

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
КОНОТОПСЬКИЙ ІНСТИТУТ

Кафедра електронних  
приладів і автоматики

Кваліфікаційна робота бакалавра  
**МОДЕЛЮВАННЯ АНСАМБЛЮ ТОЧКОВИХ ДЕФЕКТІВ У ПЛІВКАХ  
СЕЛЕНІДУ ЦИНКУ**

Студент гр. ЕІ-71к

О.А. Камінський

Науковий керівник,  
к.ф.-м.н., ст. викладач

М.М. Іващенко

Конотоп 2021

## РЕФЕРАТ

Об'єктом дослідження дипломної роботи є моделювання ансамблю точкових дефектів в активному шарі селеніду цинку, які в подальшому впливають на робочі характеристики фотоелектричних перетворювачів.

Мета роботи полягає у знаходженні загальних закономірностей впливу ансамблю точкових дефектів на експлуатаційні параметри сонячних елементів.

При виконанні роботи використовувалася програма SCAPS 3201.

Визначені напруга холостого ходу  $U_{OC}$ , густина струму короткого замикання  $J_{SC}$ , фактор заповнення  $FF$ , коефіцієнт корисної дії приладу в залежності від його конструктивних особливостей (товщини приконтактного, поглинального шарів) та робочої температури. Встановлені параметри СЕ з максимальною ефективністю.

Робота викладена на 34 сторінках, у тому числі включає 8 рисунків, 7 таблиць, список цитованої літератури із 26 джерел.

ZnSe, ТОЧКОВИЙ ДЕФЕКТ, ФОТОПЕРЕТВОРЕННЯ, ВПЛИВ, МОДЕЛЬ АНДЕРСОНА.

## ЗМІСТ

	С.
<b>ВСТУП</b> .....	4
<b>РОЗДІЛ 1 ФІЗИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЛІВОК СЕЛЕНІДУ ЦИНКУ</b>	6
1.1. Фізичні властивості плівок селеніду цинку	6
1.2. Нано-структури на основі селеніду цинку .....	10
1.3. Використання селеніду цинку в сонячних модулях .....	11
1.4. Механізми зарядопереноса через гетероперехід.....	13
<b>РОЗДІЛ 2 МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕНЬ</b> .....	17
2.1. Розрахунок характеристик ансамблю точкових дефектів .....	17
2.2. Моделювання характеристик СЕ на основі ГП: основні підходи та принципи.....	19
<b>РОЗДІЛ 3 РЕЗУЛЬТАТИ ЧИСЛОВОГО МОДЕЛЮВАННЯ</b> .....	24
3.1 Вплив товщини активних шарів на кількість дефектів.....	24
3.2 Вплив товщини приповерхневого шару на кількість дефектів.....	26
3.3 Вплив робочої температури.....	27
<b>ВИСНОВКИ</b> .....	29
<b>СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ</b> .....	30

## ВСТУП

В наш час розробники виявляють велику зацікавленість до використання тонких плівок селеніду цинку [1-4]. Причина даного зацікавлення полягає в унікальному з'єднанні електро-фізичних і оптичних властивостей селеніду цинку (ZnSe). Плівки селеніду цинку характеризуються високою хімічною інертністю, стійкістю до кліматичних факторів, тому широко використовуються завдяки прозорості у видимій та інфрачервоній діапазонах спектру, для провідних поверхонь електричних з'єднань, буферних шарів тонкоплівкових сонячних елементів і пристроїв відображення інформації [5]. Допування плівок селеніду цинку дозволяє досягти питомого опору  $2 \cdot 10^{-4} \text{ Ом} \cdot \text{см}$ . Плівки селеніду цинку мають хороші п'єзоелектричні та електролюмінесцентні властивості, завдяки чому знаходять застосування в газових сенсорах, пристроях генерації поверхневих акустичних хвиль, фотодіодах, фотонних кристалах [6-9]. Плівки селеніду цинку використовуються як віконні, відзеркалюючі, захисні та струмознімальні шари дешевих фотоперетворювачів великої площі [18-19].

При створенні сонячних елементів особлива увага приділяється гетеропереходам n-ZnSe / p-CdS [20]. Це пов'язано з широкою областю fotocутливості цих структур, їх низькою вартістю і доступністю матеріалів гетеропари. Проте ККД елементів не перевищує 8% [21]. Збільшення продуктивності сонячних елементів може бути досягнуто за рахунок оптимізації властивостей окремих шарів і конструкції фотоперетворювачів. А це відбувається шляхом моделювання параметрів сонячних елементів з використанням програмного забезпечення. Для числового моделювання робочих характеристик фотоперетворювачів, виконаних на базі напівпровідникових плівок селеніду цинку, застосовується декілька програм (AMPS-1D, SCAPS-1D, PS-1D, ASA, AFORS-HET), але найбільш зручною для використання вважається програма SCAPS-1D [17,34]. Ця програма використовується для знаходження основних характеристик фотоперетворювачів сонячних елементів, фактора заповнення

вольт-амперної характеристики, струму короткого замикання, напруги холостого ходу при обрахуванні індивідуальних характеристик напівпровідникових шарів, що входять до складу фотоелементів і меж розділу гетеропереходів[24].

Мета дипломної роботи - числове моделювання впливу структурних дефектів на робочі характеристики фотоперетворювачів, виконаних на базі напівпровідникових плівок селеніду цинку. Отриманий розрахунок дозволяє вирішувати проблеми оптимізації структурних, електро-фізичних та оптичних властивостей сонячних елементів [17].

## РОЗДІЛ 1

### ФІЗИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПЛІВОК СЕЛЕНІДУ ЦИНКУ

#### 1.1. Фізичні властивості плівок селеніду цинку

Селенід цинку має найбільше поширення серед прозорих провідних селенідів. Він виявляє стабільність при високих температурах, має високу хімічну стійкість, витривалий до опромінення, нетоксичний і легко піддається хімічному травленню. Дуже важлива його перевага - відносна дешевизна. Однією з причин великого комерційного потенціалу ZnSe є можливість його використання на великих площах з рівномірним розподілом оптичних і електричних властивостей. Такі характеристики Селеніду цинку як провідність, концентрація носіїв та їх рухливість знаходять широке застосування в електроніці. ZnSe - це кристалічний прямозонний напівпровідник n-типу. При 300 К ширина його забороненої зони становить  $\sim 3,3$  eV [1]. За допомогою допування можна змінювати провідність і прозорість ZnSe. Для збільшення провідності використовують матеріали III групи (B, Al, Ga, In). Завдяки унікальним оптичним, електричним і електро-фізичним властивостям селенід цинку може застосовуватися в газовому сенсуванні, пристроях генерації поверхневих акустичних хвиль, фотодіодах, фотонних кристалах, в якості детекторного матеріалу для виявлення УФ-випромінювання (200 ... 320 нм) [1-5]. На основі ZnSe можна створювати економічні світлодіоди. Текстуровані плівки ZnSe можна використовувати як високоефективні електронні автоемітери [17].

