МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ Сумський державний університет

Класичний фаховий коледж (повна назва інституту/факультету)

(повна назва каф	едри)
	(підпис) (Ім'я та ПРІЗВИЩЕ) 20 р.
КВАЛІФІКАЦІЙН на здобуття освітнього ступеня	ІА РОБОТА <u>бакалавр</u>
зі спеціальності <u>171Електроніка</u>	(бакалавр / магістр)
<u>освітньо-професійної</u> програми <u>системи</u> (освітньо-професійної / освітньо-наукової)	(код та назва) Електронні інформаційні
(назва програми) на тему: <u>Моделювання робочих параметрі</u> Здобувача групи <u>ЕІз-91к</u> <u>Кролюка Дм</u> (прізвище, ім'я,	<u>в гетероструктур «Si/AlN»</u> итра Дмитровича по батькові)
Кваліфікаційна робота містить результати ідей, результатів і текстів інших авторі джерело.	власних досліджень. Використання в мають посилання на відповідне
(підпис)	<u>Дмитро КРОЛЮК</u> (Ім'я та ПРІЗВИЩЕ здобувача)
Керівник <u>Викладач к.фм.н., Макси</u> (посада, науковий ступінь, вчене звання, Ім Консультант ¹⁾	ам ІВАЩЕНКО Зя та ПРІЗВИЩЕ) (підпис)
(посада, науковий ступінь, вчене звання Ім	Ся та ПРІЗВИЩЕ) (підпис)

АНОТАЦІЯ

Об'єктом дослідження дипломної роботи є числове моделювання експлуатаційних характеристик сонячних перетворювачів на основі гетеро системи типу Si/AlN.

Мета роботи полягає у знаходженні оптимальних значень густини струму короткого замикання, напруги холостого ходу, коефіцієнту заповнення та ефективності фотоелектричного перетворення (ККД).

При виконанні моделювання застосовувався програмний пакет SCAPS.

Визначені напруга холостого ходу U_{OC} , густина струму короткого замикання *JSC*, фактор заповнення *FF*, коефіцієнт корисної дії гетеропереходу в залежності від - його інженерних особливостей (товщини віконного, поглиналь-ного та при-контактного прошарків) та робочої температури. Встановлені експлуатаційні параметри фотоперетворювача з максимальною ефективністю.

Робота викладена на 35 сторінках, у тому числі включає 11 рисунків, 7 таблиць, список цитованої літератури із 25 джерел.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: ГЕТЕРО-ПЕРЕХІД, ФОТОПЕРЕТВОРЮВАЧ, , Si, AIN, КОНДЕНСАТ, ВОЛЬТ-АМПЕРНА ХАРАКТЕРИСТИКА.

3MICT

ВСТУП	4
РОЗДІЛ 1. Плівки AlN та їх застосування	5
1.1Фізичні особливості плівок AlN	5
1.2Застосування у геліоенергетиці	б
1.3 Застосування у фотоелектричному перетворенні	10
РОЗДІЛ 2.МОДЕЛЮВАННЯ ФІЗИЧНИХ ПРОЦЕСІВ У СОНЯ Елементах	ЧНИХ 15
2.1. Схема заміщення ідеального фотоелементу	15
2.2. Огляд можливостей симулюючого програмного засобу SCAPS.	17
РОЗДІЛ З. РЕЗУЛЬТАТИ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ЇХ	
ОБГОВОРЕННЯ	25
3.1. Вибір вхідних параметрів для моделювання	25
3.2. Визначення товщини вікон-ного шару	26
3.3. Визначення товщини при-контактного шару	29
3.4. Визначення робочої температури	31
Висновки	34
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	35

ВСТУП

Використання енергії сьогодні сонячної розглядається ЯК перспективний засіб розв'язання глобальної енергетичної кризи. Ha сьогоднішній день максимальний ККД кращих плівкових сонячних елементів (СЕ) на основі гетеропереходів (ГП) n-Si/p-CdTe становить 18,7%, але темпи його зростання значно уповільнилися. Разом з тим ці СЕ мають ряд суттєвих недоліків, які ускладнюють їх широкомасштабне використання. Так при виготовлені фотоперетворювачів використовується матеріал вікна (Si) який містить важкий метал – кадмій та має низький коефіцієнт пропускання у ультрафіолетовій області спектру. Збільшення ККД СЕ можливо досягти, наприклад, шляхом заміни матеріалу поглинаючого шару. Так, плівки ALN (*E*_g=1,13 eB) мають менше значення ширини забороненої зони у порівнянні з таким з'єднанням, як телурид кадмію,що дозволяє розширити діапазон фоточутливості відповідних СЕ та збільшити їх струми короткого замикання.

Підвищення ефективності CE можливе шляхом оптимізації властивостей як окремих прошарків так і конструкції фотоперетворювача в цілому. В наш час це здійснюють шляхом моделювання параметрів фотоперетворювачів з використанням існуючого програмного забезпечення. Для реалістичного моделювання електричних характеристик тонкоплівкових СЕ з ГП в наш час існує декілька програм (AMPS-1D, SCAPS-1D, PC-1D, ASA та AFORS-HET), але найбільш розробленою та зручною для використання можна вважати програму SCAPS-3.1.02. Ця програма дозволяє розраховувати темнові та світлові вольт-амперні характеристики (ВАХ) СЕ. В результаті їх аналізу можуть бути отримані такі важливі характеристики приладів як ККД (*η*), фактор заповнення ВАХ (FF), густина струму ходу (J_{sc}) напруга холостого короткого замикання та (U_{xx}) при врахуванні індивідуальних максимальному як характеристик напівпровідникових прошарків, що входять до складу фотоелементів так і досконалості границі розділу ГП.

