

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)

20\_\_ р.

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА

на здобуття освітнього ступеня бакалавр

(бакалавр / магістр)

зі спеціальності 171Електроніка

(код та назва)

освітньо-професійної програми Електронні інформаційні системи

(освітньо-професійної / освітньо-наукової)

(назва програми)

на тему: Моделювання робочих характеристик фотоперетворювачів третього покоління

Здобувача групи EI-016

(шифр групи)

Новікова Максим Сергійовича

(прізвище, ім'я, по батькові)

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

Максим НОВІКОВ

(підпис)

(Ім'я та ПРІЗВИЩЕ здобувача)

Керівник Викладач к.ф.-м.н., Максим ІВАЩЕНКО

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

(підпис)

Консультант<sup>1)</sup>

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

(підпис)

## АНОТАЦІЯ

Мета дипломної роботи – моделювання робочих характеристик фотоперетворювачів третього покоління, дослідження і аналіз різних типів сонячних елементів, ознайомлення з їхніми перевагами та недоліками, розуміння їх можливого впливу на сучасну сонячну промисловість.

Обладнання, яке використовувалося під час виконання моделювання та аналізу робочих характеристик це – середовище для моделювання SCAPS, а також програмне забезпечення Origin 2022, яке використовувалося для побудови графіків з вихідних даних отриманих за допомогою попереднього ПЗ.

У роботі було розглянуто та проаналізовано різноманітні типи сонячних елементів, включаючи монокристалічні та полікристалічні сонячні елементи (СЕ), тонкоплівкові СЕ, на основі тонкої плівки CIGS, та перовскитові СЕ. Під час моделювання було зроблено акцент на СЕ, які використовують перовскитовий шар.

У ході проведених досліджень були визначені напруга холостого ходу  $U_{xx}$ , густина струму короткого замикання  $J_{kz}$ , фактор заповнення FF, коефіцієнт корисної дії приладу  $\eta$ , залежно від його конструктивних особливостей (товщини віконного та поглинального шарів); ширини забороненої зони  $E_g$ , залежно від концентрації Ga та I у сполуці CIGS у співвідношенні  $\frac{Ga}{Ga+I}$  та робочої температури. Отримані графіки ВАХ, ККД та квантової ефективності сонячного елемента з максимальною ефективністю.

Обсяг дипломної роботи становить 30 сторінок. У дипломній роботі використано 27 рисунків та 3 таблиці. Для написання було використано 27 літературних та інших наукових джерел.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** ТРЕТЄ ПОКОЛІННЯ, ПЕРОВСЬКИТ, МОНОКРИСТАЛ, ПОЛІКРИСТАЛ, CIGS, CdS, ВАХ, ККД, КВАНТОВА ЕФЕКТИВНІСТЬ, SCAPS 3307, Origin 2022.

## ЗМІСТ

<b>ВСТУП</b> .....	4
<b>РОЗДІЛ 1. ДОСЛІДЖЕННЯ ФОТОЕЛЕКТРИЧНИХ ПЕРЕТВОРЮВАЧІВ ТА ЇХ ХАРАКТЕРИСТИК</b> .....	5
1.1. Фізичні процеси, що характеризують фотоелектричне перетворення.....	5
1.2. Типи фотоелектричних перетворювачів.....	8
1.2.1. ФЕП на основі монокристалічного кремнію.....	8
1.2.2. ФЕП на основі полікристалічного кремнію .....	10
1.2.3. Тонкоплівкові ФЕП на основі селеніда міді, індія та галія (у вигляді тонкої плівки CIGS).....	11
1.2.4. Перовскитові сонячні елементи.....	13
<b>РОЗДІЛ 2. ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ РОБОЧИХ ХАРАКТЕРИСТИК ФОТОПЕРЕТВОРЮВАЧІВ</b> .....	16
2.1. Середовище AMPS.....	16
2.2. Середовище PC-ID.....	17
2.3. Середовище ASA .....	18
2.4. Програмне середовище SCAPS.....	18
<b>РОЗДІЛ 3. МОДЕЛЮВАННЯ, ВИСНОВКИ ТА ОБГОВОРЕННЯ</b> .....	21
3.1. Вибір базових параметрів для моделювання.....	21
3.2. Моделювання характеристик СЕ за поглинальним шаром.....	22
3.3. Моделювання характеристик СЕ за віконним шаром.....	23
3.4. Моделювання за концентраційними залежностями.....	25
3.5. Моделювання за температурною залежністю.....	26
<b>ВИСНОВКИ</b> .....	28
<b>СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ</b> .....	29

## ВСТУП

Зростаюча необхідність забезпечення енергетичних потреб суспільства та зменшення залежності від використання вугільно-паливних ресурсів та інших джерел енергії, які забруднюють навколишнє середовище та роблять країни залежними від енергетичних ресурсів інших країн, активізує пошуки та розробку альтернативних джерел енергії. Використання відновлювальних джерел енергії, включаючи сонячну, є ключовим напрямком у цьому контексті, оскільки вона вважається однією з найбільш екологічно чистих та безпечних. Елементи, що перетворюють сонячне випромінювання на електричну енергію, є ключовими технологіями у цій галузі.

Фотоелектричні сонячні елементи поділяються на різні покоління залежно від хімічного складу та технологічних особливостей їх виробництва. Крім того, як і у випадку з тонкоплівковими технологіями другого покоління на основі кремнію, у СЕ 3-го покоління будуть використовуватися матеріали, які є нетоксичними та необмеженими у кількості. Таким чином, технології третього покоління будуть сумісні з великомасштабним впровадженням фотоелектричних систем. У сонячних елементах 3-го покоління більше уваги приділяється механізму перенесення та збору заряду, а також удосконалюються механізми уловлювання енергії. Дослідження третього покоління включає в себе не тільки технології на основі перовскиту, які розглянуті у даній роботі, але й інші.

Актуальність досліджень сонячних елементів третього покоління та моделювання їх робочих характеристик полягає у їхній потенційній здатності забезпечити високу ефективність перетворення сонячної енергії в електричну. Розвиток нових технологій відкриває широкі можливості для відновлюваної енергетики та зменшення впливу людської діяльності на навколишнє середовище. Ця робота аналізує аспекти перетворювачів 1-го, 2-го та 3-го поколінь. Результати моделювання робочих характеристик ФЕП 3-го покоління можуть служити основою для подальших робіт у галузі фотоелектричних технологій та розвитку сонячної енергетики.

## РОЗДІЛ 1

### ДОСЛІДЖЕННЯ ФОТОЕЛЕКТРИЧНИХ ПЕРЕТВОРЮВАЧІВ ТА ЇХ ХАРАКТЕРИСТИК

#### 1.1. Фізичні процеси, що характеризують фотоелектричне перетворення

Сонячні елементи (СЕ) працюють завдяки фотоелектричним властивостям напівпровідникових матеріалів (рис.1.1), які конвертують сонячну енергію у електричний струм, на основі характеристик забороненої зони, використовуючи світло [1, 2].

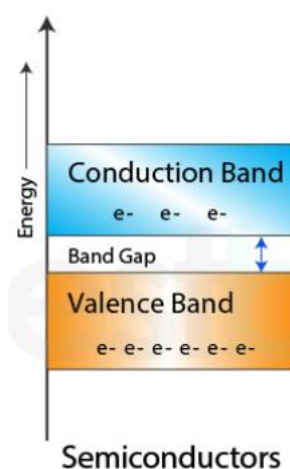


Рисунок 1.1 – Заборонена зона напівпровідників, з яких складається СЕ [3]

Сонячна комірка складається з шару кремнію р-типу, який знаходиться поруч із шаром n-типу (рис.1.2). Надлишок електронів розміщується у шарі n-типу, а в шарі р-типу – розміщуються позитивно заряджені дірки, вони вважаються вакансіями через відсутність валентних електронів. Поблизу з'єднання двох шарів, електрони з одного боку (шару типу n) переміщуються до дірок на іншому боці (шару типу p). Це створює область, відому як область виснаження, де електрони заповнюють дірки [3, 4, 5].

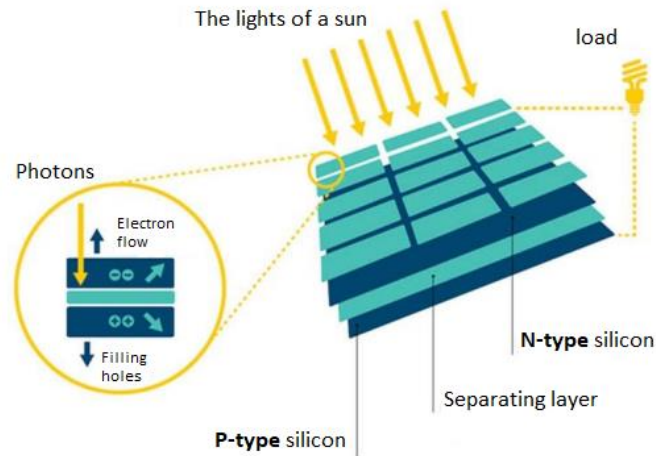


Рисунок 1.2 – Схематичне зображення сонячної батареї, що показує шари n-типу та p-типу [5]

Коли всі дірки в зоні виснаження, заповнені електронами, сторона зони виснаження типу p (де раніше були дірки) тепер містить негативно заряджені іони, а сторона зони виснаження типу n (де раніше були електрони) тепер містить позитивно заряджені іони. Ця наявність протилежно заряджених іонів створює внутрішнє електричне поле, яке перешкоджає електронам у шарі типу n заповнювати дірки в шарі типу p [1, 3, 5].

Під час опромінення зовнішнім джерелом світла, фотон потрапляє у світлочутливий матеріал, змушуючи матеріал збуджуватися та генерувати електронно-діркову пару, яка відокремлюється під дією електростатичної потенційної енергії та поглинається при контакті з електродом, генеруючи струм [3, 6]. У випадку, якщо це відбувається в електричному полі, поле сприяє переміщенню електронів до шару типу n і дірок до шару типу p. При з'єднанні шарів типу n і p металевим дротом, електрони направляються від шару типу n до шару типу p, проходячи через зону виснаження, а потім проходять через зовнішній дріт, створюючи потік електрики (рис.1.3) [1, 3, 5].