Завдяки своїм електро-фізичним властивостям селенід цинку знаходить широке застосування при створенні оптико-електронних пристроїв - сонячних елементів та рідкокристалічних дисплеїв, фотодіодів та ін. електронних пристроїв, що пояснюється високою провідністю і прозорістю у видимій області спектра. Залежно від наявності різних допувань колір ZnSe змінюється від білого

до жовто-зеленого. Щільність з'єднання становить  $(5 \cdot 10^{-6} \pm 0,001)$  кг/м<sup>3</sup>[5].

Селенід цинку досить летючий,  $T_{заг} = 2073$  К, при цьому летючість ZnSe починає спостерігатися при температурі близько 1173К. При нагріванні Селенід цинку може змінювати колір. При кімнатній температурі він має білий колір, а при нагріванні — стає жовтим. Пояснюється це явище зменшенням ширини забороненої зони і переміщенням краю в спектрі поглинання з УФ-області в синю область видимого спектру[17, 18].

Елементарна ґратка ZnSe утворюється з'єднанням двох видів атомів: цинку (Zn) і селену (Se). Атоми кисню складають щільну гексагональну упаковку, а атоми цинку знаходяться в центрах тетраєдрів, утворених атомами кисню[6,17].

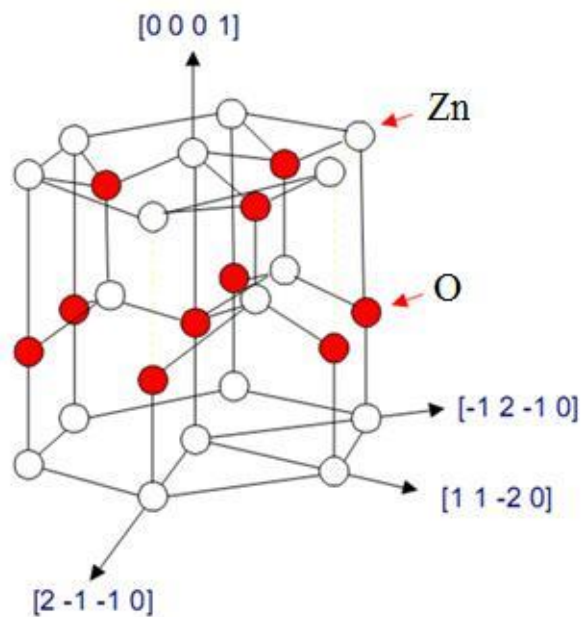


Рис.1.1. Комірка ZnSe [1]

Селенід цинку відносять до класу напівпровідників групи III-VI [3] , який кристалізується в ґратці типу вюрцит. Параметри ґратки напівпровідника залежать від:

- 1) концентрації вільних електронів, яка діє через потенціал деформації мінімуму зони провідності;
- 2) концентрації атомів допувань і дефектів та різниці їх іонних радіусів щодо заміщеного іона матриці;
- 3) зовнішніх деформацій;
- 4) температури.

Недосконалості або дефекти порушують періодичність ґратки. Ці недосконалості сильно впливають на механічні, теплові, електричні і оптичні властивості напівпровідників. Вони визначають пластичність, твердість, тепло- і електропровідність матеріалу[17].

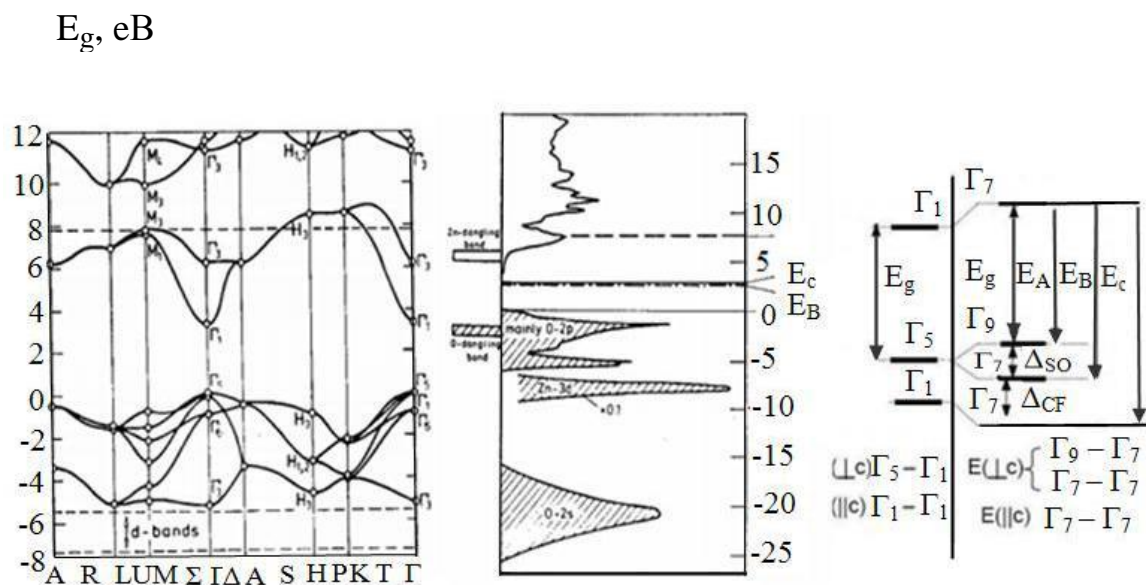


Рис. 1.2. Зонна структура (а), щільність станів (б) і розщеплення валентної зони (в) завдяки спин-орбітальній взаємодії в ZnSe. Нуль на графіках відповідає верхній межі зони валентності[17]



Напівпровідний матеріал ZnSe є для виготовлення пристроїв електроніки, тому аналіз його зонної структури є важливий для вивчення його електричних властивостей.

На рис. 1.2 зображена зонна структура селеніду цинку уздовж ліній високої симетрії зони Бріллюена. Для теоретичного отримання зонної структури застосували емпіричний гамільтоніан сильних зв'язків. В зонній структурі  $E(k)$  для ZnSe між зайнятими і вільними зонами ( $\Gamma_1$  і  $\Gamma_{1,5}$ ) знаходиться оптична заборонена зона  $E_g \approx 3,3$  eV [17].

Заборонена зона розраховується як різниця між енергією зайнятих зон і енергією порожніх електронних зон. Вільні зони, які знаходяться вище забороненої зони, називаються зоною провідності. Найнижча точка зони провідності називається межею зони провідності. Межа зони провідності для Селеніду цинку визначається при  $k = 0$ , в точці  $\Gamma$ . Точка  $\Gamma$  є  $k$ - межею валентної зони. Селенід цинку має однакові значення  $k$  в зоні валентності і на границі зони провідності, тому цей матеріал є прямозонним напівпровідником. Зонна структура матеріалу має шість зон валентності між -6 та 0 eV (рис. 1.2). Ці шість зон відповідають 2p-орбіталям кисню. Для зони провідності існує два видимих стани вище 3 eV, які відповідають незайнятим рівнями Zn: 3s[11].