РОЗДІЛ 1 ПЛІВКИ ALN ТА ЇХ ЗАСТОСУВАННЯ

1.1. Фізичні особливості плівок AlN

В даний час декілька бінарних сполучних напівпровідників залучають все більше і більше уваги дослідників завдяки своїм оптимальним оптикоелектронним властивостям і дешевому способу фабрикації. Одним з таких матеріалів є нітрид алюмінію (ALN), який має деякі особливості, такі як високий коефіцієнт поглинання ($\approx 10^4$ см⁻¹ поблизу основної смуги) і висока рухливість носіїв електричного заряду (≈ 90 см² B⁻¹ с⁻¹). Елементи в й ого складі не є токсичними і є доволі поширеними в земній корі. Показано, що ALN є напівпровідником р-типу і теоретично він має ефективність фотоперетворення світла приблизно 12 %. Були розроблені різні методики отримання тонких прошарків ALN, такі як спрей-піроліз, хімічне осадження у ванні та електро-осадження, хімічне осадження конденсованої пари та фізичне осадження парів. Було показано, що метод термічного випарування дає в результаті стехіометричні плівки з приблизною товщиною в декілька мікрометрів, які не мають мікро- та макронапружень, які добре прилягають до підкладки (хороша адгезія) і мають хороші електро-фізичні особливості для застосування в якості базових шарів сонячних елементів.

Ширина забороненої зони ALN складає 6,1 eB і це означає що вона є найкращою для отримання максимально ефективності фотоперетворення перетворення сонячної енергії, сполука не містить рідкісних та екологічно небезпечних елементів, разом з тим вона має великий коефіцієнт поглинання світла.

Оптичні особливості матеріалу представлені його енергетичним зазором та показником оптичного заломлення. Обидва показники оцінюються з ультрафіолетовоої області спектрального поглинання. Розраховується коефіцієнт поглинання ('a'), після чого ширина забороненої зони плівок отримується шляхом екстраполяції лінійної ділянки (α hv)² vs hv ділянки на вісі абсцис з використанням стандартизованого метода Таука. Визначення прямо зонного гетеропереходу з розміром зерен плівок ALN, вирощених на ІТО та скляних підкладках, показана на рисунку 1.1. Хоча дані тенденції є схожі, а абсолютні величини - різні, є можливо, завдяки різній орієнтації кристала або параметру грати, тобто кристалічність, напруженість та ефект орієнтації значень оптичної ширини забороненої зони конденсатів.



Рис. 1.1. Залежність значення ширини забороненої зони від розміру зерна.

1.2. Застосування у оптоелектроніці

В даному підрозділі позглядаються оптичні особливості полікристалічного α-ALN вирощеного на склі та ITO. Оптичні особливості плівок, нанесених на скло, що покривається молібденовим покриттям, не наведено тут, тому що проміжний шар, що поглинає видимий потік світла, не дозволяє вимірювати грани абсорбції ALN при передачі. Типові спектри пропускання плівок ALN на скло та ITO представлені на рис. 1.2.

Оптичне пропускання тонкоплівкового матеріалу описується виразами:

$$T = \frac{A * x}{B - C * x + D * x^2}$$
$$x = \exp(-\alpha * d)$$

де, Т – коефіцієнт пропускання, d - товщина шару, α - коефіцієнт поглинання, а A, B, C і D - функції показника заломлення n і коефіцієнта екстинкції k, а також індекс заломлення підкладки n_s .



Рис 1.2. Спектри оптичного пропускання плівок ALN склі (1) та ITO (2).

У спектральній області біля межі поглинання вираз для оптичного коефіцієнта пропускання та поглинання дається наступним чином:

$$T = T_0 * \exp(-\alpha * d)$$

$$T_0 = \frac{16 * n_s * (n^2 + k^2)}{((n + n_s)^2 + k^2) * ((1 + n)^2 + k^2)} \approx 1$$

$$\alpha \approx -\frac{1}{d} * \ln T$$

Спектр коефіцієнта поглинання α дозволяє визначити ширину забороненої зони *Eg*. Поблизу межі поглинання означення α hv (де hv - енергія фотонів) є обернено пропорційне різниці (hv - Eg) в n-ому ступені, де n становить 2, 2/3, 1/2 або 1/3 для прямої дозволеної зони , прямої

забороненої зони, непрямої дозволеної та непрямої забороненої смуги переходу відповідно.

Коефіцієнт поглинання біля межі поглинання становив $10^3 - 10^4$ см⁻¹. Аналіз спектрів поглинання α (hv) показав, що отримані авторами [3] матеріали виявляють в основному прямозонні міжзонні переходи. Спектри коефіцієнта оптичного поглинання у відповідних координатах α hv2 - f (hv) для плівок на різних підкладках показані на рис.1.3.



Рис. 1.3. Типові спектри коефіцієнта оптичного поглинання плівок ALN на склі (1) та ITO (2).

Аналіз спектрів оптичного поглинання показав, що плівки ALN з [111] текстурою росту як на підкладках скла, так і на ITO демонструють оптичні переходи з зоною $1.15 \pm 0,01$ eB. В енергетичному діапазоні фотонів 1.0 - 1.1 eB спостерігали характерний "крок", що вказує на поглинання домішки (дефекту). У своїй структурі спектри подібні до спектрів для плівок ALN з текстурою [010], однак у цьому дослідженні кромка поглинання зміщується в середньому на 0.3 eB у напрямку зменшення енергії фотонів. Можлива причина відмінностей значень смуги пропускання для плівок з різними текстурами є сильним анізотропним характером структури кристалів з шаруватими ALN.

У дослідників наразі відсутні погодження стосовно енергетичного розриву зони ALN, період значення опорної зони для тонких плівок ALN становить 6.09 eB, отриманий для моно-кристалів



Рис. 1.4. Типові електронномікроскопічні зображення поверхні зразка (а, c, e) та фрактограми (b, d, f) для нанесених конденсатів на скло (a, b), ITO (c, d) та Молібден (e, f).

Однак в останні роки в різних матеріалах на тонких плівках ALN були задані значення енергетичного зазору між діапазонами від 6.2 до 6.7 eB в залежності від технології і умов росту конденсату, а також товщини мікроструктурної плівки. Теоретичні оцінки структури конденсатів ALN також призводять до різних значень. Зокрема, значення для прямих зонних переходів становить 5.8 eB, тоді як значення для першої межі поглинання становлять 6,26 eB, що є найближчим до значення, визначеного в даній роботі. Незважаючи на це, остаточна сума точного значення оптичної смуги променя для α-ALN потребує подальших досліджень.