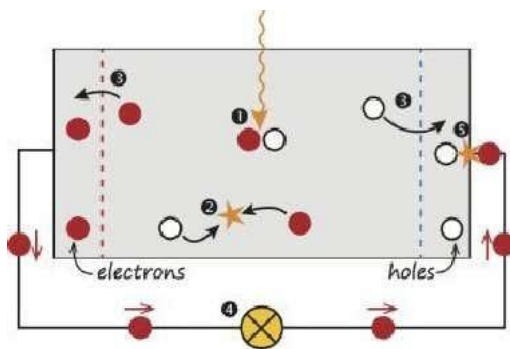


Рисунок 1.3 – Спрощена модель сонячної батареї [3]

Сонячні елементи зазвичай використовують напівпровідникові матеріали, такі як кремній (Si) або теллурид кадмію (CdTe), оскільки вони мають необхідні фізичні властивості для ефективного фотоелектричного перетворення. Напівпровідники мають широку заборонену зону, яка дозволяє їм легко абсорбувати фотони світла в видимому спектрі, а також достатньо провідний, щоб переносити створені електронно-діркові пари до збірних електродів [3, 4].

Для оцінки продуктивності сонячної комірки використовуються деякі основні параметри: щільність струму короткого замикання ( $J_{SC}$ ), напруга холостого ходу ( $V_{OC}$ ), коефіцієнт заповнення (FF), зовнішній квантовий вихід (EQE) та ефективність перетворення енергії (PCE). Де:  $J_{SC}$  – робочий струм сонячного елемента у стані короткого замикання (нульова вихідна напруга).  $V_{OC}$  — вихідна напруга сонячного елемента в стані розімкнутого ланцюга (нульовий вихідний струм). Вони вимірюються у світлі відомої довжини та потужності. FF — це коефіцієнт, що визначає ефективність сонячного елемента і виражається як відношення максимальної потужності, що може бути вироблена сонячним елементом, до потужності, яка б могла бути вироблена, якщо б всю його площу використали для вироблення електроенергії [5].

## 1.2. Типи фотоелектричних перетворювачів

В наш час широкого використання набули три типи фотоелектричних перетворювачів (ФЕП) та сонячних елементів на їх основі: ФЕП на основі монокристалічного кремнію, ФЕП на основі полікристалічного кремнію, тонкоплівкові ФЕП на основі селеніда міді, індія та галію (у вигляді тонкої плівки CIGS) та перспективного напрямку, що стрімко розвивається – перовскитових ФЕП.

### 1.2.1. ФЕП на основі монокристалічного кремнію

Монокристалічні сонячні панелі – це сонячні панелі, які складаються з монокристалічних сонячних елементів. Назва панелі походить від циліндричних заготовок кремнію, які вирощуються з високочистого монокристалічного кремнію тим же способом, що й напівпровідники, по методу Чохральського (рис.1.2.1.1.). Оскільки сонячна панель виготовлена з монокристалів, вона забезпечує електронам більше простору для переміщення та кращого проходження струму. Циліндричні заготовки ріжуться на пластини для формування блоків. Для підвищення ККД батареї, круглі пластини розрізаються на восьмикутні або квадратні пластини. Ці пластини мають унікальний зовнішній вигляд завдяки своєму восьмикутному формату і однорідному кольору (рис.1.2.1.2.). [5, 6]





Рис.1.2.1.1 – Метод Чохральського, за допомогою якого вирощують монокристал кремнію, для монокристалічних СЕ [7]

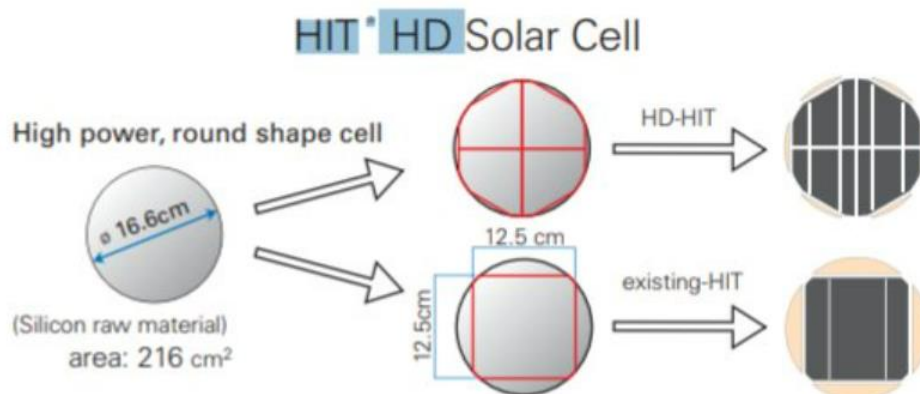


Рис.1.2.1.2 – Пластини монокристалу кремнію з яких складається СЕ [8]

Як вже зазначалося, сонячні панелі з монокристалічного кремнію отримали свою назву за методом їх виготовлення. Кожна сонячна панель містить кремнієву пластину, яка виготовлена з монокристалічного кремнію. Монокристали формуються за допомогою методу Чохральського, де "затравний" кристал розміщується у ванні з розплавленим чистим кремнієм при високих температурах. Після цього затравку витягують, і навколо неї утворюється розплавлений кремній, що утворює кристал (рис.1.2.1.1.). Великі кристали, також відомі як слитки, потім ріжуться на тонкі пластини і використовуються для виготовлення сонячних елементів. Зазвичай монокристалічна панель містить 60 або 72 сонячних елемента, залежно від розміру панелі. Більшість житлових будинків використовують монокристалічні панелі з 60 сонячними елементами (рис.1.2.1.3.) [6]



Рисунок 1.2.1.3 – Шестикутні монокристалічні СЕ на даху будинку [9]

### **1.2.2. ФЕП на основі полікристалічного кремнію**

Полікристалічні сонячні елементи є одними з найбільш поширених виробних типів сонячних панелей. Вони виготовляються шляхом відливання розплавленого кремнію у форму, що дозволяє вирощувати кристали з багатьох маленьких зерен кремнію. Цей процес формує структуру, в якій кристали різних орієнтацій знаходяться поруч, що дозволяє ефективно використовувати площу сонячного елемента [10].

У порівнянні з монокристалічними елементами, полікристалічні елементи мають меншу ефективність через наявність відстані між кристалами (більшу кількість дефектів), які можуть створювати перешкоди для руху електронів. Проте, полікристалічні панелі є більш доступними за вартістю, оскільки вони не вимагають такого складного процесу вирощування кристалів, який потрібний для монокристалічних панелей. Полікристалічні сонячні панелі здатні працювати в широкому діапазоні температур та умов освітлення, що робить їх більш універсальними. Крім того, вони можуть бути ефективними в умовах з менш інтенсивним сонячним світлом, такими як хмарні дні або вранці та ввечері, коли сонце знаходиться на невеликій висоті [11].

Незважаючи на меншу ефективність у порівнянні з монокристалічними панелями, полікристалічні сонячні панелі є популярним вибором для багатьох застосувань, де більша вартість монокристалічних панелей може бути нецільовою. Полікристалічні сонячні елементи виготовляються з використанням різноманітних матеріалів, але основною складовою зазвичай є кремній. Поміж іншими матеріалами, які можуть використовуватися для полікристалічних сонячних елементів, можна відзначити такі напівпровідникові матеріали, як кадмій та телурид кадмію (CdTe), а також різноманітні аморфні напівпровідникові матеріали. Ці матеріали можуть бути використані для створення тонких шарів, які мають високу ефективність перетворення сонячної енергії в електричний струм [10, 11].

### **1.2.3. Тонкоплівкові ФЕП на основі селеніда міді, індія, галія (у вигляді тонкої плівки CIGS)**

Ринок сонячних панелей в першу чергу представлений двома поколіннями сонячних елементів: домінуючим першим поколінням кристалічних кремнієвих елементів і новим другим поколінням тонкоплівкових фотоелектричних елементів. На відміну від кремнію, тонкоплівкові матеріали мають високий коефіцієнт поглинання, що дозволяє створювати набагато тонші шари — лише кілька мікрон порівняно з 200 мікронами кремнію, що призводить до зменшення затрат на виробництво. Технологія тонкої плівки має ключове значення для виробництва гнучких підкладок. Останні досягнення в технології Cu(In, Ga)Se (CIGS) призвели до високої ефективності, стабільної роботи та економічно ефективних методів виробництва [12].

Для створення поглинаючого шару CIGS використовуються різні методи осадження, включаючи спільне випаровування та магнетронне катодне розпилення. Останній метод, придатний для великомасштабного виробництва. Фотоелементи на основі CIGS складаються з кількох шарів, нанесених на скляну

підкладку, включаючи молібденовий електрод, поглинаючий шар CIGS, буферний шар CdS і електрод з оксиду алюмінію, легований цинком. Для забезпечення великомасштабного виробництва всі шари створюються за допомогою техніки магнетронного напилення, оскільки вона сумісна з великою площею поверхні [12].

Фотоелектричний елемент на основі CIGS (рис.1.2.3.1) складається зі стопки кількох тонких шарів різних матеріалів, нанесених на підкладку. Кожен матеріал має певну функцію. Починаючи з нижньої частини SE, розташовані підкладка, задній контакт, поглинач, буферний шар та віконний шар [12].

Зазвичай, як підкладка (Substrate-glass) використовується натрієво-вапняне скло. Його коефіцієнт теплового розширення майже відповідає коефіцієнту CIGS, мінімізуючи термічне навантаження під час виробництва плівки. Перевага скла полягає в тому, що воно має натрій, необхідний для правильної роботи комірки.