Серед бінарних напівпровідників селенід цинку має найвищу енергію зв'язку екситонів  $\sim 60$  меВ. У спектрах люмінесценції ZnSe при оптичному і катодному збудженні з'являються дві смуги випромінювання - вузька смуга в УФ-області ( $\lambda \sim 380$  нм,  $\Delta\lambda \sim 15$  нм) і широка смуга у видимій області ( $\lambda \sim 500$  нм,  $\Delta\lambda \sim 100$  нм) [17]. Наявність в забороненій зоні донорних або акцепторних рівнів визначає смугу випромінювання у видимій області. Донорні і акцепторні рівні обумовлені дефектами або домішками (роль дефектів грають кисневі вакансії, міжвузлові атоми цинку та інші локальні дефекти ґратки) [2].

У природі селенід-цинку зустрічається у вигляді мінералу цинку. Хімічно селенід цинку амфотерний— реагує з кислотами з утворенням відповідних солей цинку, при взаємодії з розчинами лугів утворює комплексні гідроксоцінкати. При сплаві ZnO з основами і з більшістю селенідів металів утворюються цинкати[12].

## **1.2. Нано-структури на основі селеніду цинку**

У 21-му столітті нанотехнології вважають провідними технологіями. Завдяки нанотехнологіям можна отримувати структури на молекулярному рівні. Сучасні розробники виявляють великий інтерес до синтезу наночастинок. Унікальні оптичні та електронні властивості наночастинок дозволяють їх використання в різних пристроях (в гнучких дисплеях, лазерах і терапевтичних приладах). Нині велике застосування знаходять такі нано-структури, як квантові точки, квантові ями, нанопроводи, наностержні і ін [5]. Знайдений зв'язок між шириною забороненої зони і розміром частинок доводить, що заборонена зона зі збільшенням розмірів частинок зменшується [2].

Серед відомих наноматеріалів селенід цинку має три основні переваги:

- володіє унікальними напівпровідниковими і п'єзоелектричними властивостями, тому може застосовуватися в якості основи для електромеханічно пов'язаних датчиків і перетворювачів;

- біологічно безпечний, має низьку токсичність, тому може застосовуватися в біомедицині;

- застосовується в різних конфігураціях наноструктур (нанопроводи, наноструни, нанокільця, нанодуги і наноспіралі).

Нано-структури селеніду цинку мають унікальну властивість генерувати ультрафіолетове випромінювання при кімнатній температурі. Синтез одновимірних (1D) наноструктур ZnSe знаходить широке застосування в

фотонних приладах, ультрафіолетових лазерах, датчиках і т.п [13]. Вимушене випромінювання з'являлося під час використання селеніду цинку в структурах з квантовими ямами. У квантових ямах явище екситонної вимушеної емісії більш ефективно за рахунок збільшення енергії зв'язку екситонів. Якщо ж розглядати інші матеріали групи  $A_2B_6$ , то вимушене випромінювання у них спостерігалось тільки при низьких температурах і рідше - при кімнатній температурі. У структурах квантових ям, які базуються на ZnSe, екситони мають велику енергію зв'язку в порівнянні з напівпровідниками з'єднань  $A_3B_5$ [13]. Така властивість екситонів знаходить широке застосування при лазерній генерації та нелінійній абсорбції  $A_3B_5$ -Селенідних квантових ям [17].

Отримати одномірні нано-структури селеніду цинку можна за допомогою таких методів: хімічне парофазне осадження, хімічна парофазна конденсація, термовакуумне випаровування, гідротермічний метод, хімічне осадження металоорганічних сполук з парової фази [17].

Метод магнетронного розпилення дає можливість створювати нанопроводи з селеніду цинку з оптимальними електронними та оптичними властивостями. Метод імпульсної лазерної абляції з рідкої фази також широко використовується для синтезу наночастинок. Полікристалічні і монокристалічні плівки залежать від виду підкладок, на які наноситься матеріал різними методами. Епітаксціальні шари ZnSe отримують на монокристалічних підкладках із слюди, сапфіру, германію, кремнію, з'єднань II-VI та ін [20].

### **1.3. Використання селеніду цинку в сонячних модулях**

Завдяки електричним і оптичним властивостям, дешевизні і доступності селенід цинку знаходить широке застосування в тонкоплівкових сонячних елементах. Шари ZnSe в тонкоплівковій технології наносяться для поліпшення струмознімання і для забезпечення максимального оптичного захоплення. Фотон сонячного випромінювання змінює свою траєкторію за рахунок різниці

показників зломлення і розвинутого рельєфу поверхні. Таким чином при проходженні крізь шар ZnSe відбувається розсіювання сонячного світла (рисунок 1.3).

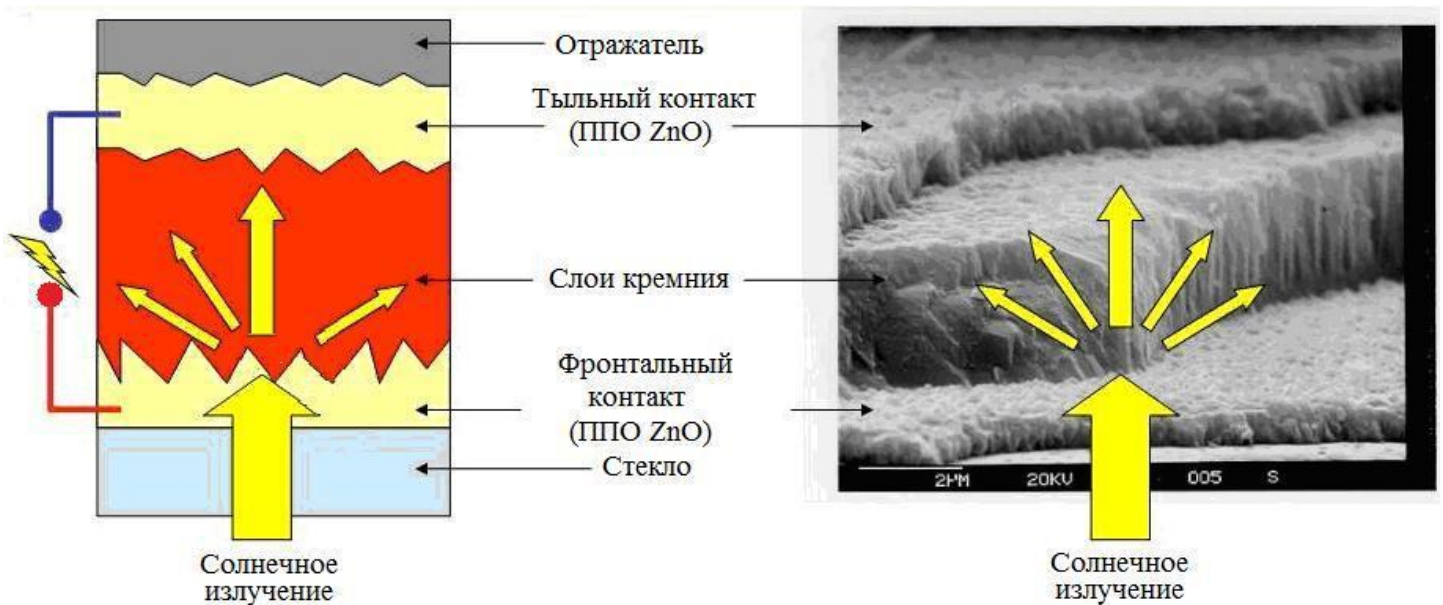


Рисунок 1.3 – Варіації розсіювання світла крізь ZnSe [15]

У конструкціях сонячних елементів селенідні матеріали застосовуються на основі моно- і полікристалічного кремнію. У таблиці 1.1 наведені вимоги для прозорих провідних селенідів (ППС), які використовуються в якості тильних і лицьових контактів і відбиваючих шарів в кремнієвих сонячних елементах p-i-n- і n-i-p-конфігурацій [15].