1.3. Застосування у виготовленні сонячних панелей

Обмежена кількість Te i In в природі i токсичність Cd i Se в CdTe i CuInGaSe₂ сонячних елементів, можна було б подолати альтернативними поглиначами тонкої плівки, такими як або ALN. ALN - це перспективний «альтернативний» матеріал завдяки своїм оптимальним електричним i фізичними властивостями. Більш того, було доведено, що для підвищення ефективності фото перетворення сонячних елементів необхідна надзвичайно висока якість прошарків ALN.

Щоб подолати екологічні проблеми типових тонкоплівкових сонячних елементів і усунути будь-які можливі обмеження в масовому виробництві пов'язані з нестачею матеріалу (в основному в Ga), в 1998 р. був представлений новий сонячний прилад з Cu₂ZnALN₄ (CZTS) в якості поглинача прошарків. Цей елемент має аналогічну структуру пристроїв сонячних елементів Cu (In, Ga) Se₂ () але індій і галій заміщені більш рясним цинком і оловом. Для CZTS спіновий покриття розчину прекурсору є однією 3 найбільш успішних технологій продемонстрували високоефективні пристрої, підготувавши рішення CZTS на основі гідразину. Найкраща ефективність клітин склала 9,66%, поліпшена до 10,1% і 12,6% - за сонячної кордоні. Однак можна отримати тонкоплівковий матеріал CZTS з більш промислово-масштабований і екологічно чистий процес, такий як розпорошення.

Іншим найбільш перспективним «альтернативним» матеріалом є ALN, який має непряму заборону на розрив 6.0 eB, пряму смуга пропускання 6.3 eB і коефіцієнт поглинання, який перевищує 10⁴ см⁻¹ у видимому оптичному

діапазоні. Фотоперетворювальні елементи ALN мають теоретичну межу ефективності перетворення енергії вище за 20% і ідеальну густину струму короткого замикання вище за 30 мА / см²

Більш того, завдяки своїй простій стехіометрії різні лабораторії де використовують телурид кадмію CdTe підійшли до неї як до способу замінити CdTe, маючи на увазі, що з'єднання з двома елементами буде простіше для контролю в порівнянні з CZTS. Однак останні результати, представлені в науковій оглядах літератури, показують інша історія; сонячні елементи були виготовлені з досить низькою ефективністю.

АLN утворює орторомбічну кристалічну структуру, відповідної просторової групі : там елементарна комірка складається з подвійних прошарків, покладених один на одного зі слабким Ван Дер Ваальсівським зв'язком уздовж вісі а, а атоми всередині прошарків є ковалентно обмежені трьома сусідніми атомами кристалічної гратки. Розрахунок дефектів даного матеріалу передбачає, що провідність *p*-типу зумовлена швидким утворенням вакансій алюмінію, які виконують роль акцепторів.

Тонкі плівки ALN для виготовлення сонячних елементів були підготовлені шляхом різного фізичного осадження методи, такі як термічне випаровування, розпорошення та інші. Більш того, також застосовуються хімічні методи осадження, зокрема: хімічне осадження ванни, електрохімічне осадження, адсорбція і реакція іонного шару, спрей піроліз і осадження атомного шару.

Алюміній взаємодіючи з азотом утворює декілька бінарних сполук включаючи ALN (ромбічну), ALN₂ (тригональную), Al₂N₃ (ромбічний), Al₃N₄ (тетрагональна), Al₄N₅. Таким чином, згідно з різними ініціативними умовами різні бінарні фази можуть співіснувати впливаючи на особливості матеріалу поглинаючого шару. Крім того, зміни в стехіометричному складі можуть призводити до інверсійності типу провідності, або p- або n-типу. Велика частина роботи, виконаної до сих пір для сонячних батарей ALN, була спрямована на фізичне і електричне якість поглинача, велика кількість публікацій повідомляють про широкі методи осадження, кожен з різними відповідними властивостями матеріалу. У наступних матеріалах наводяться деякі з найбільш цікавих результатів.

В оглядах літератури було вироблено виробництво діодів тонкої плівки ALN_2 / ALN за допомогою плазмового хімічного описується спосіб осадження з парової фази: структура осередку є скло / TCO / n-тип ALN_2 / p-type ALN / Al і кращі осередки, виконані з напругою розімкнутого ланцюга (Voc) 0,35 В і коротке замикання щільність струму (Jsc) 1,5 мA / см², Полікристалічні тонкі плівки ALN, отримані розпиленням піролізу, використовували для створення сонячного елемента в поєднанні з сульфідом кадмію, легованих індієм, у вигляді віконного шару (p-ALN / n-Si: In). Кращу ефективність перетворення сонячної енергії 1.3%, з Voc 361 мB, Jsc 9.6 мA / см², коефіцієнт заповнення FF - 33%, про які повідомлялося.

Дослідження тонкоплівких ALN / Si гетеропереходів, отриманих методом термічного випарування і їх особливості з'єднання до і після відпалу віконного шару з CdCl2 дозволили поліпшити його кристалличность з ефективністю перетворення сонячної енергії, відповідно, 0,05% і 0,08%.

Тонкі плівки нітриду алюмінію, нанесені на скляну підкладку, покриту молібденом, методом осадження гарячої стінкою і сонячні елементи зі структурою скла / Mo / p-ALN / n-Si / ZnO повідомляються з наступними параметри продуктивності $V_{oc} = 132$ мB, Jsc = 3,68 мA / см², FF = 29% і з сонячної конверсівной ефективністю 0,5%.