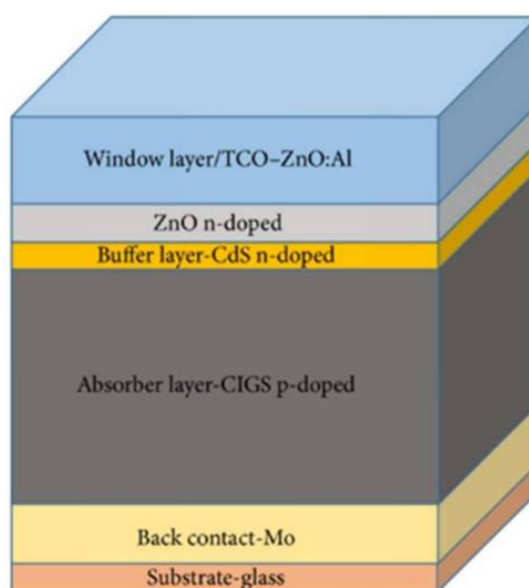


Рис.1.2.3.1 – Вигляд стандартної комірки сонячного елемента на основі CIGS [12]

Задній контакт з молібдену (Back contact-Mo) є ключовим компонентом у конструкції фотоелектричних елементів. Він наноситься на скляну підкладку (Substrate-glass) за допомогою методів розпилення, як правило, товщиною близько 500 нм. Відіграючи роль заднього електроду, ця плівка відіграє роль у зборі

носіїв, які генерує комірка. Морфологія шару Мо дозволяє ефективно мігрувати натрію зі скляної підкладки до шару поглинача, для правильної роботи комірки [12].

Поглинаючий матеріал (CIGS) відіграє вирішальну роль у захопленні сонячного випромінювання. Хімічний склад цього напівпровідникового матеріалу змінюється залежно від співвідношення індію та галію, починаючи від  $\text{CuInSe}_2$  до  $\text{CuGaSe}_2$ . CIGS за своєю суттю є напівпровідником p-типу, його власне легування досягається через утворення дефектів, таких як вакансії міді, тоді як заміщення індію та галію змінює його заборонену зону. CIGS особливо добре підходить для сонячного поглинання, маючи заборонену зону від 1,014 eV для  $\text{CuInSe}_2$  до 1,697 eV для  $\text{CuGaSe}_2$ . Крім того, він має високий коефіцієнт поглинання, що дозволяє ефективно використовувати його в тонких плівках із широким спектром поглинання для товщини близько 2 мкм. Як правило, комірки складаються із співвідношенням  $\text{Ga}/(\text{Ga} + \text{In})$  приблизно 0,3, що відповідає ширині забороненої зони в діапазоні 1,1–1,2 eV [12].

Буферний шар ( $\text{CdS}$ ), як правило, складається з сульфїду кадмію ( $\text{CdS}$ ), який є напівпровідником n-типу в p–n гетеропереході, утвореному між CIGS і  $\text{CdS}$ , це з'єднання дозволяє розділити носії заряду. Як правило, він осаджується в хімічній ванні, оскільки кадмій є токсичним елементом, також вивчаються інші матеріали для заміни такі як:  $\text{Zn(O,S)}$  та  $\text{InS}$ .

Віконний шар ( $i\text{ZnO}/\text{ZnO}:\text{Al}$ ), служить верхнім електродом у фотоелектричних елементах та відповідає за збір носіїв. Як правило, цей шар складається з двох матеріалів, нанесених напиленням. Власне, внутрішній оксид цинку ( $i\text{ZnO}$ ), який діє як напівпровідник n-типу, наноситься тонким шаром приблизно 50 нм, щоб мінімізувати електронні втрати, а легований алюмінієм оксид цинку (AZO) наноситься більш товстим шаром від 200 до 400 нм та функціонує як прозорий провідний оксид (TCO) і використовується для збору носіїв заряду [12].

### 1.2.4. Перовскітові сонячні елементи

Перовскитний сонячний елемент (рис.1.2.4.1) – це тип сонячного елемента, який включає в себе структуру перовскиту, найчастіше гібридний органічний або неорганічний матеріал на основі галогеніду свинцю або олова в якості світлозбираючого активного шару. Перовскитні матеріали дешеві у та прості у виробництві [13].

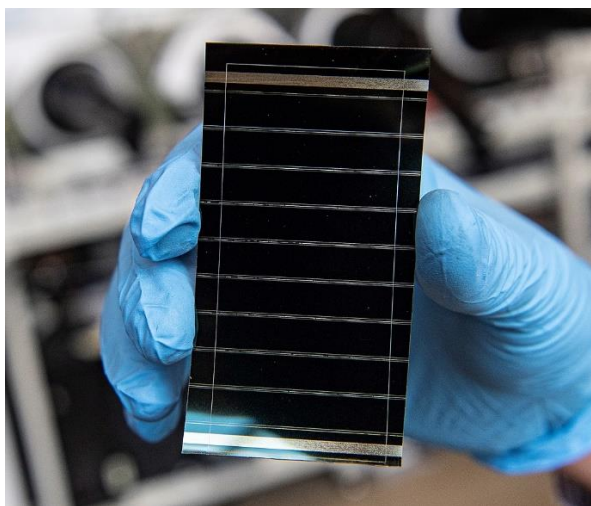


Рис.1.2.4.1 – Перовскитний сонячний елемент [15]

ККД сонячних елементів у лабораторних зразків, збільшилися з 3,8% у 2009 році до 25,7% у 2021 році в одноперехідних структурах та у тандемних елементах на основі кремнію до 29,8%, перевищуючи максимальний ККД, досягнутий в одноперехідних кремнієвих сонячних елементах. Таким чином, станом на 2016 рік сонячні елементи на основі перовскіту були перспективною технологією, що швидко розвивається. До основних проблем та предметів досліджень відносяться їх короткострокова та довгострокова стабільність [13, 14].

Сировина, що використовується для виробництва, і методи виготовлення (наприклад, різні методи фотодруку) є недорогими. Їх високий коефіцієнт поглинання дозволяє ультратонким плівкам пероксиду, завтовшки, близько, 500 нм, поглинати весь видимий сонячний спектр. У сукупності, ці особливості дозволяють створювати недорогі, високоефективні, тонкі, легкі та гнучкі сонячні модулі (рис.1.2.4.2) [14, 18].



Рис.1.2.4.2 – Перовскітний сонячний модуль [16]

Перовскитні елементи також мають багато оптоелектричних властивостей, які дозволяють використовувати їх в сонячних елементах. Наприклад, енергія зв'язку ексітону (електронно-діркова пара) мала. Це дозволяє діркам та електронам легко розділитися при поглинанні фотона. Більш того, велика відстань дифузії носія заряду і швидкість дифузії дозволяють носіям заряду переміщатися на великі відстані всередині сонячного перовскитного елемента, що підвищує ймовірність його поглинання і перетворення в енергію. Нарешті, перовскитні елементи мають високі коефіцієнтами поглинання, що ще більше збільшує енергоефективність сонячного елемента за рахунок збільшення діапазону енергій фотонів, що можуть бути поглинуті [13, 18].

Перовскити можна наносити у вигляді тонких епітаксійних плівок поверх інших перовскитів (рис.1.2.4.3) з використанням таких методів, як імпульсне лазерне осадження та молекулярно-променева епітаксія. Унікальні структури на межах поділу можуть бути використані для розробки нових приладів.

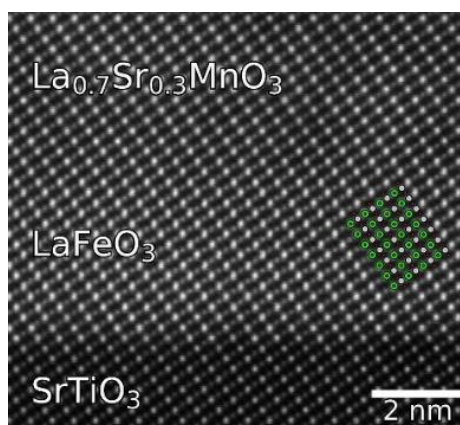


Рис.1.2.4.3 – Тонка плівка багатошарового перовскиту, отримане за допомогою просвічуючого електронного мікроскопа [17]

Межа Шоклі-Кейссера обмежує максимальну теоретичну ефективність сонячних батарей з використанням одного переходу без будь-яких втрат. 1,34 eV – найбільш ефективна заборонена зона та має максимальну ефективність перетворення енергії у 33,7%. Використання перовскитних сонячних елементів дозволяє наблизитися до цього значення, надаючи гнучкість, відповідну цій енергії. Експерименти з багатоперехідними сонячними елементами дозволяють перевищувати межу Шоклі-Кейссера, розширюючи її і дозволяючи поглинати та конвертувати фотони широкого спектру без збільшення теплових втрат [18].

## РОЗДІЛ 2

### ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ РОБОЧИХ ХАРАКТЕРИСТИК ФОТОПЕРЕТВОРЮВАЧІВ

Для числового моделювання робочих характеристик фотоелектричних перетворювачів на сучасному етапі використовують різноманітні програмні пакети, такі як AMPS [19], PC-1D [20], ASA [21], SCAPS [22]. У нашій роботі для проведення числового моделювання ми вибрали пакет SCAPS. Цей вибір зумовлений можливістю врахування як індивідуальних властивостей шарів напівпровідників, так і рекомбінаційних процесів, що відбуваються на міжфазній границі. Така гнучкість і можливість детального врахування процесів на рівні



міжфазної границі роблять SCAPS оптимальним вибором для нашої процедури моделювання.

## 2.1. Середовище AMPS

AMPS (аналіз мікроелектронних та фотонних структур) [19] – це програмний пакет, який чисельно розв’язує три основні рівняння, що описують поведінку напівпровідникових пристроїв: рівняння Пуассона, рівняння неперервності для електронів та дірок (рис.2.1.1). Цей метод розв’язання не базується на будь-яких передумовах щодо механізмів транспорту в цих пристроях. Завдяки своїй загальній та точній природі, AMPS може бути успішно використаний для аналізу різноманітних структур пристроїв, включаючи:

- Гомо- та гетеропереходи типів p-n і p-i-n, що використовуються у фотоперетворювачах та детекторах;
- Гомо- та гетероперехідні мікроелектронні структури типів p-n, p-i-n, n-i-n та p-i-p;
- Багатокомпонентні фотоелектричні перетворювачі;
- Багатокомпонентні мікроелектронні структури;
- Композиційно-градуїзовані детектори та сонячні елементи;

Використання програмного пакету AMPS дозволяє отримати різні квантові виходи, такі як темнові та світлові вольт-амперні характеристики, які можуть бути розраховані як функція температури. Для сонячних елементів та детекторних структур також можна отримати ефективність використання колекторів як функцію напруги, зміщення світла та температуру. Окрім цього, AMPS надає інформацію про розподіл електричного поля, концентрацію носіїв заряду, рекомбінаційні профілі та індивідуальні густини струму носіїв, залежно від геометричного положення. Враховуючи універсальність AMPS, він може бути використаний для аналізу транспорту в різних пристроях, що містять комбінації

кристалічних, полікристалічних або аморфних шарів. AMPS розроблено для аналізу, проектування та оптимізації структур, які призначені для мікроелектронних, фотоелектричних або оптико-електронних застосувань.