Таблиця 1.1 - Вимоги до ППС, використовуваних в кремнієвих сонячних елементах[16]

Конфігурація сонячного елемента	Фронтальний ППС	Тильний ППС
<i>p-i-n</i> -типу	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Низький поверхневий резист (&lt; 16 Ом).</li> <li>• Високе оптичне пропускання (&gt; 80 %) в діапазоні 350...1100 нм.</li> <li>• Велика поверхнева шорсткість (70...100 нм)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Низький поверхневий резист (&lt; 16 Ом).</li> <li>• Високе оптичне пропускання (&gt; 80 %) в діапазоні 650...1100 нм для однопереходного СЕ и в діапазоні 650...1100 нм для тандемного мікроморфного СЕ</li> </ul>
<i>n-i-p</i> -типу	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Низький поверхневий резист (&lt; 16 Ом).</li> <li>• Високе оптичне пропускання (&gt; 80 %) в діапазоні 350...1100 нм.</li> <li>• Поверхнева наношорсткість не обмежена (частково задається полікристалічним шаром кремнію)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Низький поверхневий резист (&lt; 16 Ом).</li> <li>• Високе оптичне пропускання (&gt; 80 %) в діапазоні 650...1100 нм для однопереходного СЕ и в діапазоні 650...1100 нм для тандемного мікроморфного СЕ</li> <li>• Поверхнева шорсткість не обмежена (задається текстурою тильного відбивача або підложки)</li> </ul>

#### 1.4. Механізми зарядопереносу через гетероперехід

Гетероперехідні сонячні батареї на основі монокристалічних кремнієвих підкладок та прозорого струмопровідного селенідного (ПСС) шару виявляють

зацікавленість багатьох дослідників, тому що можуть забезпечити широку область спектральної чутливості: від ультрафіолетового спектра до інфрачервоного та забезпечити великі значення ККД перетворення сонячної енергії. Такі гетероструктури характеризуються низькою собівартістю, відносною простотою і низькою температурою технологічного процесу. Однією із перспективних, економічно ефективних та гнучких технологій є створення тонкоплівкових випрямляючих структур, фотодіодів, ультрафіолетових випромінювачів і сонячних елементів на основі гетеропереходів n-ZnSe/p-CdS.

В наш час механізм перенесення струму через ГП можна описати за допомогою фізичних моделей: дифузійна, емісійна, рекомбінаційна, емісійно-рекомбінаційна, тунельна і тунельно-рекомбінаційна. Всі струми, що протікають через такі переходи поділяють на теплові та нетеплові [17].

ВАХ ідеального p-n - переходу або ГП визначається дифузійною моделлю або моделлю Андерсона. У цій моделі не враховується наявність локалізованих зарядів на межі поділу напівпровідників. Дифузійна, емісійна і емісійно-рекомбінаційна моделі мають однаковий вираз, який визначає ВАХ ГП і має вигляд [2].

$$I = I_0 \left[ \exp\left(\pm \frac{eU}{AkT}\right) - 1 \right], \quad (1.1)$$

$$I = I_{00} \exp\left(-\frac{eU_{k0}}{AkT}\right), \quad (1.2)$$

де  $I_0$  - струм насичення ГП;

$U$  - зовнішня напруга, прикладена до p-n - переходу;

$A$  - діодний коефіцієнт або коефіцієнт ідеальності переходу;

$I_{00}$  - стала, яка не залежить від температури;

$U_{k0}$  - висота потенційного бар'єру на переході при відсутності зовнішньої напруги [17].

Пояснити проходження струму через деякі ГП можна за допомогою моделі, яка враховує наявність на міжфазній межі тонкого шару речовини зі зміненою кристалічною ґраткою і високою швидкістю рекомбінації носіїв заряду. На міжфазній межі електрони і дірки заповнюють гетеропари. У такій тунельно-рекомбінаційній моделі ГП складається з двох послідовно-з'єднаних контактів метал-напівпровідник і зарядоперенос при цих процесах не залежить від температури. ВАХ такого гетероперехода має наступний вигляд [17]:

$$I = I_0 [\exp(\pm \alpha U) - 1], \quad (1.3)$$

$$I_0 = I_{00} \exp(\beta T), \quad (1.4)$$

де  $I_{00}$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$  – сталі, які не залежать від  $U$  и  $T$ .

З використанням формул будується графік ВАХ в координатах  $\ln I - U$  (рисунок 1.4). При нетеплових струмах лінійні ланки ВАХ будуть паралельні при різних температурах виміру, а при теплових струмах графік зростає при зменшенні температури виміру [17].

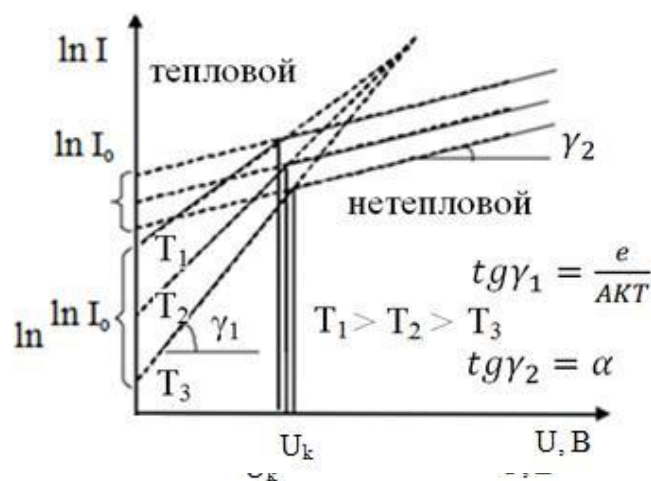


Рис.1.4 Типові експериментальні ВАХ реальних ГП для теплових і нетеплових механізмів струмопереносу [2]

Станок межі-розділу матеріалів гетеро-переходу характеризує механізм струмоперенесення крізь межу [2]. Стан межі розділу полі-кристалічних меж визначається відстанню між найближчими поверхновими дефектами, які можуть виникати на ГП, внаслідок невідповідності параметрів кристалічної ґратки монокристалічних матеріалів ( $X_N$ ), і мінімальній концентрації приповерхневих станов ( $N_S$ ). Ці параметри можуть бути розраховані за формулами [17]:

$$X_N = \frac{a_1 a_2}{\sqrt{2}(a_1 - a_2)}, \quad N_S = \frac{4(a_1^2 - a_2^2)}{a_1^2 a_2^2}, \quad (1.5)$$

де  $a_1, a_2$ —константи решіток контактуючих матеріалів ГП.