Перший сонячний елемент, представлений з використанням цього осадження показав ефективність 0,17% [1] ($V_{oc} = 155 \text{ MB}$, $J_{sc} = 3,42 \text{ MA} / \text{ cm}^2 \text{ i}$ FF = 31,8%). Сонячні елементи в сверхпроводящей конфігурації зі структурою скла / ZnO: Al / Si / ALN / Au були отримані шляхом термічного

випаровування як Si, так і ALN [1], отримання перетворення сонячної енергії з ККД 1,6%, що є найвищою зареєстрованої вартістю пристроїв з термічно обложеним Si в якості буферний шар з V_{oc} 208 мB, J_{sc} 17,9 мA / см², і FF - 38%.

Однак повідомлялося, що Si не є ідеальним поєднанням для сонячних елементів ALN через невідповідність енергетичних смуг з ALN на стику. З цієї причини багато пристроїв були представлені з альтернативними буферами.

Нанесені тонкоплівкові сонячні елементи ALN зі структурним склом / Mo / ALN / Zn (O, S) / ZnO / ITO шляхом імпульсного хімічного осадження з парової фази (імпульсний CVD) з подальшим осадженням ALD буфера Zn (O, S) шар [2]. Отримано сертифікована ефективність 2,04% при $J_{sc} = 19,4$ мА / см², V_{oc} = 244 мB, і FF = 43,0%. Після оптимізації поглинача ALN і Zn (O, S) буфера, та ж група повідомила поліпшена ефективність клітин 2,9%. Крім того, шляхом осадження поглинача ALN через ALD і реалізуючи серію п'яти оптимізації етапів сонячних елементів (спрямованих на зменшення фотогенерації рекомбінації носіїв заряду) тим же авторам вдалося досягти рекордної ефективності 4,36% для сонячних елементів на основі ALN. Дещо менша ефективність 3,88% була отримана тією ж групою вакуумним випаровуванням.



Рис. 1.5. Нормалізована ефективність сонячних елементів, вироблених із ініційованого ALN: неочищені (чорні, квадратні точки), відпалені у вакуумі (червоні, кругові точки) і відпалені в Ar (сині, алмазні точки).

У всіх трьох випадках XRD підтвердив, що аналізований матеріал був орторомбічним ALN. Проте відносна інтенсивність дифракційних піків була різною, це можна пояснити переходом який складається з подвійного циклу сублімації та конденсації, підкореної ALN.

РОЗДІЛ 2

МОДЕЛЮВАННЯ ФІЗИЧНИХ ПРОЦЕСІВ У СОНЯЧНИХ ЕЛЕМЕНТАХ

2.1Схема заміщення ідеального фотоелементу

При моделюванні ВАХ СЕ та розрахунках їх основних параметрів може бути використана схема заміщення, яка представлена на рис. 2.1 [16]. Оскільки фотоперетворювач являє собою гомо- або ГП, він може бути представлений у вигляді випрямного діода та джерела струму. Джерело струму *J* моделює створений у фотогальванічному елементі під дією фотонів світла струм. При постійній температурі та потужності сонячного випромінювання він постійний, і на еквівалентній схемі заміщення позначається, як *I*_{sc}.



Вихідний струм фотоелементу на основі p-n та ГП переходу, у відповідності до рис. 1.1, можна знайти за законом Кірхгофа:

$$I = I_{sc} - I_D = I_0 \left[\exp(\pm \frac{eU}{AkT}) - 1 \right], \tag{1}$$

де *I* – це вихідний струм фотоелемента;

*I*_D – це струм діоду еквівалентної схеми заміщення;

*I*₀ – це зворотний струм насичення діоду;

е-це заряд електрона;

U – це вихідна напруга фотоелементу;

k – це стала Больцмана;

А – це діодний коефіцієнт або коефіцієнт ідеальності переходу;

T – це робоча температура р-п переходу.

При розгляді роботи реальних СЕ потрібно враховувати їх послідовний опір та опір витоку. Тоді вираз для опису ВАХ запишеться у вигляді

$$I = I_0 [\exp \frac{e(U - IR_s)}{AkT} - 1] + \frac{(U - IR_s)}{R_p},$$
 (2)

де *R*_s - послідовний резист фотоелементу;

*R*_{*p*} - шунтуючий резист.

Коефіцієнт корисної дії фотоперетворювача розраховується за наступною формулою

$$\eta = \frac{FF \cdot I_{sc} \cdot U_{oc}}{P},\tag{3}$$

де *P* – це потужність випромінювання, що падає на CE;

FF – це фактор заповнення ВАХ, який дорівнює

$$FF = \frac{I_m \cdot U_m}{I_{sc} \cdot U_{oc}},\tag{4}$$

де *I_m* та *U_m* – це густина струму та напруга, що відповідають найбільшій потужності приладу.

При роботі СЕ відбуваються наступні процеси:

- 1. Генерація електронно-діркових пар під дією випромінювання;
- 2. Дифузія неосновних фотогенерованих носіїв до р-п або ГП;
- 3. Розділення носіїв переходом;
- 4. Їх збирання омічними контактами.

На ефективність СЕ впливає велика кількість параметрів як самого приладу так і напівпровідникових матеріалів на основі яких він створений. Але основні втрати енергії пов'язані з відбиттям сонячного випромінювання від поверхні перетворювача, проходженням частини світла через фотоелемент без поглинання, поверхневою, міжфазною та об'ємною рекомбінацією генерованих носіїв заряду, внутрішнім та контактним опором приладу тощо [1,2].

2.2 Огляд можливостей моделюючого програмного засобу SCAPS

SCAPS, скорочено від «Solar Cell Capacitance Simulator», є прикладною програмою Windows, що розроблена під керівництвом Марка Бургельмана в університеті Гента [16]. Дане програмне забезпечення було розроблено для реалістичного моделювання електричних характеристик (на постійному та змінному струмі) фотоперетворювачів з ГП, і використовується в основному для моделювання властивостей тонкоплівкових CE на основі поглинаючих прошарків CdTe i Cu(In,Ga)Se₂. Вхідні дані, необхідні для моделювання процесів у CE, зберігаються у ASCII файлі, який може бути прочитаний або повністю відредагований за допомогою графічного інтерфейсу користувача SCAPS [16].

