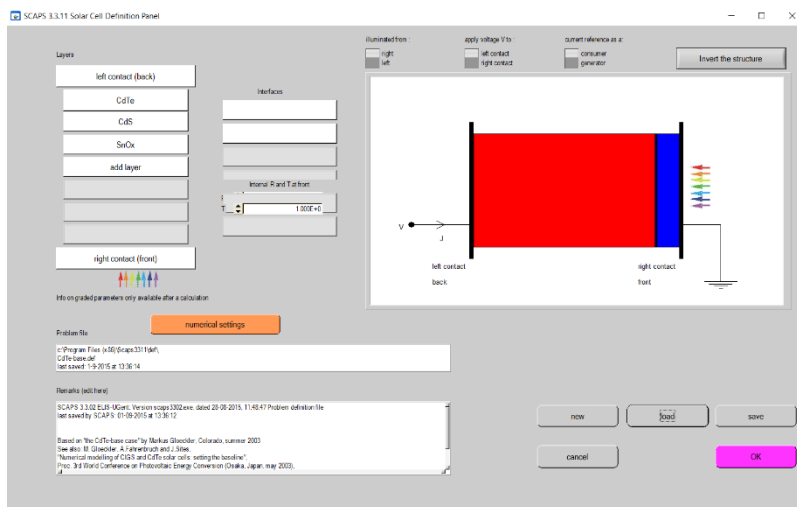
б)

в)

**Рис. 2.1.** Діалогове вікно середовища SCAPS із можливістю вибору окремого шару фотоелемента (а) та взірць відображення характеристик бази даних окремого шару на прикладі CdTe (б) та додаткове вікно введення даних про наявні дефекти структури (в).

Розглянемо на прикладі стандартного файлу «CdTe-base.def» варіанти моделювання ефективності фотоелектричної комірки та виконаємо її оптимізацію.

Крок 1. Завантажуємо вихідний файл «CdTe-base.def» та задаємо початкові умови експерименту (рис. 2.2, табл. 2.1):



**Рис. 2.2.** Модель фотоелектричної структури CdTe/CdS/SnO<sub>2</sub>.

Товщини шарів:

$$d_{CdTe} = 2 \text{ мкм};$$

$$d_{CdS} = 0,025 \text{ мкм};$$

$$d_{SnO2} = 0.5 \text{ мкм}$$

Густини станів:

$$N_{d_{SnO2}} = 1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3};$$

$$N_{a_{CdTe}} = 2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$$

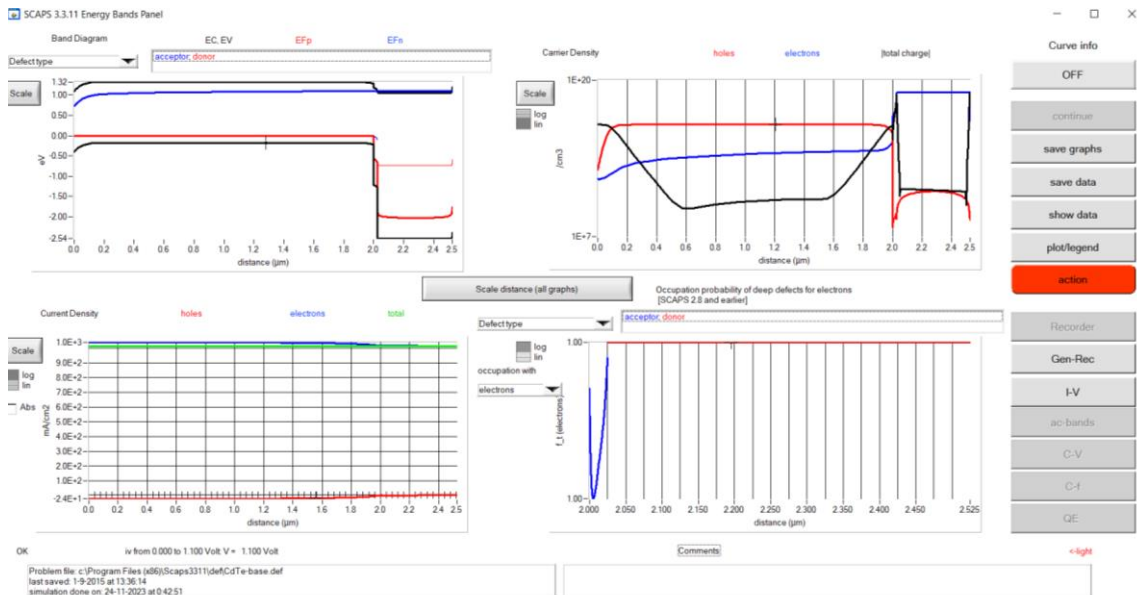
$$N_{d_{CdS}} = 1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}.$$

Наступні моделювання вольт-амперних характеристик (I-V) здійснюємо у режимі освітлення «Light».

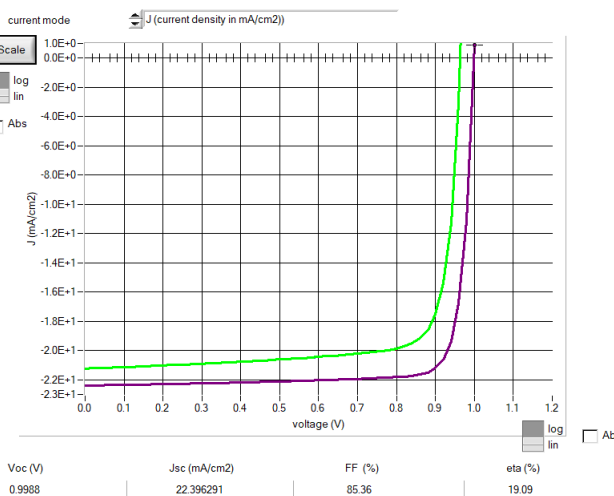
**Таблиця 2.1.**

Значення базові характеристик фотоелектричних сполук **CdS, CdTe []**.