Розробники довели, що при збільшенні кількості цих дефектів на межі ГП погіршуються випрямні та інші властивості напів-провідникових пристроїв [2,18].

Якщо існує невідповідність параметрів ґратки матеріалів ГП менше ніж 1%, тоді зарядоперенос через таку структуру можна описати моделлю Андерсона. Ця модель не використовується при невідповідності параметрів ґратки матеріалів ГП більше 1%. Якщо ж невідповідність періодів решіток матеріалів ГП більше 7%, тоді ГП можна уявити, як два послідовно з'єднаних бар'єра Шоттки [2,11, 17-18].

Таким чином, розуміння механізму зарядопереносу через ГП дозволяє отримати найоптимальніші робочі властивості для монокристалічних переходів.



## РОЗДІЛ 2 МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕНЬ

### 2.1. Розрахунок характеристик ансамблю точкових дефектів

Вольтамперні характеристики (ВАХ) визначаються шляхом побудови діаграм вихідного струму як функції напруги. Сумарний струм, який протікає по контуру в присутності світла знаходиться за формулою:

$$I = I_0 \left[ e^{\frac{qv}{AkT}} - 1 \right] - I_L, \quad (2.1)$$

де  $I_0$ - зворотній струм насичення;

$A$  - діодний фактор якості;

$I_L$ - вироблений фотострум [17].

Струм короткого замикання  $I_{sc}$  з'являється при короткому замиканні сонячного фотоелемента.

Відповідне рівняння струму можна переписати:

$$I_{sc} = -I_L \quad (2.2)$$

Ми бачимо, що струм короткого замикання дорівнює виробленому фотоструму  $I_L$ . Струм короткого замикання вимірюється в  $\text{mA}/\text{cm}^2$  і знаходиться як щільність

струму  $J_{sc}$ , за формулою[14, 23]:

$$J_{sc} = \frac{I_{sc}}{S}, \quad (2.3)$$

де  $S$  – площа сонячного фотоелемента [17].

Напруга, при якій струм дорівнює нулю, називається напругою розімкненого ланцюга  $U_{oc}$  або напругою холостого ходу. Напруга розімкненого ланцюга  $U_{oc}$  вимірюється в мВ і визначається за формулою[22]:

$$U_{oc} = A \left[ \frac{kT}{q} \right] \ln \left( \frac{I_{sc}}{I_0} + 1 \right), \quad (2.4)$$

Коефіцієнт заповнення  $FF$  сонячного фотоелемента розраховується за формулою:

$$FF = \frac{U_m I_m}{U I_{sc}}, \quad (2.5)$$

де  $U_m I_m$  - гранична вихідна потужність;

$U_{oc} I_{sc}$  – змінна вихідна потужність.

Коефіцієнт корисної дії (ККД)  $\eta$  сонячного фотоелемента визначається як відношення фотогальванічно генерованої вихідної потужності до потужності падаючого світлового потоку.

$$\eta = \frac{FF \cdot U_{oc} \cdot I_{sc}}{P_{in}} \times 100\% \quad (2.6)$$

Якщо сумарна потужність випромінювання, яке падає на фотоелемент дорівнює 100, тоді коефіцієнт корисної дії визначається за формулою:

$$\eta = U_{oc} I_{sc} FF \quad (2.7)$$

## 2.2. Моделювання характеристик СЕ на основі ГП: основні підходи та принципи.

З початку 80-х років ХХ століття комп'ютерне моделювання основних фізичних процесів, які відбуваються в тонкоплівкових СЕ, дуже цікавить дослідників. В наш час широко використовується тривимірне числове моделювання для проектування СЕ та їх тестування [17].

Програмний пакет, який використовують для моделювання роботи тонкоплівкових СЕ, повинен задовольняти наступним вимогам:

- використовуватися для моделювання процесів у багатошарових структурах;
- використовуватися для моделювання процесів у СЕ з шарами, ширина 33 яких є більшою 3eВ;
- враховувати рекомбінації генерованих носіїв заряду на глибоких рівнях в об'ємі матеріалу та на поверхні;
- поділ енергетичних зон на складові частини;
- моделювання основних електричних характеристик СЕ як функції від часу;
- значна швидкість моделювання фізичних процесів та легкість у використанні [17].

Пакет моделювання повинен мати не менше 6 шарів СЕ, має бути передбачена можливість моделювання не лише темнових і світлових ВАХ, а також інших залежностей (квантовий вихід, частотно-ємнісні залежності тощо) [17].

Порівняльні характеристики основних програмних пакетів, які використовуються для моделювання фізичних процесів у СЕ на основі ГП, наведені в табл. 2.1.

Таблиця 2.1

**Порівняльні характеристики програм для моделювання фізичних процесів у СЕ[17]**

	AMPS	SCAPS	ASA	PC1D
Макс. кільк. шарів	30	7	необмежена	5
Побудова зонних діаграм	Враховується модель Андерсона			
Розділення енергетичних зон	ні	ні	так	ні
Глибокі стани в зз	50	3	4	без заряду
Глибокі поверхневі стани	ні	так	ні	ні
Багатопрофільне моделювання	ні	так	так	короткочасно
Числове наближення	враховується			
Швидкість	мала	висока	дуже висока	дуже висока
Інтерактивність	задовільна	добра	відсутня	добра

«Активна» панель у відмічених програмних продуктах дозволяє встановити вхідні параметри для моделювання: робочу температуру, діапазон напруги, частоту, тип випромінювання тощо. Після введення початкових параметрів використовується «активний перелік розрахункових залежностей», що дозволяє одержувати ВАХ, частотно-ємнісні характеристики, залежності «квантовий вихід – довжина хвилі (енергія фотона)» та ін [17].

Програмні пакети, наведені у таблиці 2.1. мають свої переваги і недоліки, але найбільш застосованим з них є програмний пакет SCAPS. У програмному пакеті SCAPS основні параметри моделювання можуть бути задані користувачем. Це дозволяє використовувати пакет програм для ефективного вирішення певних задач [17].

В програмному пакеті SCAPS можна зберігати результати моделювання в форматі ASCII і далі обробляти їх в інших програмних пакетах. Завдяки

своїм перевагам перед іншими програмними пакетами SCAPS набув широкого використання. Опишемо основні особливості програмного пакету SCAPS-1D[24]:

1. Можливість розділення рівнів Фермі – користувач може редагувати показники для визначення електростатичного потенціалу та положення рівнів Фермі;
2. У випадку відхилень в розрахунках дані виводяться на екран, що дає користувачу можливість спостерігати всі розраховані точки;
3. Освітлення ГП можливо з фронтальної і з тильної сторони;
4. Методом інтерполяції з попередньо розрахованих ВАХ визначають основні параметри СЕ;
5. Результати дослідження виводяться в лінійному і в логарифмічному масштабах;
6. Числові дані моделювання зберігаються і можуть оброблятися в інших утилітах [17].

Завдяки своїм можливостям програмний пакет SCAPS широко застосовується для моделювання основних характеристик СЕ на основі гетеропереходів [17].