Програмне забезпечення SCAPS являє собою безліч панелей, розроблених на базі програмного компонента Labwindow/CVI (National

Instruments^{тм}), у яких користувач може встановлювати параметри або в яких показуються кінцеві результати розрахунків. Програма дозволяє моделювати наступні характеристики матеріалів: темнові та світлові ВАХ (I-V), вольтфарадні характеристики (C-V), залежності ємності від частоти (C-f) і залежності величини квантового виходу від довжини хвилі (Q-λ). На рис. 1.2. наведено зображення початкових керуючих елементів інтерфейсу програмного забезпечення:

1) кнопка «Set Problem» задає параметри розрахунків: геометрію та особливості матеріалів, конфігурацію сонячного елемента;



Зупинимося більш докладно на функціональному огляді керуючих елементів інтерфейсу програмного забезпечення. До головних параметрів, які потрібно задати при розрахунках основних характеристик CE (рис. 1.3), можна віднести:

-Working poir Temperature (K	nt 280.00
Voltage (V)	0.3000
Frequency (Hz)	\$ 1.000E+4
Number of points	\$5

1с. 2.3 – Елемент інтерфесу програмного забезпечення SCAPS

• температуру експерименту *T*, це стосується всіх симуляцій вимірювань;

• напругу V, вона не береться до уваги у випадку проведення симуляцій вольт-амперних (I-V) та вольтфарадих (C-V) вимірювання. Ця величина являє собою постійну напругу зміщення при частотно-ємкісних (C-f) моделюваннях і моделюваннях вимірюваннях квантового виходу ($QE(\lambda)$). SCAPS завжди починає розрахунки зі значення в 0 В та піднімається до заданого значення V за кількість розрахункових кроків, яке також необхідно задати;

• частоту f: не береться до уваги у випадку проведення моделювання вольт-амперних (*I-V*) характеристик, характеристик квантового виходу ($Q_E(\lambda)$) або ємкісно-частотних (*C-f*) симуляцій. Задає частоту, на якій проводиться моделювання вольт-фарадної характеристики (*C-V*);

освітлення: стосується всіх симуляцій на світу. У випадку моделювання квантового виходу, визначає умови фотогенерації. Базові параметри: світловий або темновий режим. Є можливість завдання сторони освітлення СЕ, спектру. За замовчуванням використовується значення в АМ-1.5 (1000 Вт/м²), також є можливість встановлення монохроматичного освітлення та спектра для спеціалізованих симуляцій [16].

При кожному розрахунку діючий параметр (V, f або I) змінюється в заданому діапазоні, в той час як інші параметри мають значення, задані у робочій таблиці. Користувач може встановити особливості проміжних напівпровідникових прошарків (максимум 7) фотоперетворювача натисканням кнопки «Додати шар» (Add Layer) на панелі властивостей CE. Опис характеристик прошарків відкривається в новому вікні (рис. 2.4) [16].



Рис. 2.4 – Вікно встановлення властивостей прошарків СЕ [16]

Користувач може ввести назву та задати особливості матеріалу нового E_{g} , товщину, χ , і т.п. Експонентний закон поглинання світла шару: всіх напівпровідникових прошарків передбачається для або Ж характеристики поглинання можуть бути взяті з певного файлу користувача. Таким чином задовольняються вимоги до традиційних тонкоплівкових фотоперетворювачів, які проектуються з розрахунком на компроміс між високим рівнем струму за умови малої ширини забороненої зони напівпровідника та високою напругою при умові великої ширини забороненої зони [16].

При створенні сучасних СЕ використовуються більш складні стратегії поєднання матеріалів з різною E_g , які в більшості випадків зводяться до градації матеріалів за величиною $E_g(x)$ та іншими властивостями. Програма передбачає можливість задання майже всіх властивостей матеріалів у вигляді таблиці від координати x: спорідненість до електрону $\chi(x)$, коефіцієнт поглинання $\alpha(x,\lambda)$, ефективна густина станів $N_C(x)$, $N_V(x)$, концентрація домішок $N_C(x)$, $N_A(x)$ рухливість $\mu_n(x)$, $\mu_p(x)$ та рекомбінаційні особливості $N_t(x)$, $\sigma_n(x)$, $\sigma_p(x)$ і т. ін. В наведеному вище випадку, використовується файл CdTe.abs, який йде у комплекті до програмного забезпечення SCAPS (в коментарі до нього зазначено джерело даних: «absorption data CdTe taken from S. Adachi "Optical constants of crystalline and amorphous semiconductors" pp.538-545») [16].

Для реалістичного моделювання процесів у СЕ на основі полікристалічних ГП програма повинна відповідати декільком вимогам. Проаналізуємо ці вимоги, та методи їх врахування в SCAPS [16].

У кожному шарі СЕ можна визначити тип (донор або акцептор) і концентрацію мілких центрів; вони повністю іонізовані і не беруть участь у рекомбінації. Можна задати присутність у матеріалі до трьох глибоких рекомбінаційних рівнів. Рекомбінація носіїв на цих рівнях і їх положення описуються моделлю Шоклі-Ріда-Холла (SRH), виходячи з якої їх заряд визначається енергетичним положенням рівня та типом центрів (донор або акцептор, нейтральний дефект або центр, що не має заряду) [16].

Рівні, що знаходяться у забороненій зоні матеріалу можуть бути моно енергетичними чи описуватися якимось розподілом (рівномірний розподіл рівнів, Гаусівський або експоненціальний розподіл).

22

Концентрація мілких або глибоких рівнів також може змінюватися у просторі (рівномірно, стрибками, лінійно, експоненціально, розподіл також можна задавати з файлу) [16].