	n-CdS	p-CdTe	SnO <sub>2</sub>
Товщина, мкм	0,025	2,0	0,5
Співвідношення діелектричних констант, $\epsilon/\epsilon_0$	9,0	9,4	9,0
Рухливість електронів, $\mu$ , см <sup>2</sup> /В·с	350	500	100
Рухливість дірок, $\mu$ , см <sup>2</sup> /В·с	50	60	25
Концентрація носіїв, см <sup>-3</sup>	10 <sup>18</sup>	5·10 <sup>15</sup>	
Ширина забороненої зони, E <sub>g</sub> , eВ	2,42	1,45	3,6
Густина станів, N <sub>C</sub> , см <sup>-3</sup>	2,2·10 <sup>18</sup>	7,5·10 <sup>17</sup>	2,2·10 <sup>18</sup>
Густина станів, N <sub>V</sub> , см <sup>-3</sup>	1,8·10 <sup>19</sup>	1,8·10 <sup>19</sup>	1,8·10 <sup>19</sup>
Спорідненість електронів, eВ	4,0	3,9	4,0



**Рис. 2.3.** Результати моделювання I-V для системи SnO<sub>2</sub>/CdTe/CdS.



Як видно із наведених графіків на рис. 2.3, ефективність змодельованої комірки складає  $\eta = 19,09\%$ .

Комп'ютерне моделювання дозволяє зрозуміти роботу фотоелементів та реалізувати додаткові ідеї щодо зміни структури чи параметрів елементів задля покращення їх ефективності. Для конкретного фотоелемента можна змінювати понад 50 параметрів. Очевидно, що проблема з таким числом змінних може призводити до неоднозначних результатів щодо їх надійності. Тому у процесі оптимізації потрібно мінімізувати кількість змінних параметрів, зафіксувавши багато з них на «розумних» значеннях. Підібрати відповідні параметри є достатньо складним завданням, оскільки велика їх кількість залежать від експериментальної методики осадження, а отже, для



матеріалів, отриманих різними методами, вони можуть бути різними. Також модифікувати і самі режими осадження, що змінюватиме дефектність матеріалу та суттєво впливатиме на кінцеві результати.

Розглянуто базову тришарову модель  $\text{SnO}_2/\text{CdS}/\text{CdTe}$ . Вибір такої гетеросистеми базується на тому, що кожен із шарів достатньо добре вивчений і у сучасній літературі є велика кількість публікацій, щоб підібрати правильні параметри для моделювання. Крім того, цікавою є задача зміни товщини різних шарів такої базової структури, що теж дозволяє оптимізувати ефективність фотоелектричної комірки. У таблиці 2.1 наведено використовувані експериментальні дані для структури на основі  $\text{CdTe}$  ( $\text{SnO}_2/\text{CdS}/\text{CdTe}$ ). Отримане значення ефективності фотоелектричного перетворення енергії становило 19,09% ( $V_{oc} = 0,9988 \text{ В}$ ,  $J_{sc} = 22,39 \text{ мА/см}^2$ ,  $FF = 0,85$ ). Дослідження проводили для шару  $\text{CdTe}$  товщиною 2 мкм і віконним шаром  $\text{CdS}$  25 нм. Таке значення було оптимальним, оскільки, зменшення густини акцепторних станів з  $2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$  до  $5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$  зменшило ефективність до 18,65% ( $V_{oc} = 0,96 \text{ В}$ ,  $J_{sc} = 22,95 \text{ мА/см}^2$ ,  $FF = 0,85$ ). Подальше збільшення цієї густини хоч і моделює вищі ефективності, але не сприяє отриманню достовірних результатів (через різкі зміни  $V_{oc}$  та  $J_{sc}$ ).

Теоретично мінімальна товщина, необхідна для плівок  $\text{CdTe}$ , яка дозволяє поглинати 99% падаючих фотонів з енергією, більшою ніж  $E_g$ , становить приблизно 1-2 мкм. Проте на сьогоднішній день майже всі високоефективні сонячні батареї  $\text{CdTe}$  виготовлені з шаром  $\text{CdTe}$  товщиною понад 5 мкм. З цією метою проводили чисельний аналіз з метою зменшення вартості необхідного матеріалу, що впливає на кінцеву вартість сонячних елементів  $\text{CdS}/\text{CdTe}$  шляхом зменшення товщини шарів  $\text{CdTe}$  та  $\text{CdS}$ .

Зміна товщини віконного шару  $\text{CdS}$  з 25 нм до 50 нм, що є реальним для установок у наших лабораторіях, призводить до зменшення ефективності до 18,2%. Більш ефективним є зміна шару  $\text{CdTe}$ . Так, при товщині 3 мкм, ефективність комірки зростала до 20,13%. Більш детально такі дані наведено у таблиці 2.2.

**Таблиця 2.2.**

Значення потужності фотоелектричної комірки CdTe/CdS, залежно від зміни товщини робочих шарів (моделювання у SCAPS).

CdTe	CdS	ефективність
2	0,025	19,09
2	0,05	18,65
3	0,025	20,13
3	0,05	19,23
4	0,025	20,75
4	0,05	19,85
5	0,025	21,19
5	0,05	20,28
6	0,025	21,52
6	0,05	20,61
7	0,025	21,78
7	0,05	20,87
8	0,025	22,0
8	0,05	21,08
9	0,025	22,19
9	0,05	21,27
10	0,025	22,36
10	0,05	21,43

Розпочнемо оптимізувати геометрію фотоелектричної комірки відповідно до плівок, отриманих у лабораторії вакуумних методів осадження на кафедрі фізики і хімії твердого тіла:  $d_{\text{CdTe}} = 4$  мкм;  $d_{\text{CdS}} = 100$  нм = 0,1 мкм;  $d_{\text{SnO}_2} = 0.5$  мкм.

Зміна товщини одного шару CdTe призводить до значення  $\eta = 16,58\%$ , демонструючи тим самим незначний приріст. Однак, збільшення товщини шару CdS різко зменщує значення ефективності до значень  $\eta = 14,55\%$ . Аналогічно, збільшення товщини проїдного контактного шару призводить до зменшення ефективності.