Щоб розробити числове моделювання робочих характеристик фотоперетворювачів, виконаних на базі напівпровідникових плівок Селеніду цинку необхідно задати вхідні параметри матеріалів, що входять до складу фотоперетворювача (товщина віконного та поглинаючого шару ( $d$ ), ширина 33

матеріалів ( $E_g$ ), їх електронна спорідненість ( $\chi$ ), діелектричні сталі напівпровідників ( $\varepsilon/\varepsilon_0$ ), рухливості електронів та дірок ( $\mu$ ), тощо).

На основі світлових ВАХ СЕ в подальшому розраховуються параметри фотоелектричних приладів:

- напруга холостого ходу  $U_{oc}$  ;
- струм короткого замикання  $J_{sc}$ ;
- фактор заповнення  $FF$ ;
- коефіцієнт корисної дії  $\eta$ .

Базові вхідні параметри шарів, що використовувалися для моделювання фізичних процесів у СЕ, наведені в табл.2.2.

Таблиця 2.2

**Вхідні параметри моделювання процесів у СЕ ZnSe/ CdS [17]**

Шар	<i>n</i> -ZnSe	<i>p</i> -CdS
Товщина $l$ , мкм	0,8	3
Ширина ЗЗ $E_g$ , еВ	3,3	1,12
Спорідненість електронів $\chi$ , еВ		
Діелектрична стала $\varepsilon/\varepsilon_0$	9	10
Густина станів в зоні провідності $N_C$ , см <sup>-3</sup>	$2,2 \cdot 10^{18}$	$2,2 \cdot 10^{18}$
Густина станів в валентній зоні $N_V$ , см <sup>-3</sup>	$1,8 \cdot 10^{19}$	$1,8 \cdot 10^{19}$
Рухливість електронів $\mu_e$ , см <sup>2</sup> /с	100	$1,45 \cdot 10^3$
Рухливість дірок $\mu_h$ , см <sup>2</sup> /с	25	500

Проведені розрахунки моделювання ансамблю точкових дефектів та їх результати в подальшому вводилися у відповідні розділи програмного пакету (Рис. 2.1).

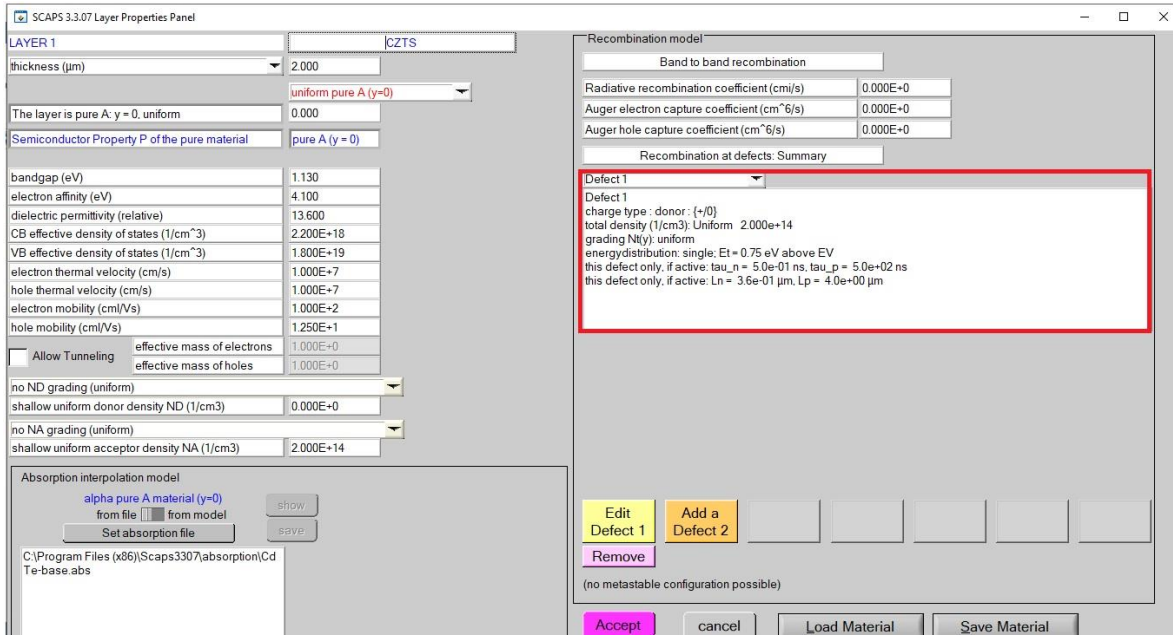


Рис. 2.1 – Зовнішній вигляд діалогового вікна для введення базових даних стосовно впливу дефектів на конкретний активний шар.

### РОЗДІЛ 3. РЕЗУЛЬТАТИ ЧИСЛОВОГО МОДЕЛЮВАННЯ

#### 3.1 Вплив товщини активних шарів на кількість дефектів

Товщина поглинального шару є важливою характеристикою СЕ[23,24], яка впливає на кількість поглинутого приладом випромінювання, тому дослідження її впливу на електрофізичні характеристики ФЕП є актуальною задачею.

У таблиці 3.1 та на рис.3 наведені результати моделювання світлових ВАХ СЕ при зміні товщини поглинального шару.

*Таблиця 3.1*

Робочі характеристики СЕ при різній товщині активного шару ZnSe

<i>Товщина</i>	$U_{oc},$ В	$I_{sc},$ мА/см <sup>2</sup>	$FF,$ %	$\eta,$ %
1,0	0,50	22,35	75,7	8,6
1,5	0,51	22,98	74,7	8,8
2,0	0,51	23,26	73,4	8,7
2,5	0,51	23,45	71,9	8,6
3,0	0,51	23,55	70,4	8,5
3,5	0,51	23,63	69,0	8,4
4,0	0,51	23,70	67,5	8,2
4,5	0,51	23,74	65,9	8,0
5,0	0,51	23,77	54,2	7,8



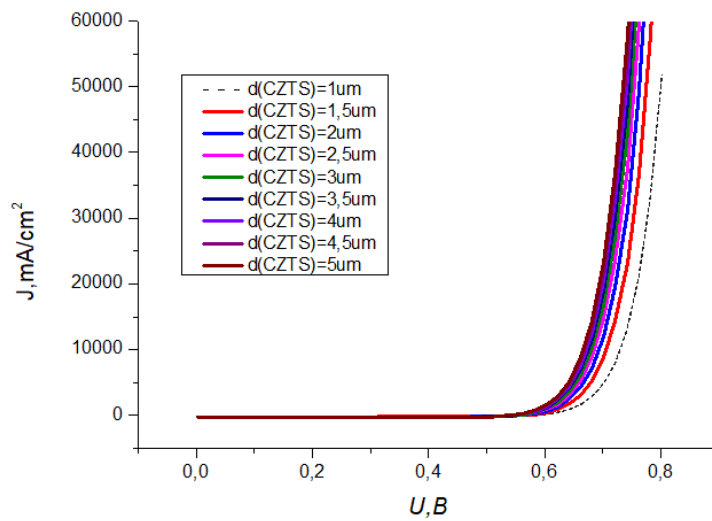


Рисунок 3.1. Світлові ВАХ СЕ при різній товщині активного шару

З аналізу видно, що при збільшенні товщини шару  $dZnSe = 1,5$  мкм спостерігається деяке підвищення ККД СЕ до рівня 8,8 %. Це обумовлене збільшенням значення  $JSC$  від 22,35 до 22,98  $mA/cm^2$ . При подальшому збільшенні товщини шару  $ZnSe$  ефективність СЕ починає знижуватися. Це можна пояснити тим, що при товщині абсорбуючого шару 1,5 мкм відбувається повне поглинання світла СЕ і відповідно кількість генерованих електронно-діркових пар виходить на насичення [17].