Рис. 2.5 демонструє панель, яка з'являється після натискання кнопки «Add a defect» на панелі визначення властивостей матеріалів прошарків.

defect type	Neutral
capture cross section electrons (cml)	1.000E-15
capture cross section holes (cml)	1.000E-15
energetic distribution	Single
reference for defect energy level Et	Above EV (SCAPS < 2.7)
energy level with respect to Reference (e∨)	0.600
characteristic energy (eV)	0.100
no Nt grad	ing (uniform) 🔫
Optical capture of electrons	file
refractive index (n) effective mass of electrons (rel.) effective field ratio cut off energy (eV) optical electron capture cross sections file;	1.000E+0 1.00E+0 1.00E+0

Рис. 2.5 – Вікно задання властивостей дефектів у матеріалі шару CE [16]

На цій панелі користувач може визначити тип дефектів (донор, акцептор, нейтральний), перетин захоплення електронів і дірок (σ_n , σ_p), розподіл дефектів за енергією, розташування їх у забороненій зоні матеріалу та концентрацію дефектів [16].

Програма SCAPS дозволяє врахувати рекомбінацію носіїв на приповерхневих станах, що виникають на границях розділу матеріалів. Квазирівні Фермі у цьому випадку можуть мати розриви на границях прошарків. Рекомбінація через приграничні стани моделюється з використанням теорії Пауелза-Ванхутта [16]. Ця теорія є доповненням

класичної моделі Шоклі-Ріда-Хола стосовно об'ємної рекомбінації. Згідно з даною моделлю приграничні стани обмінюються носіями з чотирма зонами замість двох (стандартна класична теорія), тобто зоною провідності й валентною зоною обох напівпровідників що граничать між собою. Ймовірність заповнення приграничних станів в такому випадку визначається чотирма концентраціями носіїв заряду замість двох. Приграничні стани характеризуються поверхневою густиною, енергетичним положенням і чотирма перетинами захоплення. У програмному пакеті SCAPS пограничні стани можуть бути розподілені по енергіях так само, як і об'ємні стани.

Кнопка «Границі» (interfaces) на панелі властивостей СЕ, використовується для програмування властивостей пограничних станів, та стає активною після вибору як мінімум двох прошарків приладу [16].

В SCAPS квантова ефективність визначається шляхом моделювання густини струму двічі. Перший раз – у робочій точці при певній напрузі зміщення та освітленості СЕ, а другий раз – в умовах експлуатаційної точки із відомим числом монохроматичних фотонів. Різниця цих значень представляється в якості квантової ефективності [16].

При розрахунках струму з відомою конфігурацією та матеріалами прошарків зі сталими параметрами, рушійними силами € градієнт потенціалу електростатичного ∇E (дрейфовий струм) градієнт та концентрації ∇n , ∇p (дифузійний струм). При введені градієнту концентрації по товщині фотоперетворювача, необхідно додати до розрахунків: градієнт спорідненості до електрону $\nabla \chi$, градієнт ширини забороненої зони ∇E_e та градієнти ефективної густини станів в зоні провідності та валентній зоні $\nabla(\log N_c)$, $\nabla(\log N_v)$. Окрім того, рівняння матеріалів: нерозривності електронів та дірок модифікують врахувавши присутність градієнта рухливості носіїв $\nabla \mu_n$ або $\nabla \mu_p$, а рівняння Пуассона - градієнта діелектричної сталої матеріалу ∇ ε [9, 16].

Наведемо алгоритм процесу розрахунків дифузійно-дрейфових струмів у СЕ шляхом проведення ітераційної процедури (Рис. 1.6).

Дискретизована дифузійно-дрейфова модель достатньо добре описана у оглядах літератури та являє собою основний числовий метод розрахунку при моделювання процесів у напівпровідникових СЕ [8, 10, 16].



Рис. 2.6 – Алгоритм числового розв'язання біполярної дрейфдифузної системи рівнянь Пуассона [16]

РОЗДІЛ З

РЕЗУЛЬТАТИ ЧИСЛОВОГО МОДЕЛЮВАННЯ 3.1 Вибір вхідних параметрів для моделювання

Перед тим, як розпочати процедуру моделювання, необхідно, перш за все, задати вхідні параметри матеріалів, що входять до складу фотоперетворювача, такі як, наприклад, товщина віконного та поглинаючого шару (*d*), ширина 33 матеріалів (E_g), їх електронна спорідненість (χ), діелектричні сталі напівпровідників ($\varepsilon/\varepsilon_o$), рухливості електронів та дірок (μ), тощо.

Зі світлових ВАХ СЕ в подальшому визначалися такі важливі параметри фотоелектричних приладів як:

- напруга холостого ходу U_{OC} ;
- струм короткого замикання *J_{SC}*;
- фактор заповнення *FF*;
- коефіцієнт корисної дії η.

Базові вхідні параметри прошарків, що використовувалися для моделювання фізичних процесів у СЕ, наведені в табл. 3.1.

Таблиця 3.1

Шар	<i>n</i> -ZnO	<i>n</i> -Si	<i>p</i> -ALN
Товщина <i>l</i> , мкм	0,05-0,20	0,05-0,20	1,0-3,0
Ширина 33 <i>E</i> _g , eB	3,30	2,40	1,13
Спорідненість електронів χ , eB	4,45	4,70	4,50
Діелектрична стала є/є _о	9,00	10,00	13,60
Густина станів в зоні провідності <i>N_C</i> , см ⁻³	2,20.1018	2,20.1018	2,20.1018
Густина станів в валентній зоні N _V , см ⁻³	1,80·10 ¹⁹	1,60.1019	2,10·10 ¹⁹
Рухливість електронів μ_e , см ² /с	100	100	-
Рухливість дірок μ_h , см ² /с	-	-	320
Ефективна маса електронів <i>m</i> _e	0,21	0,20	-
Ефективна маса дірок <i>m_h</i>	-	-	0,45

Вхідні параметри моделювання процесів у CE ZnO/Si/ALN

3.2 Вплив товщини поглинаючого шару на робочі характеристики гетеропереходу

Товщина поглинаючого шару є важливою характеристикою сонячного елемента, що впливає на кількість поглинутого приладом випромінювання, тому дослідження її впливу на основні електрофізичні характеристики фотоперетворювача є необхідним.

При моделюванні були взяті наступні вхідні параметри: температура навколишнього середовища становила 300 К, товщина віконного шару Si приймалася сталою та складала d = 0,25 мкм. Товщина поглинаючого шару в обох випадках змінювалась в межах d = (1,0-3,0) мкм.