Спробуємо визначити умови, які призводять до покращення ефективності комірки.

Заміна шару SnO<sub>2</sub> на ZnO тієї самої товщини спричинює зменшення ККД до 14,94 % (при товщинах шарів CdTe – 6 мкм та CdS – 0,05 мкм). Тому наступні результати будуть моделюватися із врахуванням провідного шару SnO<sub>2</sub>.

Додавання додаткового сильно легovanого шару CdTe (0,5мкм) зліва незначно покращує ефективність до 20,74%.

Додали дефекти у CdTe із високою густиною однократно заряджених акцепторів  $5 \cdot 10^{16} \text{см}^{-3}$ . Ефективність зменшилася: 16,47%. Якщо брати нейтральні дефекти, то кінцева ефективність змінюється не суттєво: 16,54%.

## РОЗДІЛ 3.

### Симуляція квантової ефективності (QE, quantum efficiency) комірки сонячного фотоелемента у середовищі SCAPS.

#### 3.1. Методика розрахунку квантової ефективності.

Дослідження квантової ефективності QE (quantum efficiency) є популярним і практичним методом розуміння механізму генерації та втрат фотонів в фотоелектричних пристроях. Квантова ефективність визначається відношенням кількості генерованих фотоелектричних носіїв заряду до кількості падаючих фотонів [22].

$QE_{\text{вн}}$  (внутрішня квантова ефективність) – це відношення кількості носіїв заряду, генерованих коміркою, до кількості фотонів, поглинених активним шаром, тоді як зовнішня квантова ефективність включає додатково втрати на відбиття. Щоб змоделювати квантову ефективність, аналітична модель враховує спрощений набір параметрів, тоді як чисельне моделювання вимагає низки параметрів для розроблення моделі квантової ефективності. За допомогою цих наборів параметрів моделювання квантової ефективності сприяє розумінню процесів рекомбінації, оскільки величина QE обернено пропорційна процесу рекомбінації. Крім того, спектральний відгук QE дає додаткову інформацію про просторовий розподіл заряду.

Зовнішня квантова ефективність ( $QE_{\text{зовн}}(\lambda, V)$ ) – це величина, яка визначається відношенням кількості носіїв заряду, зібраних фотоелектричну структуру, до кількості фотонів даної довжини хвилі або енергії, що надходять на цю структуру. Коли у спектрі присутні різні довжини хвилі світла, квантова ефективність відповідає спектральним відгукам (А x Вт) сонячних елементів на одиницю площі за одиницю часу на одиниці довжини хвилі.

$$QE_{\text{зовн}} = \frac{I_{\text{фс}}}{q\Phi_{\text{ф}}} = \frac{I_{\text{фс}}}{q} \left( \frac{h\nu}{P_{\text{оп}}} \right)$$

де  $I_{fc}$  – фотострум,  $\Phi_{\phi}$  – потік фотонів, який дорівнює відношенню оптичної сили  $P_{оп}$  до  $h\nu$ .

Зовнішня квантова ефективність  $QE_{зовн}$  визначається через проходження  $T(\lambda)$  усіх матеріалів поглинаючої структури, яка містить антивідбиваючий шар, прозорий провідний оксидний шар (передній контактний шар – ІТО, ТСО), буферний шар та шару CdS n-типу. Внутрішня квантова ефективність  $QE_{вн}(\lambda, V)$  пов'язана із зовнішньою квантовою ефективністю наступним чином:

$$QE_{зовн} = (1 - R_{антивідб.}) \cdot T_{ITO(TCO)}(\lambda) \cdot T_{буф.шар}(\lambda) \cdot T_{CdS}(\lambda) \cdot I_{QE_{внутр}}$$

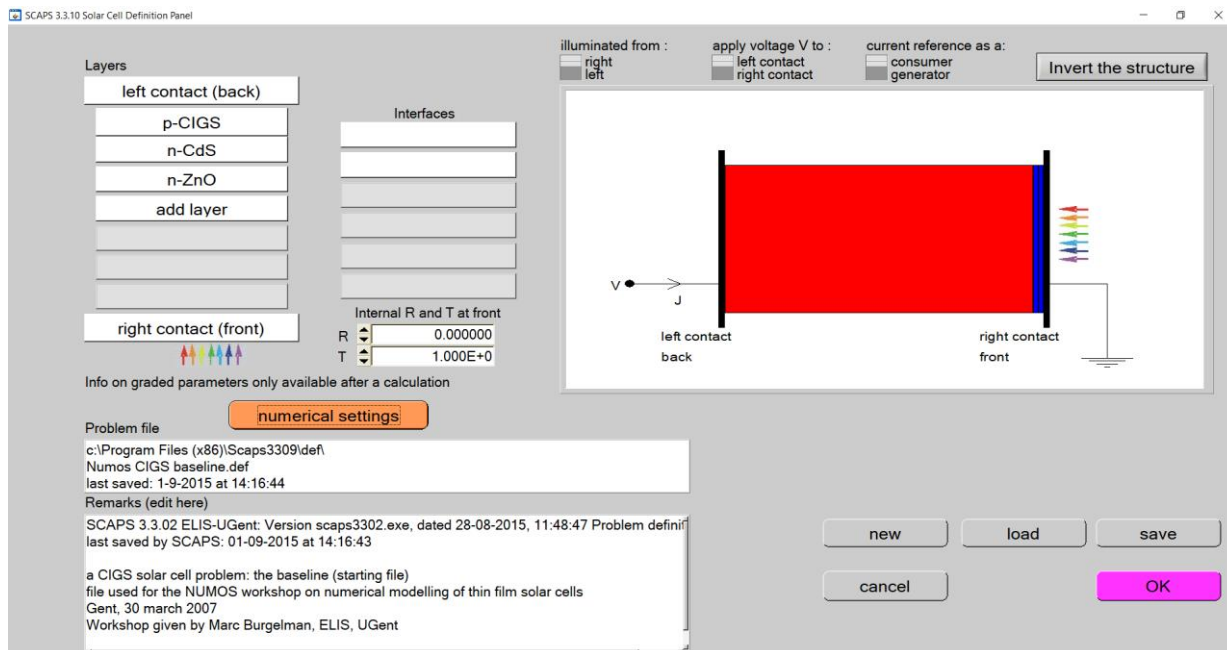
де  $T_{ITO(TCO)}(\lambda)$  – пропускання прозорого провідного оксидного шару,  $T_{буф.шар}(\lambda)$  – пропускання буферного шару (CdS чи CIGS),  $T_{CdS}(\lambda)$  – пропускання шару CdS.