Подальше збільшення товщини шару  $dZnSe$  веде до збільшення послідовного опору приладу та віддалення області генерації носіїв від гетеропереходу.

В результаті відбувається загальне зниження ККД приладу. На зниження ефективності СЕ при малій товщині поглинального шару впливає підвищена рекомбінація генерованих носіїв на глибоких центрах, розташованих на границі розділу поглинального шару і струмознімального контакту [17].

Таким чином, в результаті проведених розрахунків встановлено, що оптимальною товщиною поглинального шару СЕ на основі гетеропереходу  $ZnSe / Si$  є значення  $d = 1,5$  мкм. Саме це значення і було використане нами при подальших розрахунках.

### 3.2. Вплив товщини приповерхневого шару на кількість дефектів

Товщина приповерхневого шару в ФЕП є важливою характеристикою, оскільки визначає кількість випромінювання, що надходить до поглинального шару СЕ, тому потрібна оптимізація його товщини [17].

Результати моделювання світлових ВАХ приладів з різною товщиною шару CdS наведені на рис. 3.2 та у таблиці 3.2

Таблиця 3.2

Робочі характеристики СЕ при різній товщині приповерхневого шару CdS

Товщина	$U_{oc}$ , В	$I_{sc}$ , мА/см <sup>2</sup>	$FF$ , %	$\eta$ , %
50	0,51	23,16	74,8	8,8
100	0,51	21,70	74,7	8,2
150	0,50	20,76	74,7	7,9
200	0,50	20,14	74,7	7,6
250	0,50	19,71	74,6	7,4

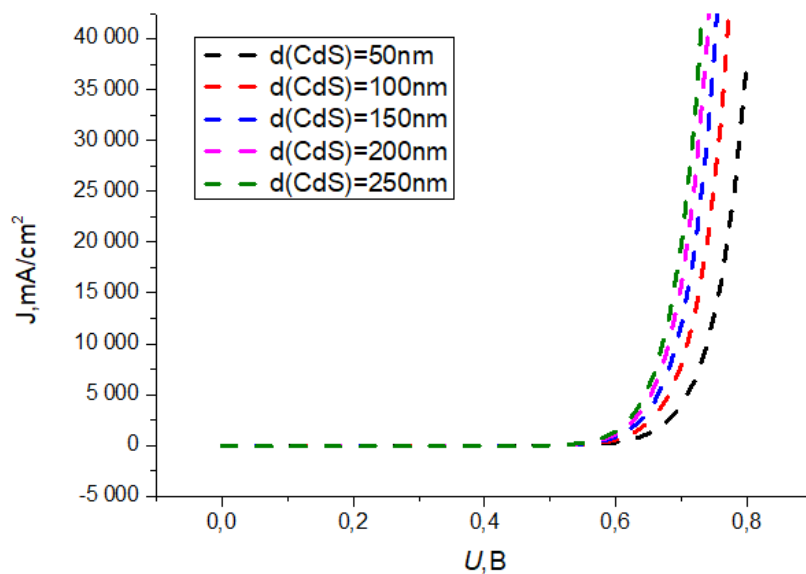


Рисунок 3.2. Світлові ВАХ СЕ при різній товщині приповерхневого шару CdS

В результаті проведених розрахунків було встановлено, що при підвищенні товщини приповерхневого шару до 0,05 мкм спостерігається значне підвищення ККД СЕ. Моделювання процесів, що відбуваються у СЕ дозволило визначити оптимальні конструкційні характеристики реального ФЕП, а саме товщина приповерхневого шару повинна складати 0,05 мкм [17].

### 3.3. Вплив робочої температури

В процесі експлуатації під дією сонячного випромінювання СЕ можуть розігріватися, що може суттєво вплинути на їх робочі характеристики. В зв'язку з цим, нами проводились дослідження впливу робочої температури на вигляд ВАХ ФЕП [26]. Моделювання проводилося в інтервалі температур, які реально можуть реалізуватися при експлуатації СЕ  $T = 280-320$  К, для оптимізованих значень товщини всіх шарів. Результати розрахунків основних характеристик ФЕП в залежності від температури експлуатації наведені на рис. 3.4 та в таблиці 3.4

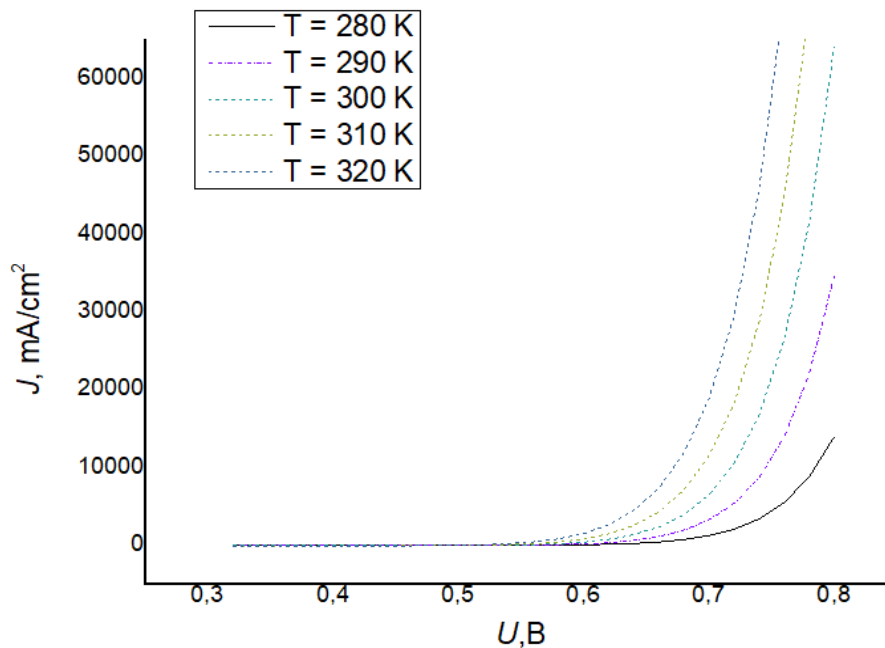


Рисунок 3.4. Світлові ВАХ СЕ при різній температурі експлуатації

Таблиця 3.4

Робочі характеристики СЕ при різній експлуатаційній температурі

$T, K$	$U_{oc},$ В	$I_{sc},$ мА/см <sup>2</sup>	$FF,$ %	$\eta,$ %
280	0,56	23,3	73,3	9,5
290	0,53	23,3	73,4	9,2
300	0,50	23,3	73,4	8,8
310	0,43	23,4	74,4	8,4
320	0,47	22,4	73,1	8,0

Встановлено, що при збільшенні температури експлуатації від 280 К до 320 К ККД СЕ зменшувався від 9,5 % (280 К) до 8,0 % (320 К). Результат теж є фізично зрозумілим, оскільки при підвищенні  $T$  зменшується ширина забороненої зони матеріалу, відповідно зменшується контактна різниця потенціалів на гетеропереході, одночасно збільшуються струми витоку освітленого діоду [17].