На рис. 3.1 наведені результати числового моделювання вольтамперних характеристик ГП ZnO/Si/ALN в залежності від товщини поглинаючого шару ALN.

Результати моделювання основних характеристик CE на основі ГП ZnO/Si/ALN при освітленні в умовах AM-1,5, наведені в табл. 3.1.

З аналізу результатів моделювання видно, що при підвищенні товщини поглинального шару спостерігається монотонне підвищення ККД СЕ до рівня 16.49 %. При цьому спостерігається відповідне збільшення значень U_{OC} від 0.59 В до 0.61 В, та J_{SC} від 31.08 до 33.74 мА/см². Даний ефект можна пояснити тим, що при товщині абсорбуючого шару 3,0 мкм відбувається насичення поглинальної здатності СЕ і, відповідно, кількості генерованих електронно-діркових пар, в той же час подальше збільшення *d* веде до збільшення послідовного опору приладу та віддалення області генерації носіїв від ГП. В результаті відбувається загальне зниження ККД приладу.

На зниження ККД СЕ при малій товщині поглинаючого шару впливає підвищена рекомбінація генерованих носіїв на глибоких центрах, розташованих на границі розділу поглинаючого шару і струмознімального контакту.



Рис. 3.1. ВАХ (а) та залежність квантового виходу (б) CE ZnO/Si/ALN при різній товщині поглинаючого шару

Товщина шару Sie	U_{OC}, \mathbf{B}	J_{SC} , м A /см ²	FF, %	η, %
<i>d</i> , мкм				
1.0	0.59	31.08	78.61	14.39
1.5	0.60	32.34	79.32	15.41
2.0	0.61	33.05	79.65	15.97
2.5	0.61	33.48	79.68	16.30
3.0	0.61	33.74	79.82	16.49

Вплив товщини поглинаючого шару Sie на електричні особливості ГП ZnTe/Sie та ZnSe/Sie

Як видно з рис. 3.1 б, досліджені СЕ проявляють високу фотоактивність в області довжин хвилі $\lambda = 510 - 630$ нм. Верхня межа фоточутливості відповідає поглинанню в шарі ALN, квантовий вихід при довжині хвилі меншій 510 нм обумовлений поглинанням випромінювання в віконному шарі Si.

Розрахунки свідчать, що фотоактивність у цій області збільшується зі збільшенням товщини шару ALN.

В результаті проведених розрахунків встановлено, що найбільш оптимальною товщиною поглинального шару для CE на основі ГП ZnO/Si/ALN є значення d = 3 мкм. Саме це значення і було використане нами при подальших розрахунках.

3.3 Вплив товщини віконного шару на характеристики СЕ

Товщина віконного шару в ГП є важливою характеристикою, оскільки визначає кількість випромінювання, що надходить до абсорбуючого шару фотоперетворювача, тому дослідження характеру її впливу на електричні особливості СЕ теж є актуальним. Виходячи з попередніх розрахунків, були встановлені оптимальні початкові умови для моделювання основних характеристик СЕ. Товщина поглинального шару у випадках віконного шару була сталою і складала $d_{ALN} = 3$ мкм (1,0 мкм). Товщина віконних прошарків змінювалась в інтервалі: d = (0,02 - 0,25) мкм. Моделювання проводилося при T = 300 К. Результати моделювання наведені в таблиці 3.2.

Таблиця 3.2

Товщина віконного шару <i>d</i> ,	U_{OC} , B	J_{SC} , м A /см ²	FF, %	$\eta, \%$
МКМ				
0.02	0.61	34.53	80.30	17.00
0.05	0.61	33.75	79.82	16.49
0.10	0.61	31.86	80.28	15.62
0.15	0.62	30.69	80.25	15.02
0.20	0.61	29.89	80.24	14.61
0.25	0.60	29.40	80.24	14.35

Вплив товщини віконних прошарків на електричні особливості СЕ на основі ГП ZnTe/Sie та ZnSe/Sie

В результаті проведених розрахунків було встановлено, що при підвищенні товщини віконного шару від 0,02 до 0,25 мкм спостерігається зниження ККД СЕ майже на 3 %.

Відповідні світлові ВАХ та спектральні залежності квантового виходу СЕ на основі ГП ZnO/Si/ALN, наведені на рис. 3.2. При збільшенні товщини віконного шару Si в ньому починає поглинатися більша кількість фотонів з енергією $hv > E_g$ матеріалу. Це призводить до зменшення значення квантового виходу CE в області довжин хвиль випромінювання $\lambda < 510$ нм.

На рис. 3.2 б наведені спектральні залежності квантового виходу СЕ в залежності від товщини плівки Si. Як видно з рисунку, внаслідок більшої ширини 33 матеріалу віконного шару розширюється область фоточутливості СЕ в ультрафіолетовій частині спектру. Зміна товщини Si приводить до незначної зміни квантового виходу фотоперетворювачів при енергіях, більших E_g сульфіду кадмію.

Моделювання процесів, що відбуваються у СЕ на основі ГП, дозволило визначити оптимальні конструкційні характеристики реальних фотоперетворювачів: для ГП ZnO/Si/ALN d_{Si} повинна складати 0,02 мкм; $d_{ALN} = 3$ мкм.



Рис. 3.2. ВАХ (а) та залежність квантового виходу (б) CE ZnO/Si/ALN при різній товщині віконного шару

3.4 Вплив товщини струмопровідного шару на робочі характеристики

Зміна товщини приконтактного шару ZnO також може впливати на ефективність CE. На Рис. 2.3 та в Таблиці 2.3 наведені результати

моделювання світлових ВАХ гетеросистеми в залежності від товщини цього шару.