## **3.2. Алгоритм симуляції квантової ефективності.**

### **3.2.1. Здійснення вибору комірки та задання початкового набору параметрів.**

Зі стандартного набору обирається типовий склад фотоелектричної комірки. Розглянемо комірку типу CIGS. Для цього у середовищі комп'ютерної симуляції SCAPS є початковий файл «Numos CIGS baseline.def» (рис. 3.1).

Для моделювання реальної структури та перевірки власних даних, використано дані роботи [23], як однієї із найбільш цитованих праць для симуляції такого матеріалу. Відповідно, з цієї статті беремо вихідні значення основних робочих параметрів (робочі точки) та задаємо значення коефіцієнтів розрахунку відповідних шарів (табл. 3.1).



**Рис. 3.1.** Моделювання комірки типу CIGS на основі файлу «Numos CIGS baseline.def»

**Таблиця 3.1.**

Розрахункові значення для фотоелемента типу CIGS з файлу взірця (ex. - example) та зі статті [23]

Параметр	CIGS [ex.]	ZnO [ex.]	CdS [ex.]	CIGS [23]	ZnO:Al [23]	CdS (буф. шар #1) [23]	ZnS (буф. шар #2) [23]	ZnSe (буф. шар #3) [23]
Eg, eV	1,1	3,3	2,40	1,5	3,5	2,4	0,06	0,08
$\epsilon$	13.6	10	10	13,6	9	10	10	10
$\chi$ , eV	4,5	4,45	4,2	4,5	4,65	4,2	3,5	2,9
Рухливість електроні $\nu$ , $\mu$ , $\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{c}$	100	100	100	100	100	100	50	50
Рухливість дірок, $\mu$ , $\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{c}$	25	25	25	25	25	25	20	20
Густина станів, $N_C$ , $\text{cm}^{-3}$	$2.2 \cdot 10^8$	$2.2 \cdot 10^{18}$	$2.2 \cdot 10^8$	$2,2 \cdot 10^{18}$	$2,2 \cdot 10^{18}$	$1,5 \cdot 10^{18}$	$1,5 \cdot 10^{18}$	$1,5 \cdot 10^{18}$
Густина станів, $N_V$ , $\text{cm}^{-3}$	$1.8 \cdot 10^9$	$1.8 \cdot 10^{19}$	$1.8 \cdot 10^9$	$1,8 \cdot 10^{19}$	$1,8 \cdot 10^{19}$	$1,8 \cdot 10^{19}$	$1,8 \cdot 10^{18}$	$1,8 \cdot 10^{18}$

Обираємо робочий режим  $T = 300\text{ K}$ , світло падає на передню сторону фотоелектричної комірки (режим *Light*).

Виділяємо симуляцію квантової ефективності QE та вказуємо діапазон довжин хвиль для симуляції: від 200 нм до 1200 нм.

Зберігаємо обрані значення (*Save all simulation*) (рис. 3.2).