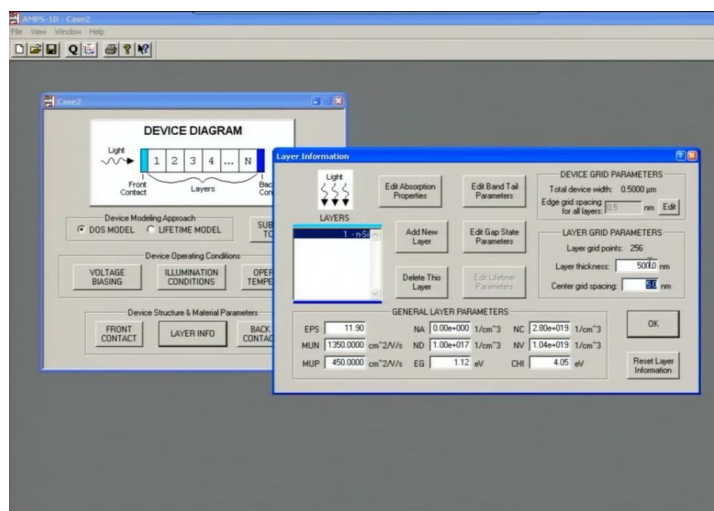


Рисунок 2.1.1 – Інтерфейс програмного забезпечення AMPS [19]

## 2.2. Середовище PC-1D

PC-1D – це програмний пакет для персональних комп'ютерів, який використовує кінцево-елементний аналіз для вирішення проблем побудови вольт-амперних характеристик у одновимірних просторових масивах (рис.2.2.1). Згідно з висловлюванням автора [20], ця програма є особливо корисною для аналізу ефективності оптоелектронних пристроїв, таких як фотоелектричні перетворювачі, але вона може бути застосована до будь-якого біполярного пристрою, де потоки носіїв заряду є переважно одновимірними [20].

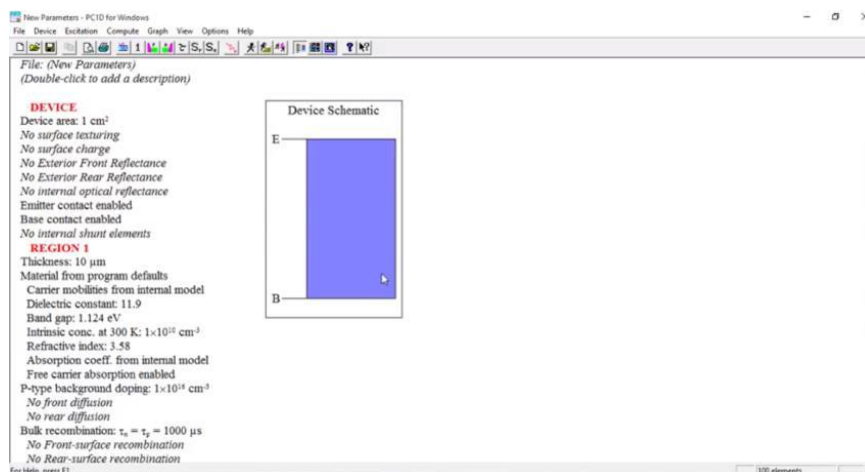


Рисунок 2.2.1 – Інтерфейс програмного забезпечення PC-1D [20]

### 2.3. Середовище ASA

Програмний пакет ASA (Advanced Semiconductor Analysis) [21] призначений для моделювання пристроїв, що базуються на аморфних та кристалічних напівпровідниках. Це програмне середовище розв'язує основні напівпровідникові рівняння у одновимірній формі (рівняння Пуассона та два рівняння неперервності для електронів і дірок) та використовує концентрацію вільних електронів, концентрацію дірок і електростатичний потенціал  $\psi$  як змінні величини.

### 2.4. Програмне середовище SCAPS

SCAPS, або симулятор ефективності фотоелектричного перетворювача [22], є програмним середовищем з двовимірною структурою, розробленим дослідниками кафедри електроніки та інформаційних систем (ELIS) Університету Гента, Бельгія. Початково SCAPS було створено для моделювання сонячних батарей типу  $\text{CuInSe}_2$  і  $\text{CdTe}$ , але завдяки численным оновленням цей симулятор може використовуватися як універсальний полікристалічний тонкоплівковий симулятор пристроїв для моделювання сонячних елементів CZTS, CGS, CIGS, крім кристалічних сонячних елементів (сімейство Si і GaAs) та аморфних фотоперетворювачів (a-Si і мікрморфних Si). Деякі з його основних функцій включають наступне: 1) Майже всі фізичні

параметри можна класифікувати у новому вікні за необхідності; 2) Можливість оцінювання стаціонарної смуги діаграми, профілю рекомбінації та транспортування носіїв; 3) Параметри змінної напруги, температури та освітлення; 4) Можливість розрахунку концентрацій та струмів в заданих робочих точках, J-V, C-V, C-f і Q-V залежностей, струмових залежностей, спектральних характеристик; 5) Можливість моделювання фотоелектричних перетворювачів зі зміною коефіцієнтів поглинання поглинального шару; 6) Можливість обчислення одиничних і двійкових значень; 7) Можливість виводу та експортування кінцевих та проміжних значень, графіків та інших важливих даних.

Ми обрали цей програмний пакет для проведення процедури моделювання через його унікальні можливості врахування індивідуальних властивостей напівпровідникових шарів та процесів рекомбінації, що відбуваються на міжфазній границі.

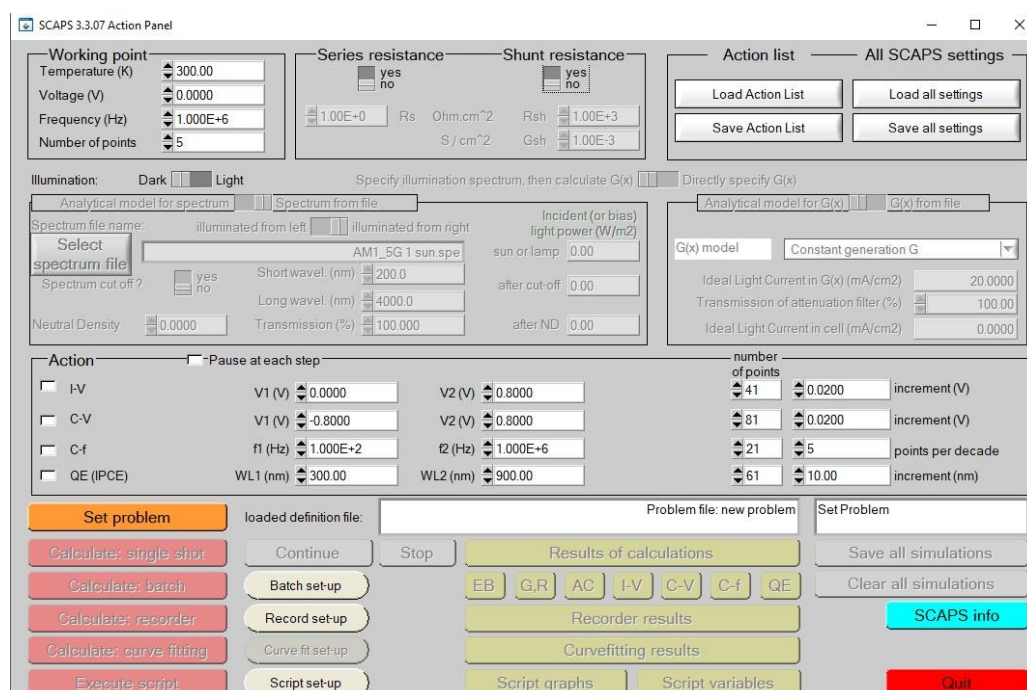


Рисунок 2.4.1 – Панель вводу вихідних даних, програмного середовища SCAPS [22]

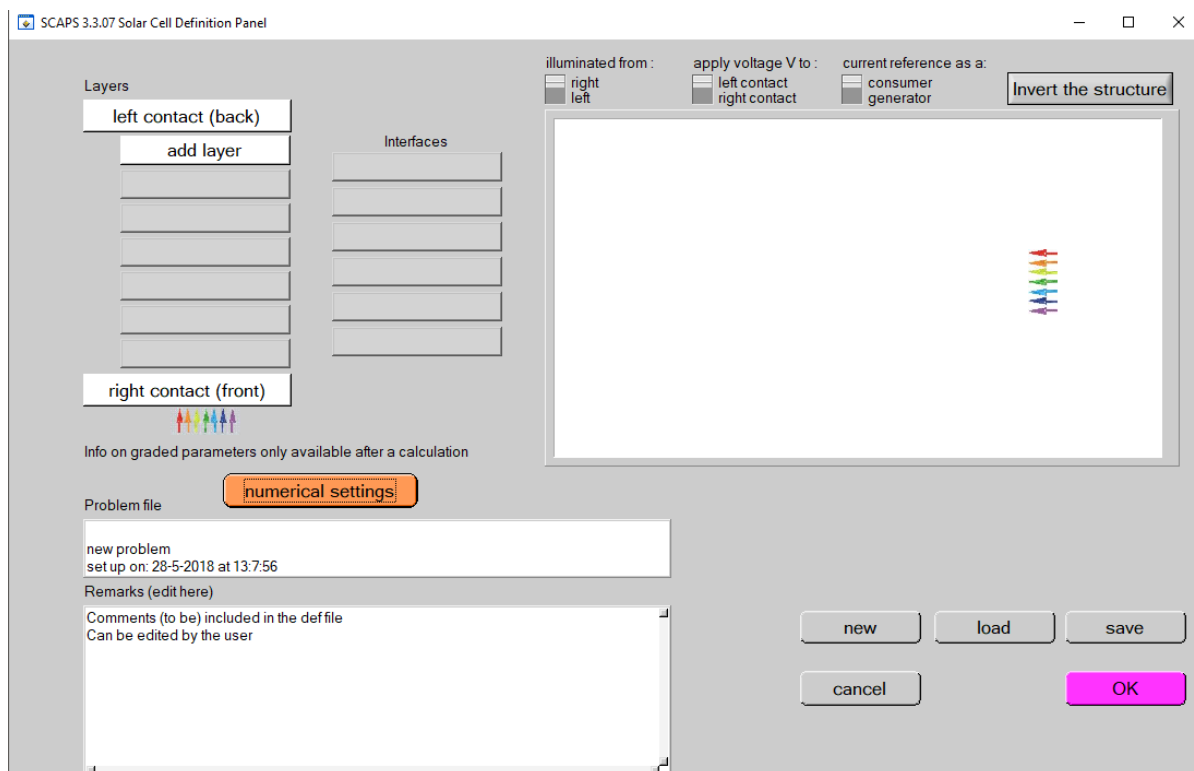


Рисунок 2.4.2 – Панель-конструктор комірки СЕ [22]