## ВИСНОВКИ

1. В ході виконання даної дипломної роботи був проведений аналіз літературних джерел стосовно класифікації структурних дефектів, їх вплив на морфологію поверхні, структурні та електрофізичні робочі характеристики фотоелектричних перетворювачів сонячної енергії.
2. При проведенні моделювання попередньо було проведене моделювання ансамблю точкових дефектів із використанням квазіхімічного формалізму та моделі Андерсона.
3. В подальшому отримані теоретичні результати числового моделювання були використані при введенні базових параметрів для числового моделювання експлуатаційних характеристик фотоперетворювачів.
4. Були отримані результати впливу ансамблю точкових дефектів на значення робочих характеристик сонячних елементів. Було встановлено, що врахування точкових дефектів при числовому моделюванні призводить до деякого зниження значення ефективності фотоперетворення, порядку на 0,5-0,8 % в залежності від фізичних властивостей активних шарів.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Poortmans J. Thin film solar cells: Fabrication, characterization and application  
Poortmans, V. Arkhipov. – Leuven, Belgium: John Wiley & Sons, Ltd. IMEC,  
2006. – p. 471.
2. Фаренбрук А. Солнечные элементы. Теория и эксперимент / А.Фаренбрук,  
Р. Бьюб. – Москва: Энергоатомиздат, 1987. – С. 280.
3. II – VI compounds as the top absorbers in tandem solar cell structures  
/ P.Mahawela, G. Sivaraman, S. Jeedigunta [et al.] // Materials Sci. Engin. B. –  
2005. – V.116. – P. 282-291.
4. Георгобиани А.Н. Широкозонные полупроводники  $A_2B_6$  и перспективы  
их применения / А.Н. Георгобиани // УФН.–1974.–Т. 113, №1.– С.129-  
155.
5. Kasap S. The springer handbook of electronic and photonic materials / S.Kasap,  
Capper. – Berlin: Springer, 2007. – p.1406 .
- 6.Owens A. Compound semiconductor radiation detectors / A. Owens,  
A.Peacock//Nucl. Instrum. Methods. – 2004. – V. 531. – P. 18-37.
7. Гринев Б.В. Сцинтиляционные детекторы и системы контроля радиации на  
их основе / Б.В. Гринев, В.Д. Рыжиков, В.П. Семиноженко. – Київ: Наукова  
думка, 2007. – С. 446.
8. Викулин И.М. Инжекционные фотоприемники / И.М. Викулин,  
Ш.Д.Курмашев, В.И. Стафеев // ФТП. – 2008. – Т. 42, В.1. – С. 113-126.
9. Kolodziejcki L.A. Wide-bandgap II-VI heterostructures for blue/green optical  
sources / L.A. Kolodziejcki, R.L. Gunshor, A.V. Nurmikko // Annu. Rev. Mater.  
Sci. – 1995. – V.25. – P. 711-753.

10. Калинин И.П. Эпитаксиальные пленки соединений  $A_2B_6$  / И.П.Калинкин, В.Б. Алесковский, А.В. Симашкевич. – Ленинград: Изд-во ЛГУ, 1978. – С.
11. Takahashi K. Wide bandgap semiconductors. Fundamental properties and modern photonic and electronic devices / K. Takahashi, A. Yoshikawa, A. Sandhu. – Berlin, Heidelberg, New York: Springer, 2007. – P. 486 .
12. Физика соединений  $A_2B_6$  / [Под ред. Георгобиани А.Н.]. – Москва: Наука, 1986. – С. 320 .
13. Panchekha P.A. Structure and technology problems of  $A_2B_6$  semiconductor films / P.A. Panchekha // Functional materials. – 2000. – V.7, №2. – P. 1-5.
14. Modeling thin- film PV devices / M. Burgelman, J. Verschaege, S. Degrave [et al.]. - Progress in Photovoltaic; Research and Application, John Wiley and Sons, 2004. – P.94-99.
15. Афанасьев, В. П. Тонкопленочные солнечные элементы на основе кремния / В. П. Афанасьев, Е. И. Теруков, А. А. Шерченков. – 2-е изд. – СПб.: Изд-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2011. – 168 с.
16. Wagner J.F., Transparent electronics/J.F. Wagner, D.A. Keszler, R.E. Presley.- Springer Science+ Business Media, LLC.- 2008. -217 p.
17. Іващенко М.М. Структурні оптичні та електрофізичні властивості плівок CdSe і ZnSe та гетеропереходів на їх основі: дис. канд. фіз.-мат. наук: 01.04.01 / Іващенко Максим Миколайович. – Суми, 2014. – 163 с.
18. Transport phenomena in high performance nanocrystalline ZnSe :Ga films deposited by plasma - enhanced chemical vapor deposition / J.J. Robbins, J. Harvey, J. Leaf [et al.] // Thin solid films. – 2005. – V.473, – P. 35-40 .

19. Sliva L. M. Study of structural, electrical, optical and magnetic properties of ZnSe based films produced by magnetron sputtering. - M.Sc. Thesis: University of Puerto Rico / L. M. Sliva. – San-Juan, 2006. – P. 139 .
20. Characteristic of aluminium -doped zinc selenide films prepared by chemical spray pyrolysis / R. Asomoza, H. Malodonado, M. D. Olvera [et al.] // J. Mater. Sci. Mater. Electron. – 2000. – V.11, № 5. – P. 383.
21. Effect of annealing on the electrical and optical properties of electron beam evaporated ZnSe thin films / R. Al-Asmara, G. Ferblantier, F. Maily [et al.] // Thin Solid Films. – 2005. – V.473, №1. – P. 49-53.
22. Pushparajaht P. Properties of ZnSe films deposited onto by spray pyrolysis / P. Pushparajaht, A. Kariem Aroft, S. Radhakrishnat // Phys. D. Appl. Phys.,– 1994.– V.4, №3- P. 1518 -1521.
23. Bugelman M. Modeling polycrystalline semiconductors solar cells/M. Bugelman, P. Nollet, S. Degrave // Thin Solid Films.- 2000.- №3. – P. 89-94.
24. Ultraviolet spontaneous and stimulated emissions from ZnSe microcrystallite thin films at room temperature / P. Zu Tang, G. K. L. Wong, M. Kawasaki [et al.] // Solid State. –1997. - V. 103, №1. - P. 459-463.
25. Бобков, А. А. Нано-структурированные материалы на основе селенида цинка для гетероструктурных солнечных элементов / А. А. Бобков и др. // ФТП. – 2015. – Т. 49, № 10. – С. 1402–1406.



26. Hu J. Textured Aluminum-doped zinc selenide thin films from atmospheric pressure chemical vapor deposition / J. Hu, R.G. Gordon // J Appl. Phys.- 1992. - V.71, №1. - P. 880.