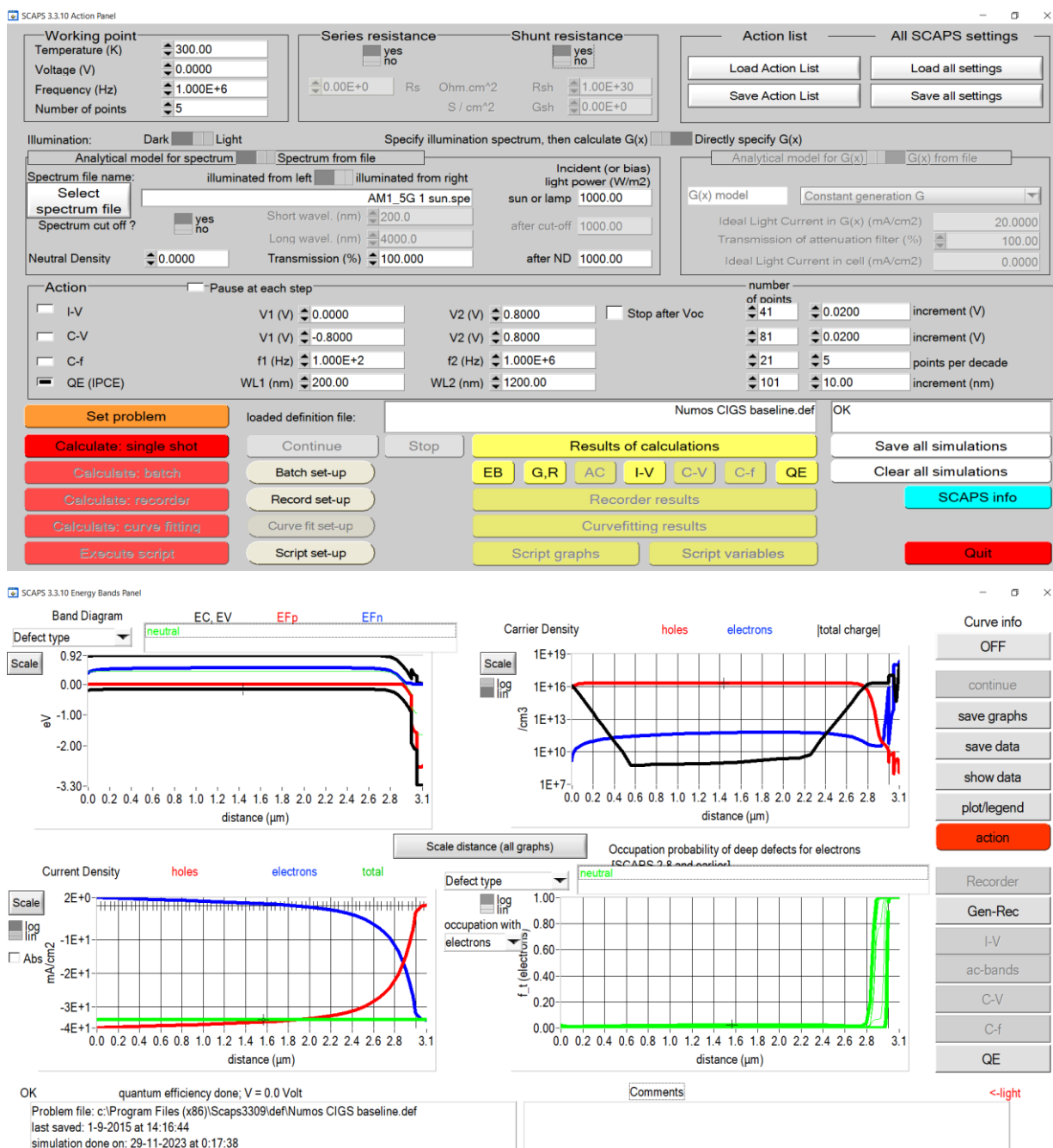
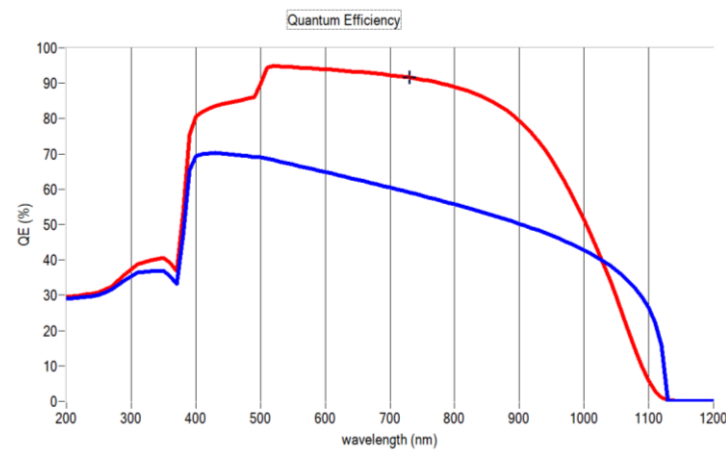


Рис. 3.2. Симуляція квантової ефективності фотоелектричної комірки типу CIGS.

### 3.2.2. Симуляція при зміні коефіцієнта поглинання.







**Рис. 3.5.** Залежність квантової ефективності від довжини хвилі світла для CIGS при кімнатній температурі для різних значень коефіцієнта поглинання (червона крива –  $10^5 \text{ см}^{-1}$ , синя крива –  $10^4 \text{ см}^{-1}$ ).

Як видно із рис. 3.5, спостерігається суттєве зменшення QE. Тобто, для покращення характеристик фотоелемента не потрібно зменшувати постійну поглинання, яка визначається характеристиками матеріалу.

### 3.2.3. Залежність QE від зміни напруги зміщення постійного струму

Регулюємо важливу робочу точку «Voltage»: розряд в симуляції I-V та C-V. Це напруга зміщення постійного струму в моделюванні квантової ефективності QE. У SCAPS за замовчуванням ця напруга складає 0 В (рис. 3.6). Періодично змінимо це значення на від'ємну напругу (-0,5 В) та різні значення додатної (0,1 В та 0,5 В).

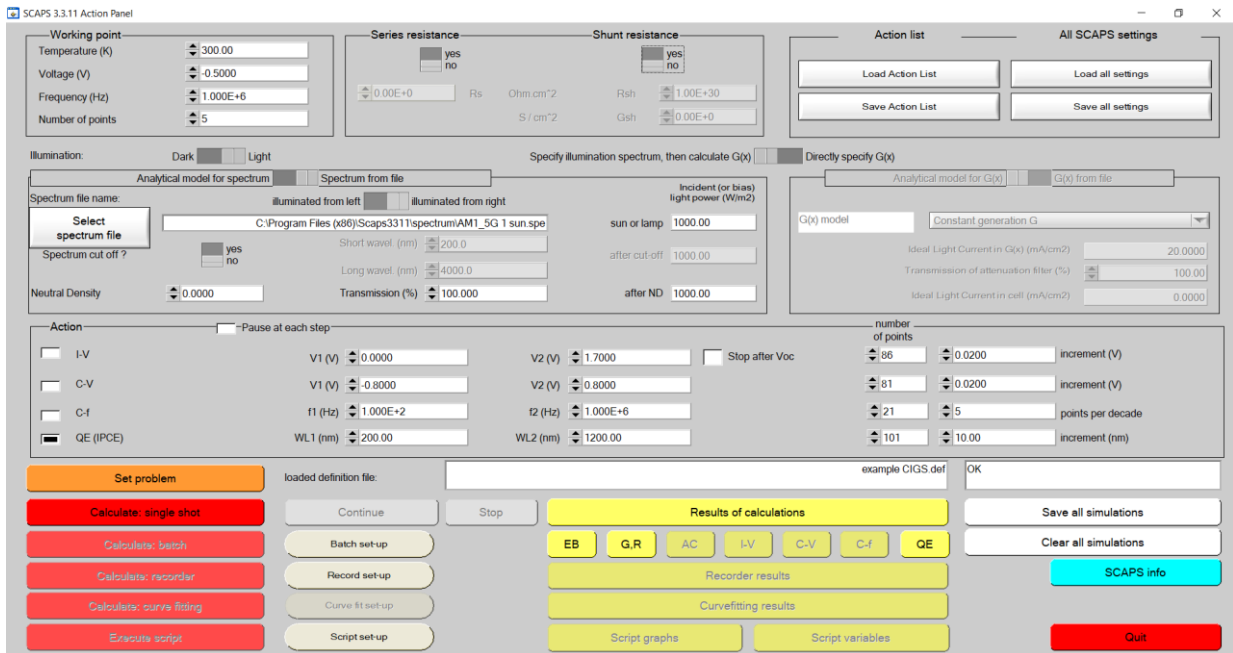


Рис. 3.6. Панель зміни вихідних даних фотоелектричної комірки типу CIGS.