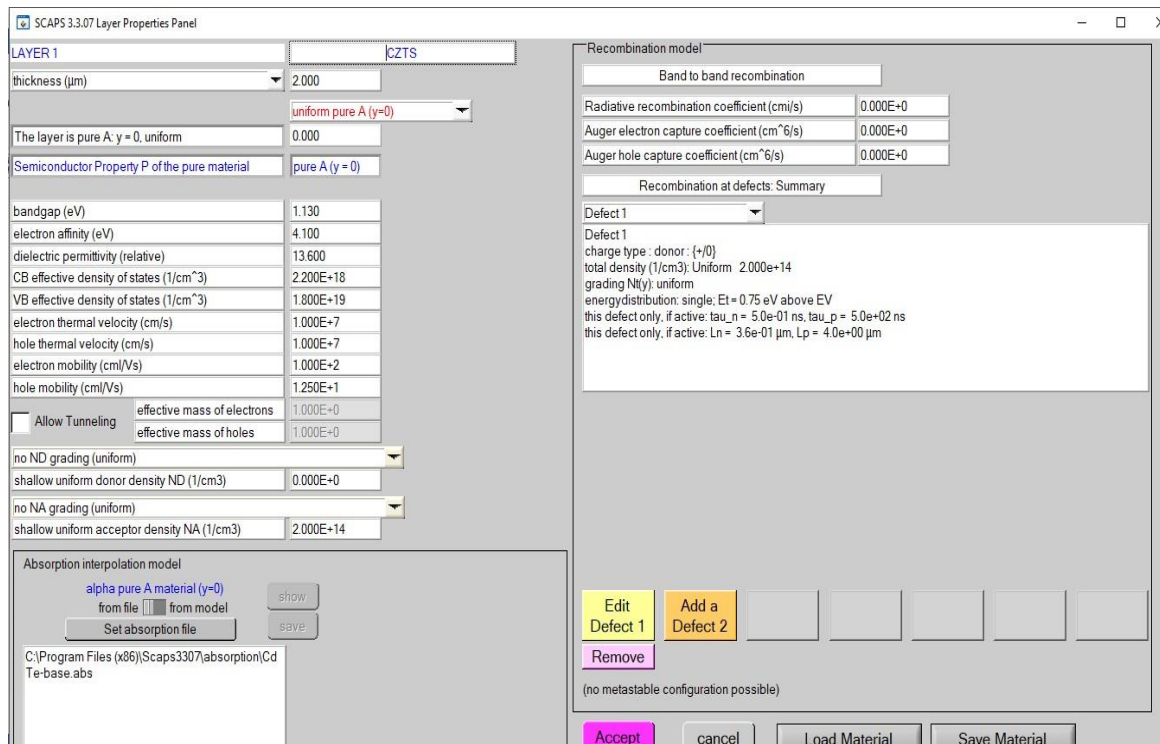


Рисунок 2.4.3 – Панель вихідних даних окремих шарів комірки СЕ [22]

## РОЗДІЛ 3

## МОДЕЛЮВАННЯ, ВИСНОВКИ ТА ОБГОВОРЕННЯ

## 3.1. Вибір базових параметрів для моделювання [23]

Таблиця 3.1

## Вхідні параметри моделювання

Параметр	CIGS	OVC	CdS	i-ZnO
Товщина (мкм)	1-4	0.015	0,05-0,25	0.080
Band Gap (eV)	1.03-1.68	1.450	2.450	3.400
Electron affinity (eV)	4.500	4.500	4.450	4.550
Dielectric permittivity (relative)	10.000	10.000	10.000	10.000
CB effective density of states (cm <sup>-3</sup> )	2.000E+18	2.000E+18	2.000E+18	4.000E+18
VB effective density of states (cm <sup>-3</sup> )	2.000E+18	2.000E+18	1.500E+19	9.000E+18
Electron thermal velocity (cm/S)	1.000E+7	1.000E+7	1.000E+7	1.000E+7
Hole thermal velocity (cm/S)	1.000E+7	1.000E+7	1.000E+7	1.000E+7
Electron mobility (cm <sup>2</sup> /V.S)	5.000E+1	1.000E+0	5.000E+1	5.000E+1
Hole mobility (cm <sup>2</sup> /V.S)	2.000E+1	1.000E+0	2.000E+1	2.000E+1

Моделювання проводилося умовах освітлення АМ 1,5 та при зміні температури від 240 К до 360К. Товщина поглинальний прошарку CIGS змінювалася у інтервалі dCIGS = (1-4) мкм, віконний – dCdS = (0,05-0,35) мкм. Спочатку змінювався перший параметр, після знаходження найбільшого ККД параметр фіксувався та не змінювався у подальшому, така процедура проводилася з кожним параметром послідовно, для того щоб знайти найбільший ККД сонячної комірки.

### 3.2. Моделювання характеристик СЕ за поглинальним шаром

Поглиналий шар є ключовим елементом сонячних елементів, оскільки він визначає, яку кількість світла може бути поглинута сонячною коміркою. На рисунках 3.2.1, рис.3.2.2, рис.3.2.3 і таблиці 3.2 наведені результати моделювання світлових характеристик сонячних елементів у залежності від товщини поглинального шару.

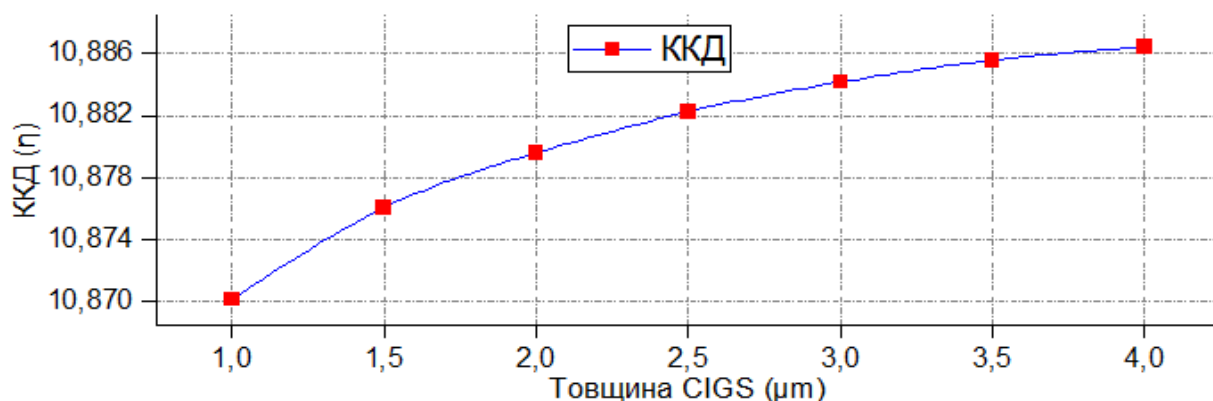


Рис.3.2.1 – ККД залежно від товщини поглинального шару CIGS

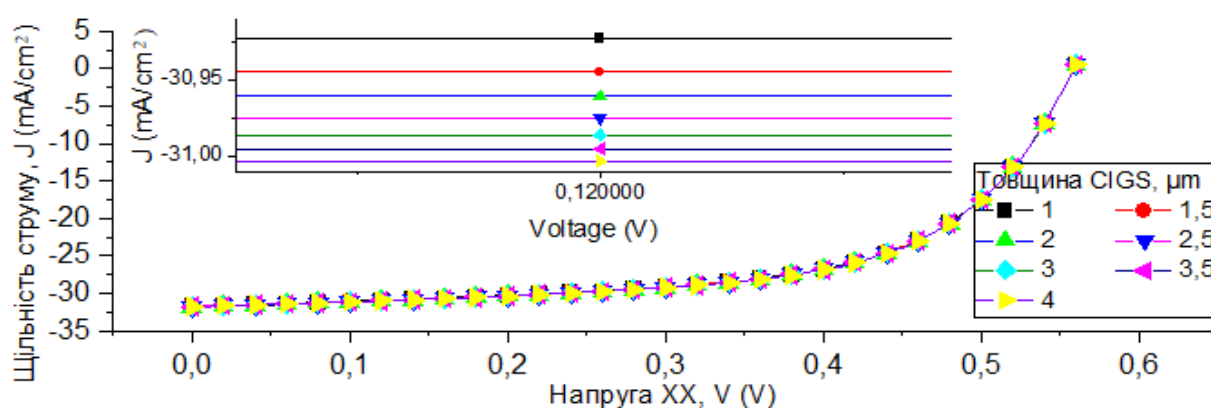


Рис. 3.2.2 – ВАХ залежно від товщини поглинального шару CIGS

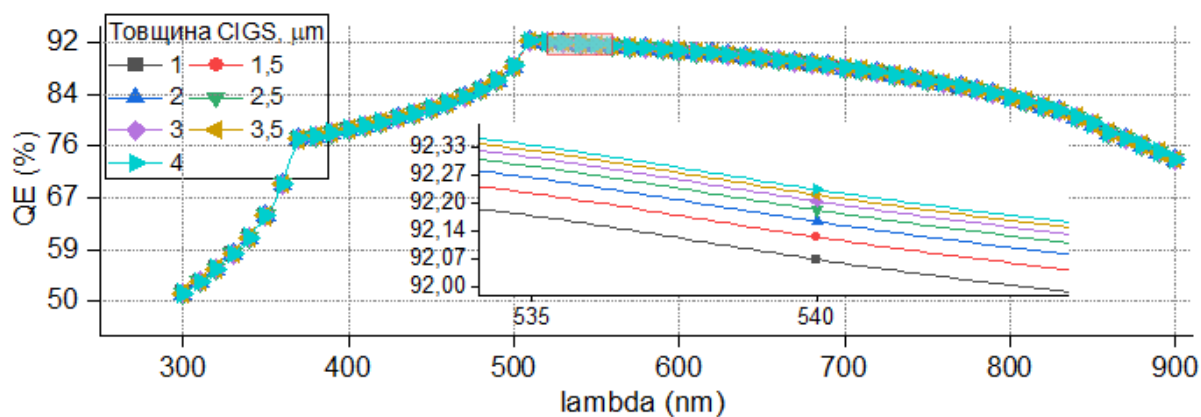


Рис. 3.2.3 – Квантова ефективність залежно від товщини поглинального шару

Таблиця 3.2

dCIGS	$U_{XX}$	$J_{K3}$	FF	$\eta$
3	0.5587	31.7501	61.3562	10.8845
4	0.5587	31.7682	61.3324	10.8869
5	0.5587	31.7824	61.3100	10.8881
6	0.5587	31.7942	61.2881	10.8885
7	0.5587	31.8040	61.2669	10.8883
8	0.5588	31.8129	61.2453	10.8877
9	0.5588	31.8201	61.2250	10.8868

З аналізу видно, що при збільшенні товщини прошарку  $dCIGS = 4$  мкм спостерігається деяке підвищення ККД СЕ до рівня 10.8885%. Це обумовлене збільшенням значення  $J_{K3}$  від 31.7501 до 31.8201  $mA/cm^2$ . При подальшому збільшенні товщини шару CZTS ефективність сонячного елемента починає зменшуватися. Це можна пояснити тим, що при товщині абсорбуючого шару 6 мкм відбувається повне поглинання світла сонячним елементом, і, відповідно, кількість створених електронно-діркових пар досягає насичення.

Якщо збільшувати товщини шару dCIGS надалі – це призведе до зростання послідовного опору приладу та віддалення області генерації носіїв від гетеропереходу і як наслідок до загального зниження коефіцієнта корисної дії приладу.

У випадку тонкого поглинального шару, буде збільшуватися рекомбінація створених носіїв на глибоких центрах, які розташовані на межі між поглинальним і струмознімальним контактами, в подальшому, це матиме вплив на зниження ефективності сонячного елемента.

### 3.3. Моделювання характеристик СЕ за віконним шаром

Товщина віконного прошарку у фотоелектронному пристрої є ключовою характеристикою, оскільки визначає кількість випромінювання, яка може досягти поглинального шару сонячного елемента. Тому оптимізація його товщини є необхідною. Результати моделювання світлових ВАХ, приладів з різною товщиною прошарку CdS, наведені на рис. 3.2.1, рис.3.2.2, рис.3.2.3 та таблиці 3.3.



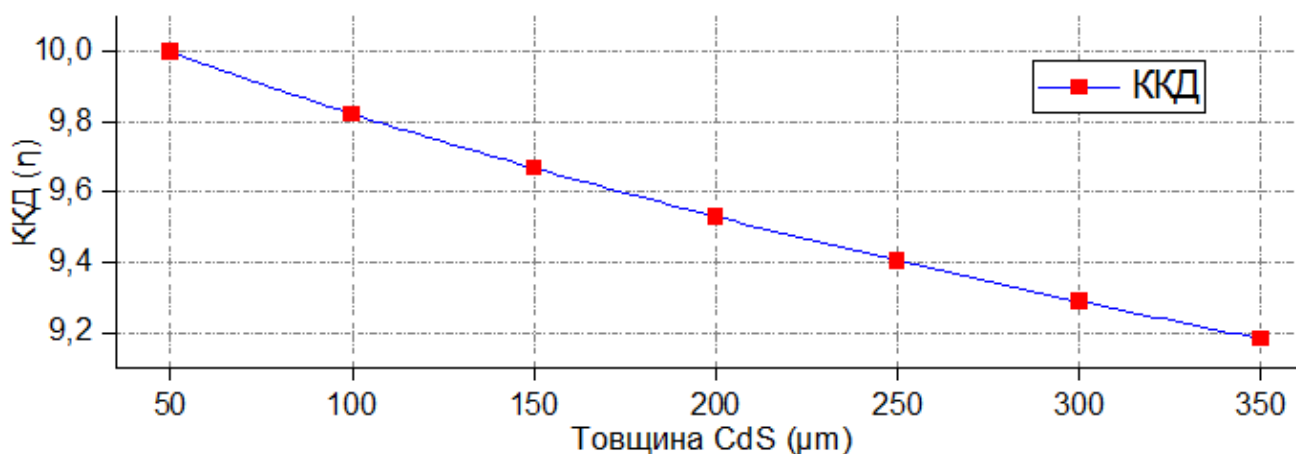


Рис. 3.2.1 – ККД, залежно від товщини віконного шару CdS

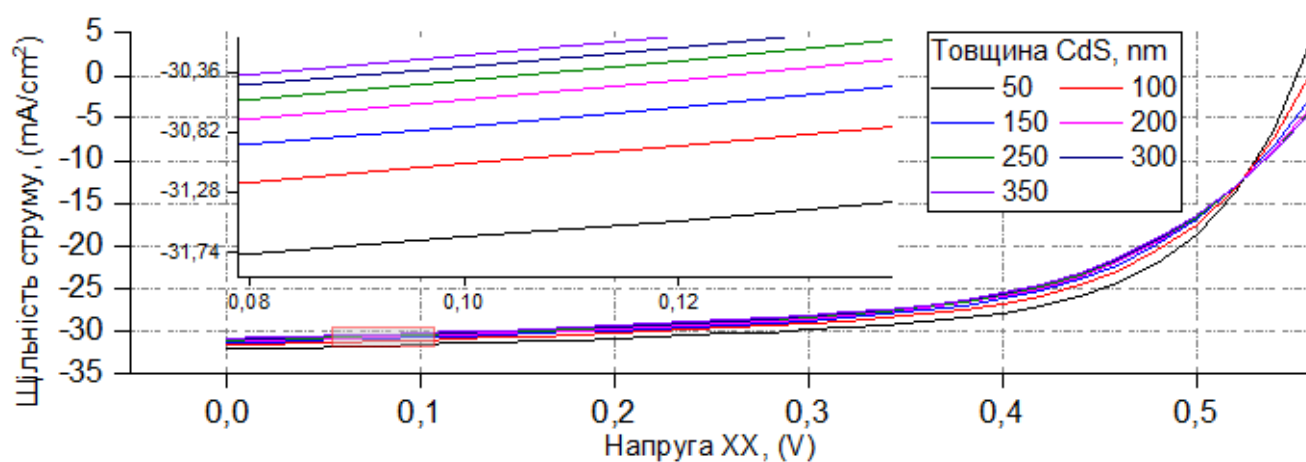


Рис. 3.2.2 – ВАХ, залежно від товщини віконного шару CdS

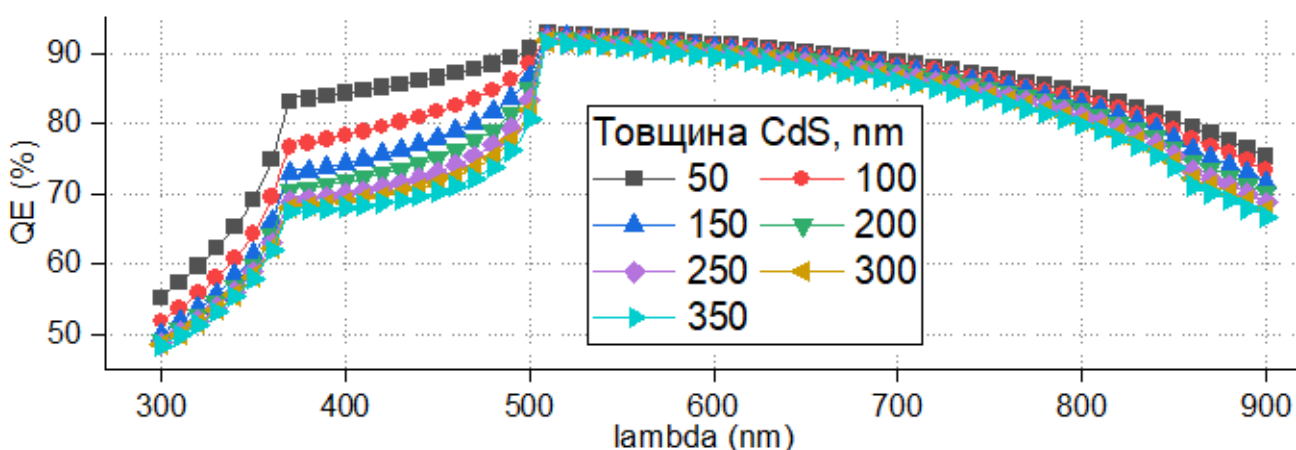


Рис. 3.2.2 – Квантовий вихід, залежно від товщини віконного шару CdS

Під час проведених розрахунків було виявлено, що зі зменшенням товщини віконного шару до 0,05 мкм спостерігається значне підвищення ККД

сонячного елемента. Моделювання процесів, що відбуваються у сонячних елементах, дозволило визначити оптимальні конструкційні характеристики реального фотоелектричного пристрою. Зокрема, було встановлено, що товщина віконного прошарку має складати 0,05 мкм.