Визначаємо квантову ефективність. Як видно із рис. 3.7, значення QE зростає для від'ємної напруги та .

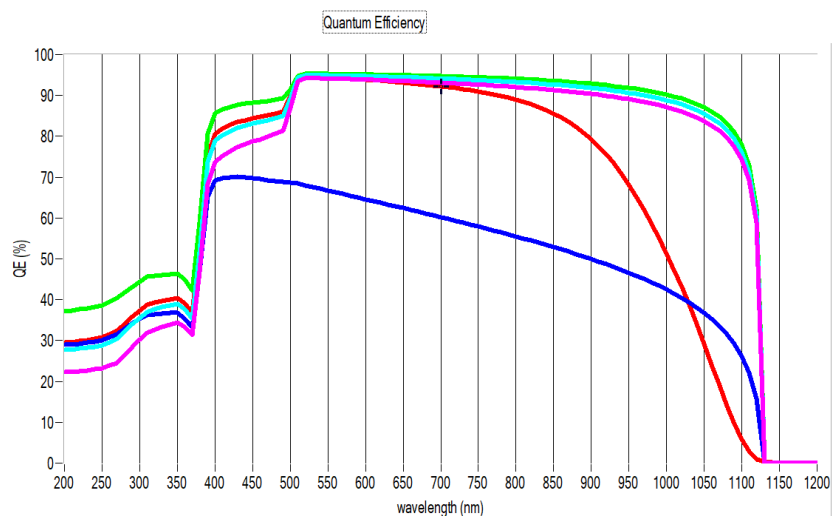
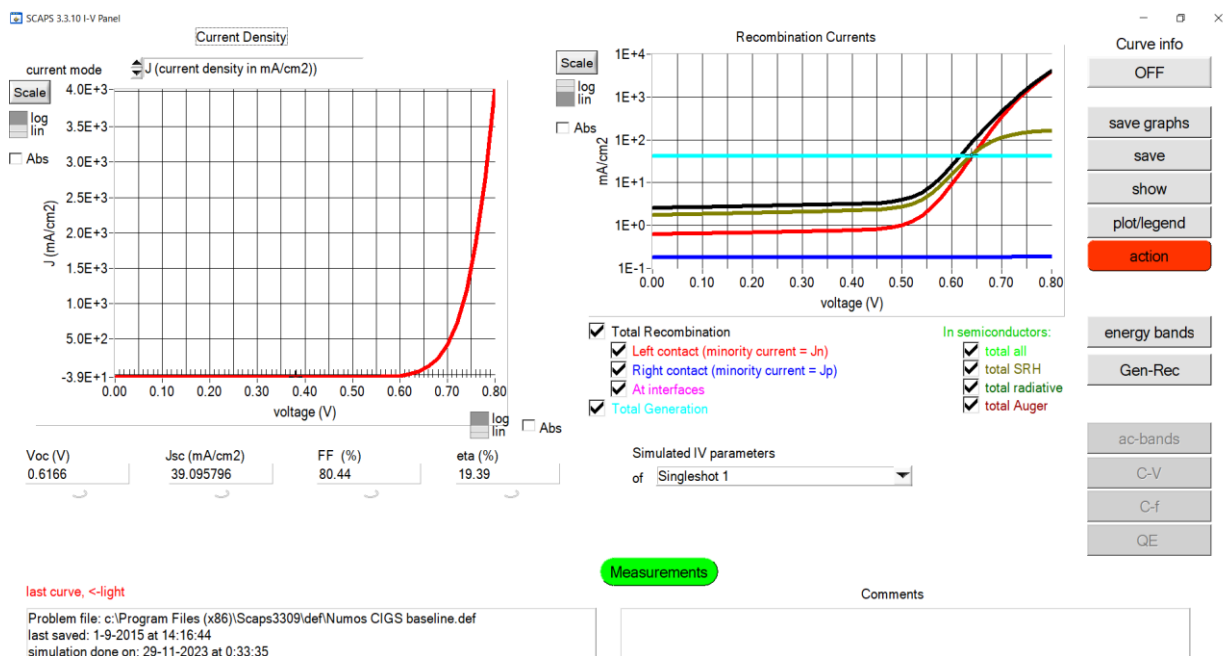


Рис. 3.7. Динаміка симуляції значень квантової ефективності для різних значень напруги. Зелена крива: 0 В, блакитна: -0,5 В, рожева: +0,1 В, жовта: +0,5 В.

Рожева та блакитна криві мають дещо нижчі значення QE, що свідчить, що оптимальним є саме ведення від'ємних чи нульових значень напруги.

### 3.3. Оптимізація ефективності реальної структури фотоелектричної комірки на основі CIGS

Дослідимо спершу ефективність даної комірки, змінюючи товщини робочих шарів.



**Рис. 3.8.** Базова модель CIGS: визначення ефективності фотоелектричної комірки залежно від різних товщини робочих шарів фотоелектричної комірки:  $d_{\text{CIGS}} = 3 \text{ мкм}$ ,  $d_{\text{CdS}} = 50 \text{ нм}$ ,  $d_{\text{ZnO}} = 50 \text{ нм}$ .

Таблиця 3.2.