### 3.4. Моделювання за концентраційними залежностями

Під час моделювання за концентраційними властивостями було виявлено, що при відношенні  $\frac{Ga}{Ga+I}$  у 0.71 та ширині забороненій зоні в 1.47eV спостерігалась максимальна ефективність приладу рис.3.3.1. Дані для моделювання за концентраційними залежностями наведені у таблиці 3.3 [24].

Таблиця 3.3

Sample No.	Cu	In	Ga	Se	Ratio Ga/Ga + In	$E_g$	
						300 K	4.2 K
1	25.2	24.9	0	49.9	0	1.03	1.050
2	24.8	23.8	2.1	49.4	0.08	1.07	1.095
3	25.3	22.1	2.4	50.2	0.10	1.09	1.110
4	25.0	19.9	5.1	50.0	0.20	1.14	1.165
5	25.5	18.1	6.2	50.2	0.25	1.17	1.191
6	25.2	16.4	7.4	51.0	0.31	1.21	1.235
7	23.9	16.1	7.9	52.1	0.33	1.22	1.240
8	25.7	16.1	9.1	49.1	0.36	1.23	1.260
9	24.8	12.8	12.3	50.1	0.49	1.32	1.350
10	25.3	7.8	19.1	47.8	0.71	1.47	1.500
11	24.9	3.7	23.2	48.2	0.86	1.57	1.602
12	25.1	0	24.8	50.1	1.00	1.68	1.722

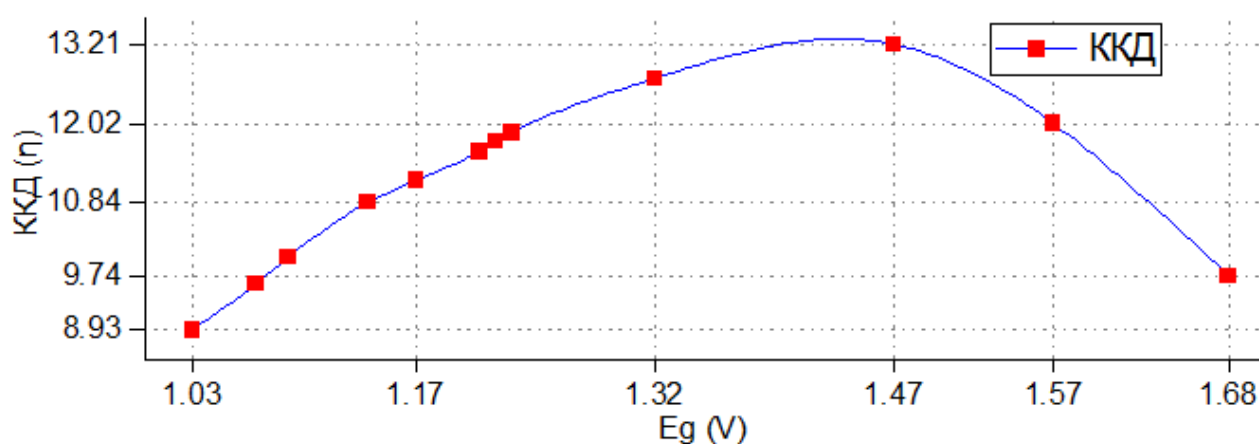


Рис. 3.4.1 – ККД сонячного елемента

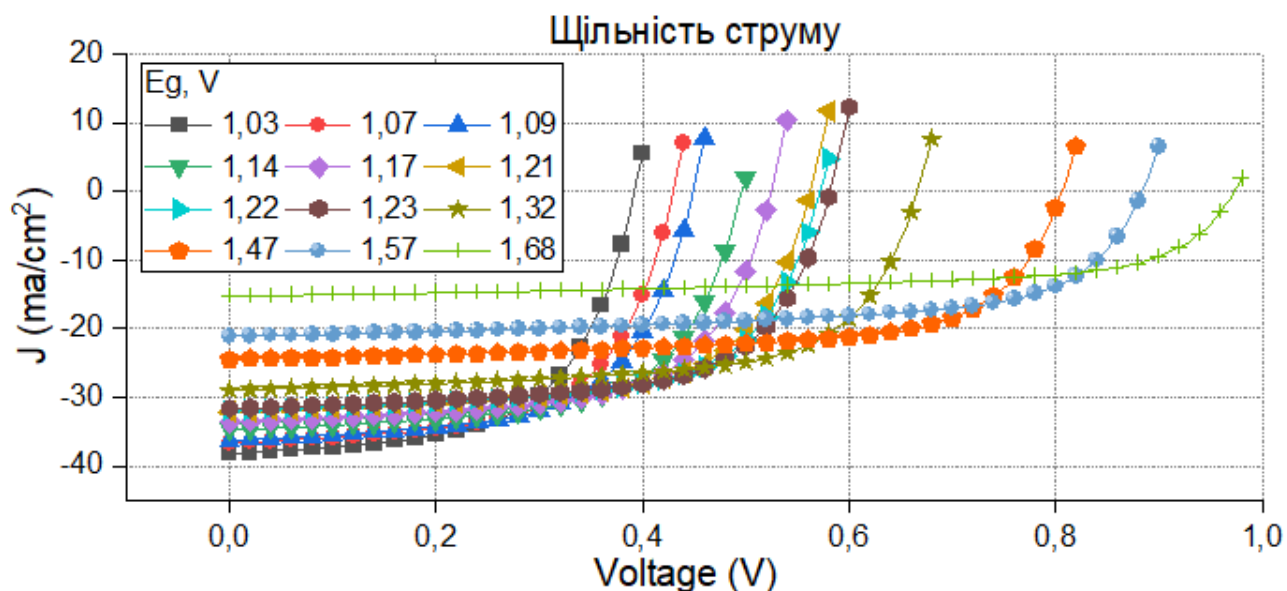


Рис.3.4.2 – ВАХ сонячного елемента

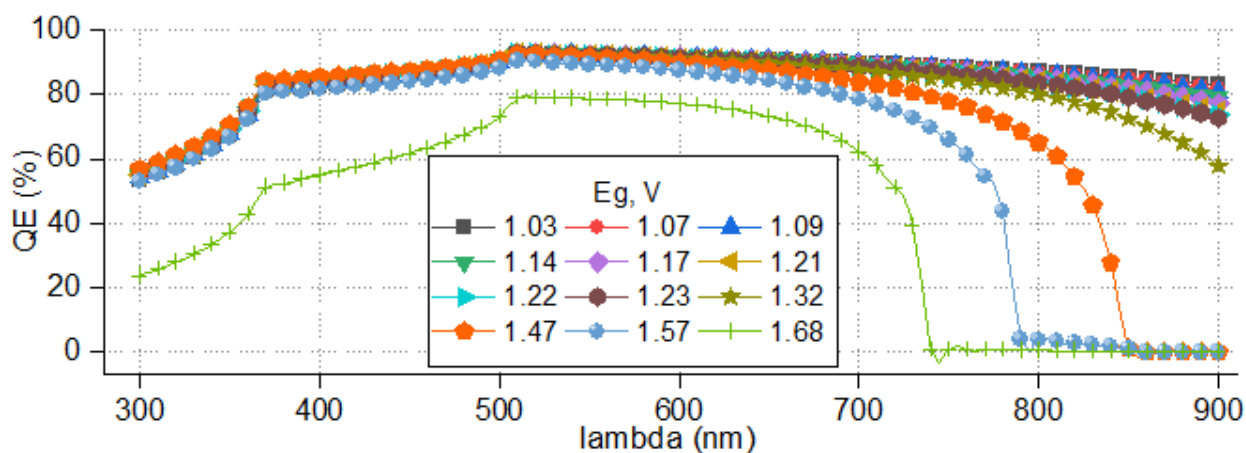


Рис.3.4.3 – Квантова ефективність СЕ

### 3.5. Моделювання за температурною залежністю

ККД сонячних елементів знижується зі збільшенням температури, через зменшення ширини забороненої зони СЕ, що у свою чергу призводить до зменшення напруги холостого ходу, збільшення швидкості рекомбінації внутрішніх носіїв заряду на межі поділу р-п переходу та, відповідно, зменшенню його опору самого переходу. На рис.3.5.1, рис.3.5.2, та рис.3.5.3 наведені результати моделювання ККД, ВАХ та квантової ефективності сонячного елемента відповідно.