Значення потужності фотоелектричної комірки p-CIGS/n-CdS/n-ZnO, залежно від зміни товщини робочих шарів (моделювання у SCAPS).

p-CIGS	n-CdS	n-ZnO	$\eta$
1	2	3	4
1 мкм	50 нм	50 нм	17,74 %
<b>3 мкм</b>	<b>50 нм</b>	<b>50 нм</b>	<b>19,39 %</b>
5 мкм	50 нм	50 нм	<b>19,55 %</b>
3 мкм	25 нм	50 нм	19,83
3 мкм	100 нм	50 нм	18,53

(продовження таблиці 3.2)

1	2	3	4
3 мкм	50 нм	25 нм	19,48
3 мкм	50 нм	100 нм	19,28
5 мкм	25 нм	100 нм	19,84
5 мкм	25 нм	50 нм	19,99%
<b>5 мкм</b>	<b>25 нм</b>	<b>25 нм</b>	<b>20,10 %</b>

Як видно із таблиці 3.2, ефективність базової моделі CIGS (файл «Numos CIGS baseline.def») складає 19,39 %. Найбільш оптимальним варіантом є система типу CIGS із розмірами шарів  $d_{\text{CIGS}} = 5$  мкм,  $d_{\text{CdS}} = 25$  нм,  $d_{\text{ZnO}} = 25$  нм, для якої  $\eta = 20,10$  %. Однак, на базі лабораторій ПНУ контролювано можна задати товщини шарів до 50 нм. Більш тонкі шари отримуються сильно дефектні та не будуть суцільними. Відповідно, кращим практичним варіантом осадження плівок типу CIGS є наступний:  $d_{\text{CIGS}} = 5$  мкм,  $d_{\text{CdS}} = 50$  нм,  $d_{\text{ZnO}} = 50$  нм, для якого  $\eta = 19,55$  %. Підвищити практично на 2% (до значення  $\eta = 21,78$  %) можна, якщо застосувати технологію отримання бездефектного базового матеріалу чи бездефектних всіх шарів (включно із CdS та ZnO), коли спостерігається  $\eta = 21,96$  %. Однак, для цього потрібні інші технології напилення тонких плівок, наприклад, методом молекулярно-променевої епітаксії, що суттєво здорожує кінцевий матеріал. Однак, зменшення дефектності базового шару CIGS може бути реальним, якщо удосконалити технологічні режими осадження плівок чи дослідити принципи формування системи дефектів, що уникати їх виникнення. Саме така задача може бути актуальною для сучасних досліджень тонкоплівкових сонячних фотоелементів.

Якщо порівняти отримані результати для системи на основі CIGS із системою на основі CdTe (розділ 2), то конкурентною є структура  $\text{SnO}_2/\text{CdS}/\text{CdTe}$  із товщинами  $d_{\text{CdTe}} = 10$  мкм,  $d_{\text{CdS}} = 50$  нм,  $d_{\text{SnO}_2} = 50$  нм, для якої отримано  $\eta = 21,43$  %. Ефективність цієї системи на 2 % є вищою, що

свідчить про перспективу експлуатації саме цього типу матеріалів. Крім того, бінарну сполуку CdTe можна легшим чином отримати із контрольовано меншою системою дефектів, ніж четвертинну сполуку типу CIGS.

На наступному етапі, взявши за основу результати п. 3.2, залишаємо оптимальні параметри та моделюємо їх на реальну комірку, дані кожного із шарів якої наведено у таблиці 3.1. А також здійснимо порівняння значень реальної комірки (за результатами роботи [23]) з модельною. Результати наведено у таблиці 3.3.

Таблиця 3.3.

Порівняння значень параметрів реальної комірки (за результатами роботи [М...]) із модельною (CdS [ex. - example]).

	CdS [ex.]	CdS [23]
$V_{CO}$ , В	0,61	0,96
$J_{SC}$ , мА/см <sup>2</sup>	33,77	33,84
FF, %	79,74	69,22
$\eta$ , %	19,39	22,71

Як видно, ефективність суттєво стає вищою для структури, яка розглянута у статті [23]. Однак, автори цієї статті не вказують конкретний склад сполуки CIGS, але при цьому задають суттєво вищу ширину забороненої зони. Схоже порівняння було зроблено і для результатів роботи “A study towards the possibility of ultra thin Cds/CdTe high efficiency solar cells from numerical analysis” [24]. Однак, у цій роботі максимальна ефективність сягала 15,4%. Лише введенням додаткового шару CdTeS автори [24] показали, що дещо можна підвищити ефективність кінцевої комірки. Очевидно, відмінності структури CdTe та CdS і спричиняли більшу дефектність та нижчу ефективність.

## ВИСНОВКИ

1. Розглянуто системи комп'юреною симуляції тонкоплівкових фотоелектричних комірок типу SCAPS, AMPS 1-D, PC1D, wxAMPS, здійснено порівняння їх характеристик.
2. Користуючись базовими вихідними файлами системи симуляції SCAPS-1D змодельовано фотоелектричні структури типу CIGS: p-CIGS/n-CdS/n-ZnO та типу CdTe: CdTe/CdS/SnO<sub>2</sub>.
3. Розраховано важливі параметри фотоелектричних систем: потужність  $\eta$ , квантова ефективність QE.
4. Дослідження квантової ефективності виконано враховуючи зміни параметрів робочої напруги  $V$  та коефіцієнта поглинання матеріалу.
5. Для фотоелектричної системи на основі CdTe досліджено зміну ефективності від ширини базових шарів CdTe та CdS. Оптимальне значення отримано для товщин  $d_{CdTe} = 10$  мкм,  $d_{CdS} = 50$  нм,  $d_{SnO_2} = 50$  нм ( $\eta = 21,43$  %).
6. Для фотоелектричної системи на основі CIGS досліджено зміну ефективності від ширини базових шарів CdTe та CdS. Оптимальне значення отримано для товщин  $d_{CIGS} = 5$  мкм,  $d_{CdS} = 50$  нм,  $d_{ZnO} = 50$  нм ( $\eta = 19,55$  %)