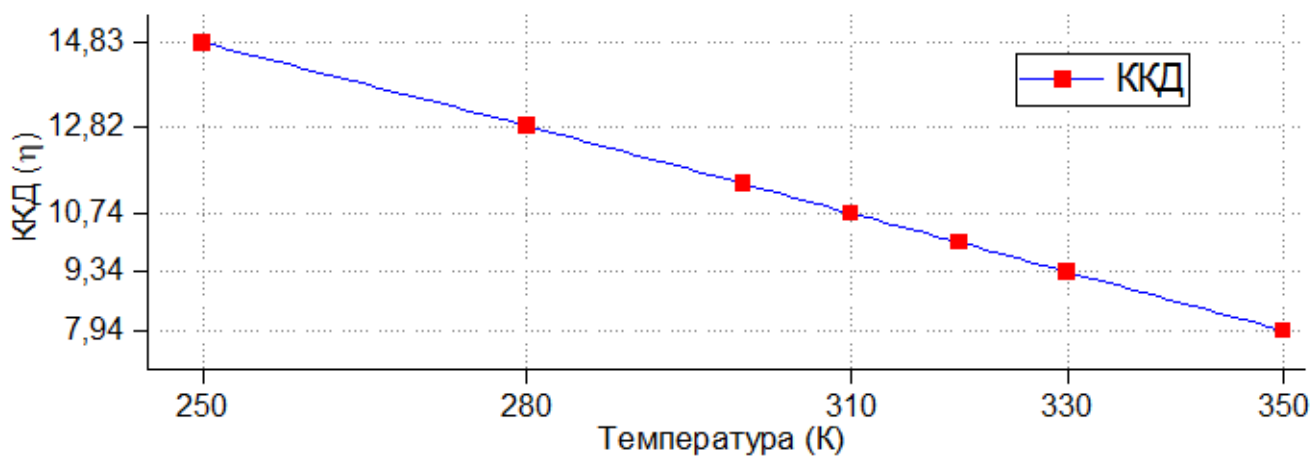


Рис. 3.5.1 – ККД сонячного елементу

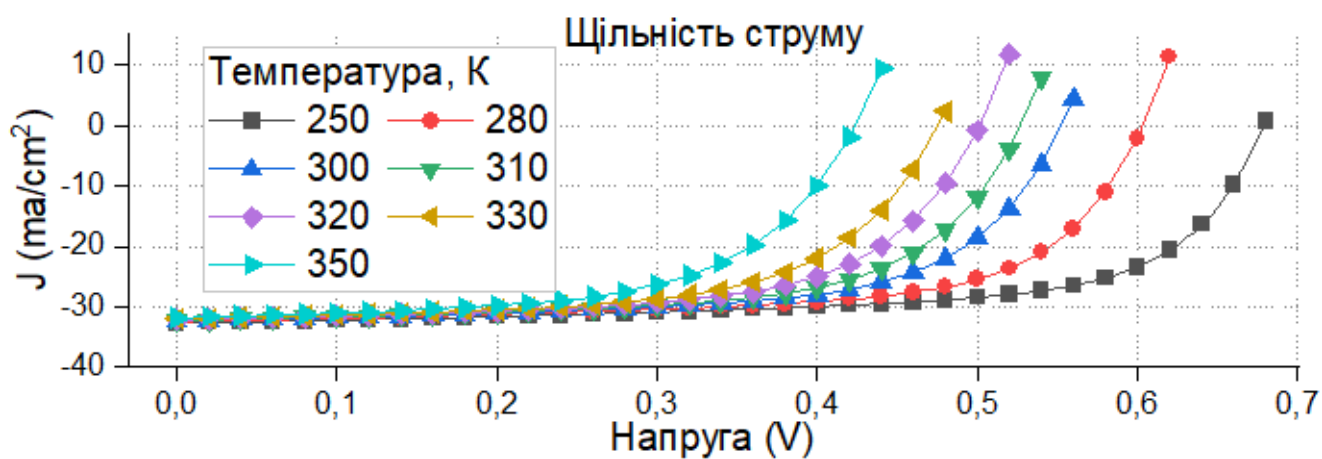


Рис. 3.5.2 – ВАХ сонячного елементу

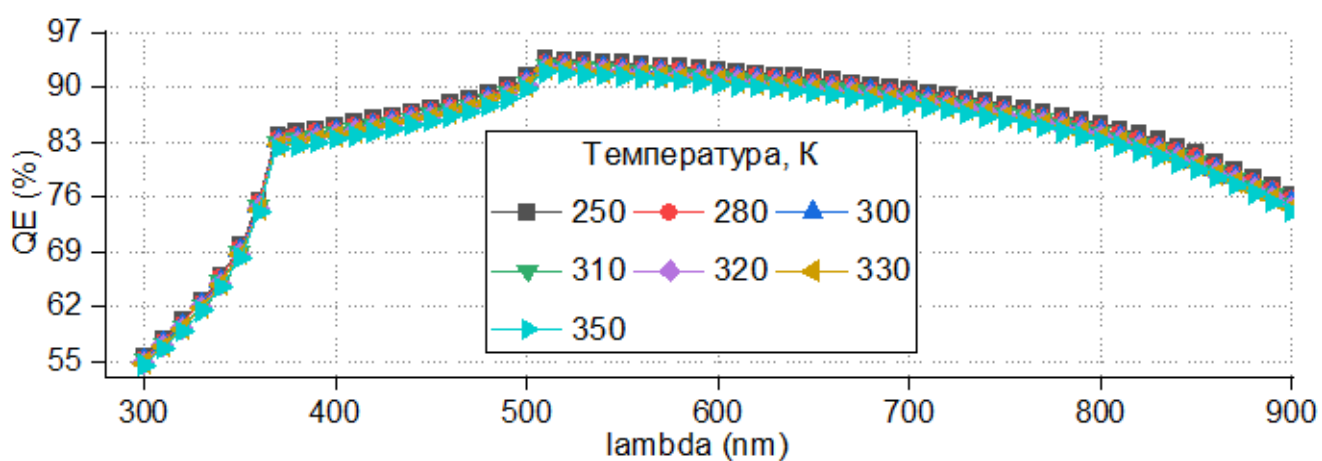


Рис. 3.5.2 – Квантова ефективність сонячного елементу

## ВИСНОВКИ

У ході роботи було одержано результати моделювання ВАХ, ККД та квантової ефективності сонячних елементів залежно від температури, концентраційної залежності  $\frac{Ga}{Ga+I}$ , товщини поглинального (CIGS) та віконного (CdS) шару.

Установлено, що найбільша ефективність сонячного елемента досягається при значеннях товщини поглинального шару – 6 $\mu$ m, віконного – 50nm, концентраційній залежності – 0,71 (забороненій зоні – 1,47 eV) та температурі 240K. Для моделювання робочих характеристик фотоперетворювачів третього покоління використовувалося програмне забезпечення scaps3309, побудови графіків – Origin2022.

Під час роботи розглянуто фізичні процеси, що характеризують фотоелектричне перетворення, різні типи фотоперетворювачів, включаючи моно- та полікристалічні ФЕП першого покоління, тонкоплівкові ФЕП другого покоління, на основі CIGS, та перовскитні ФЕП третього покоління, на базі яких і проводилося, відповідне, моделювання.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. W. Gopel, J. Hesse, J. N. Zemel, Principles of Photoelectric Conversion, VCH Verlagsgesellschaft mbH, P. 79-95, (1992)
2. Pilar Lopez-Varoa, Luca Bertoluzzi b, Physical aspects of ferroelectric semiconductors for photovoltaic solar energy conversion, P.37-40 (2016)
3. Arno Smets, Klaus Jager, Olindo Isabella Rene Van Swaaij, Miro Zeman, The physics and engineering of photovoltaic conversion, technologies and systems, P. 324, 534 (2015)
4. Juan Bisquert. The Physics of Solar Energy Conversion, First edition published 2020 by CRC Press 6000 Broken Sound Parkway NW, P. 295, 461(2020)
5. S. Streltsov, A. Shkarupa. ANALYSIS OF FEATURES OF SOLAR BATTERIES, Kharkiv Kharkiv National University of Radio Electronics, P.89-92 (2022)
6. Ahmad Taher Azar, Nashwa Ahmad Kamal. Design, Analysis and Applications of Renewable Energy Systems, ISBN 978-0-12-824555-2, P. 199-247 (2021)
7. <http://www.galaxywafer.com/galaxy/technology/crystal-growth/> дата надання доступу: 01.02.2024
8. Aya Alaa1, Arwa Mohamed1, Naira Essam1. Asmaa Abdelsalam, Empowering our future from the reversal of the seven segments. – Greater Cairo, P. 3 (2020)
9. <https://www.cgtrader.com/3d-models/electronics/other/hexagonal-pv-solar-panel-array> дата надання доступу 01.02.2024
10. Robert W. Birkmire and Erten Eser, POLYCRYSTALLINE THIN FILM SOLAR, CELLS: Present Status and Future Potential 1997.
11. L.A. Dobrzański, M. Szczęśna\*, M. Szindler, A. Drygala, *Electrical properties mono- and polycrystalline silicon solar cells* (2013)
12. Billel Salhi. The Photovoltaic Cell Based on CIGS: Principles and Technologies. –

Dhahran: King Fahd University of Petroleum and Minerals, 2022, – 27 p.

13. Joseph S., Jeffrey A., Prashant V. Journal of Kamat. Intriguing Optoelectronic Properties of Metal Halide Perovskites. - Indiana 46556, 2016, – 12956 p.

14. Akihiro Kojima, Kenjiro Teshima, Yasuo Shirai, Tsutomu Miyasaka, Journal of the American Chemical Society. - Graduate School of Arts and Sciences, - 2009, - 6050p.

15. <https://www.energy.gov/eere/solar/perovskite-solar-cells> дата надання доступу 01.02.2024

16. [https://www.marefa.org/w/images/e/e1/Perovskite\\_photovoltaic\\_module\\_at\\_SNEC\\_2023\\_PV\\_Power\\_Expo%2C\\_Shanghai.jpg](https://www.marefa.org/w/images/e/e1/Perovskite_photovoltaic_module_at_SNEC_2023_PV_Power_Expo%2C_Shanghai.jpg) дата надання доступу 01.02.2024

17. [https://en.wikipedia.org/wiki/Perovskite\\_\(structure\)#/media/File:Perovskite\\_oxide\\_tin\\_film.jpg](https://en.wikipedia.org/wiki/Perovskite_(structure)#/media/File:Perovskite_oxide_tin_film.jpg) дата надання доступу 01.02.2024

18. Ning Wang, Lin Zhang. Homogenous Alloys of Cesium Tin Triiodide for Efficient Ideal-Bandgap Perovskite Solar Cells// Angewandte Chemie, - 2017. – 12966-12970p.

19. Hong Zhu, Ali Kaan Kalkan, Jingya Hou and Stephen J Fonash. Applications of AMPS-1D for Solar Cell Simulation. – The Pennsylvania State University. – 1999. – 309p.

20. Paul A. Basore. PC-1D Installation Manual and User's Guide Version 6.1. – California. - Sandia National Laboratories. – 2015. – 82p.

21. Miro Zeman, Martin Kroon, Joost Willemen. Analysis opto-electronic simulator for amorphous. – Delft: Delft University of Technology, - 2019, - 120p.

22. Koen Decock, Alex Niemegeers. SCAPS manual. – Gent: University of Gent. – 2023.- 147p.

23. H. El Farri, M. Bouachri, M. Fahoume. Theoretical simulation of ZnS buffer layer thin films with SCAPS-1D software for photovoltaic applications. – Maroc. 2021. – 457p.

24. A. V. Mudryi, V. F. Gremenok. Structural and optical properties of thin films of Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> semiconductor compounds// Journal of Applied Spectroscopy, -2010,- 371p.