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Weckend, S., Wade, A., & Heath, G. A. (2016). *End of life management: solar photovoltaic panels* (No. NREL/TP-6A20-73852). National Renewable Energy Lab.(NREL), Golden, CO (United States).
2. Timmons D., Harris J. M., Roach B. The economics of renewable energy. Global Development and Environment Institute, Tufts University. 2014. Vol. 52. P. 1-52.
3. Опанасюк, А. С., Доброжан, О. А., Пшеничний, Р. М., Д'яченко, О. В., Д'яченко, О. В., Шамардін, А. В., ... & Буківський, А. П. (2021). Перспективні напівпровідникові наноматеріали для потреб гнучкої електроніки: синтез, розробка методів друку та оптимізація їх структурних, оптичних і фотоелектричних властивостей. Сумський державний університет. Веб-ресурс: <https://essuir.sumdu.edu.ua/handle/123456789/87389>.
4. Kosyachenko L.A., Mathew X., Paulson P.D., Lytvynenko V.Y., Maslyanchuk O.L. Optical and recombination losses in thin-film Cu (In, Ga) Se<sub>2</sub> solar cells. Solar energy materials and solar cells. 2014 Vol. 130 P. 291-302
5. Wisz G., Virt I., Sagan P., Potera P., Yavorskyi R. Structural, Optical and Electrical Properties of Zinc Oxide Layers Produced by Pulsed Laser Deposition Method. Nanoscale research letters. 2017. Vol. 12, No. 1. P. 253-260.
6. Green M.A., Hishikawa Y., Warta W., et al. Solar cell efficiency tables (version 55). Progr Photovolt Res Appl. 2020. Vol. 28, No. 1. P. 3-15.
7. Lee, S., & Price, K. (2017). Variation of quantum efficiency in CZTSSe solar cells with temperature and bias dependency by SCAPS simulation. J. Energy and Power Eng, 11, 69-77.
8. Abdelfatah, M., El Sayed, A. M., Ismail, W., Ulrich, S., Sittinger, V., & El-Shaer, A. (2023). SCAPS simulation of novel inorganic ZrS<sub>2</sub>/CuO

- heterojunction solar cells. *Scientific Reports*, 13(1), 4553; Ranjan, R., Anand, N., Tripathi, M. N., Srivastava, N., Sharma, A. K., Yoshimura, M., ... & Tiwari, R. N. (2023). SCAPS study on the effect of various hole transport layer on highly efficient 31.86% eco-friendly CZTS based solar cell. *Scientific Reports*, 13(1), 18411.
9. Hossain, M. K., Rubel, M. H. K., Toki, G. I., Alam, I., Rahman, M. F., & Bencherif, H. (2022). Effect of various electron and hole transport layers on the performance of CsPbI<sub>3</sub>-based perovskite solar cells: A numerical investigation in DFT, SCAPS-1D, and wxAMPS frameworks. *ACS omega*, 7(47), 43210-43230.
  10. Smucker, J., & Gong, J. (2021). A comparative study on the band diagrams and efficiencies of silicon and perovskite solar cells using wxAMPS and AMPS-1D. *Solar Energy*, 228, 187-199.
  11. Liu, Y., Ahmadpour, M., Adam, J., Kjelstrup-Hansen, J., Rubahn, H. G., & Madsen, M. (2018). Modeling multijunction solar cells by nonlocal tunneling and subcell analysis. *IEEE Journal of Photovoltaics*, 8(5), 1363-1369.
  12. Pachón, C. E., Mulcué-Nieto, L. F., & Restrepo, E. (2020). Effect of band alignment on the n-InAlN/p-Si heterojunction for solar cells: a numerical study. *Materials Today Energy*, 17, 100457.
  13. Be $\delta$ -pecypc: <http://ampsmodeling.org/>
  14. Be $\delta$ -pecypc: <https://www.pveducation.org/pvcdrom/welcome-to-pvcdrom/pc1d>.
  15. Be $\delta$ -pecypc: <https://www.pvlighthouse.com.au/cms/simulation-programs/wxamps>.
  16. Be $\delta$ -pecypc: <https://scaps.elis.ugent.be/>.
  17. Burgelman, M., Nollet, P., & Degraeve, S. (2000). Modelling polycrystalline semiconductor solar cells. *Thin solid films*, 361, 527-532.
  18. Burgelman, M., Nollet, P., & Degraeve, S. (2000). Modelling polycrystalline semiconductor solar cells. *Thin solid films*, 361, 527-532.



19. Burgelman, M., Verschraegen, J., Minnaert, B., & Marlein, J. (2007). Numerical simulation of thin film solar cells: practical exercises with SCAPS. In Proceedings of NUMOS (Int. Workshop on Numerical Modelling of Thin Film Solar Cells, Gent (B), Gent. 2007. UGent & Academia Press.
20. Burgelman, M., Verschraegen, J., Degraeve, S., & Nollet, P. (2004). Modeling thin-film PV devices. Progress in Photovoltaics: Research and Applications, 12(2-3), 143-153; Burgelman, M., Decock, K., Niemegeers, A., Verschraegen, J., & Degraeve, S. (2016). SCAPS manual. University of Ghent: Ghent, Belgium.
21. Meng, L., Wang, D., Li, Q., Yi, Y., Brédas, J. L., & Shuai, Z. (2011). An improved dynamic Monte Carlo model coupled with Poisson equation to simulate the performance of organic photovoltaic devices. The Journal of chemical physics, 134(12).
22. Brus V.V. On quantum efficiency of nonideal solar cells. Solar Energy. 2012 Vol. 86, No. 2. P. 786-791/
23. Mostefaoui, M., Mazari, H., Khelifi, S., Bouraiou, A., & Dabou, R. (2015). Simulation of high efficiency CIGS solar cells with SCAPS-1D software. Energy Procedia, 74, 736-744/
24. Matin, M. A., Amin, N., Zaharim, A., & Sopian, K. (2010). A study towards the possibility of ultra thin Cds/CdTe high efficiency solar cells from numerical analysis. WSEAS Transactions on Environment and Development, 6(8), 571-580.