Таблиця 3.3

Вплив товщини струмопровідного шару на електричні особливості СЕ на основі ГП ZnO/Si/ALN

Товщина віконного шару d,	U_{OC}, \mathbf{B}	J_{SC} , м A /см ²	<i>FF</i> , %	η, %
МКМ				
0.02	0.61	34.78	80.32	17.13
0.05	0.61	34.53	80.30	17.00
0.10	0.61	34.22	80.31	16.84
0.15	0.61	34.06	80.31	16.76
0.20	0.61	33.96	80.31	16.71
0.25	0.61	33.91	80.31	16.68

Як видно 3 результатів розрахунків, при збільшенні товшини струмопровідного шару оксиду цинку значення коефіцієнту корисної дії СЕ зменшується на декілька десятих долей відсотка (від 17,13 % до 16,68 %). Даний факт свідчить про те, що для збільшення ефективності фото необхідною умовою є дотримання перетворення таких фізикотехнологічних умов отримання прошарків, при яких виникала б контактна різниця потенціалів, яка б і забезпечувала фотовольтаїчний ефект.

На рис. 3.4 приведені узагальнюючі залежності фактору заповнення FF та коефіцієнту корисної дії η від товщини поглинаючого шару ALN, віконного шару Si та струмопровідного шару ZnO. Приведені результати свідчать про те, що найбільш оптимальними фізико-технологічними умовами отримання CE на базі ГП ZnO/Si/ALN, при яких ефективність

фотоперетворення максимальна, є наступні: $d_{ALN} = 3,0$ мкм; $d_{Si(ZnO)} = 0,02$ мкм; абсолютна температура T = 300 К.



Рис. 3.3. ВАХ (а) та залежність квантового виходу (б) CE ZnO/Si/ALN при різній товщині струмопровідного шару



Рис. 3.4. Залежності фактору заповнення (а, в, д) та коефіцієнту корисної дії (б, г, е) від товщини поглинаючого (а, б), віконного (в, г) та струмопровідного (д, е) прошарків СЕ на основі гетеропереходу ZnO/Si/ALN

ВИСНОВКИ

1. В результаті моделювання фізичних процесів, які відбуваються при освітленні СЕ встановлено, що максимальна ефективність фотоперетворювачів на основі ГП ZnO/Si/ALN з оптимальною конструкцією (товщина поглинаючого шару $d_{ALN} = 3$ мкм, товщина віконного шару $d_{Si} = 0,02$ мкм, товщина струмопровідного шару d_{ZnO} , T = 300 K) може сягати значень $\eta = 17,13\%$ ($U_{oc}=0,61$ B, $J_{sc}=34,78$ мA/см², *FF*=80,32 %).

 Відповідні прилади мають широку область фоточутливості, яка лежить в інтервалі λ = (510 - 980) нм. Даний факт говорить про те, що гетеро системи такої конструкції мають широкий діапазон експлуатаційного вибору.

3. Подальше збільшення товщини поглинаючого шару ALN на величину, більшу ніж 3 мкм, є недоцільним, так як сааме при цій товщині відбувається насичення поглинальної здатності фотоперетворювача та кількості генерованих електронно-діркових пар. В той же час збільшення товщини поглинаючого шару призводить до підвищення послідовного опору приладу та віддалення області генерації носіїв заряду від гетеропереходу.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

- Poortmans J. Thin Film Solar Cells: Fabrication, Characterization and Application / J. Poortmans, V. Arkhipov // John Wiley&Sons, Chichester. – 2006. – P. 502.
- Poly-crystalline CdTe thin films for photovoltaic applications / A. Bosio, N. Romeo, S. Mazzamuto, V Canevari // Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials. 2006. V. 52, №4. P. 247-279.
- Морозова Н.К. Сульфид цинка. Получение и оптические свойства / Н.К. Морозова, В.А. Кузнецов. – Москва: Наука, 1987. - 200 с.
- Георгобиани А.Н. Широкозонные полупроводники А₂В₆ и перспективы их применения / А.Н. Георгобиани // УФН. – 1974. – Т. 113 (1). – С. 129 -155.
- Корбутяк Д.В. Телурид кадмію: домішково-дефектні стани та детекторні властивості/ Д.В. Корбутяк, С.В. Мельничук.- К.: Іван Федоров, 2000. -198 с.
- Гринев Б.В. Рыжиков В.Д., Семиноженко В.П. Сцинтиляционные детекторы и системы контроля радиации на их основе / Б. В. Гринев, В. Д. Рыжиков, В. П. Семиноженко.- К : Наукова думка, 2007.- 446 с.
- Kasap S. The springer handbook of electronic and photonic materials / S. Kasap, P. Capper // Springer. – Berlin. – 2007. – P. 1406.
- Snowden C. Introduction to semiconductor modelling / World Scientific, 1986.
- 9. Burgelman M. Marlein J Analysis of graded band gap solar cells with SCAPS
 / 23rd European Photovoltaic Solar Energy Conference Valencia. 2008. –
 P. 2151-2155

- Bugelman M. Modeling polycrystalline semiconductors solar cells / M. Bugelman, P. Nollet, S. Degrave // Thin Solid Films. 2000. №3. P. 89-94.
- 11. Kurbatov D. Substrate-temperature effect on the microstructural and optical properties of ZnS films obtained by close-spaced vacuum sublimation/
 D. Kurbatov, H. Khlyap, A. Opanasyuk //Phys. Stat. Sol. A. 2009. V.206, №7. P.1549-1557
- Фаренбрук А. Солнечные элементы. Теория и эксперимент /А.Фаренбрук, Р. Бьюб. – Москва: Энергоатомиздат, 1987. – 280 с.
- Калинкин И.П. Эпитаксиальные пленки соединений А2В6 /И.П.Калинкин, В.Б. Алесковский, А.В. Симашкевич. – Ленинград: Издво ЛГУ, 1978. – 311 с.
- 14. Шарма Б.Л. Полупроводниковые гетеропереходы / Б.Л. Шарма,
 Р.К.Пурохит. Москва: Советское радио, 1979. 232 с.
- Морозова Н.К. Сульфид цинка. Получение и оптические свойства / Н.К. Морозова, В.А. Кузнецов. – Москва: Наука, 1987. - 200 с.
- 16. Кобяков О.М. Методичні вказівки до виконання лабораторної роботи «Числове моделювання робочих характеристик сонячних елементів з використанням програмного пакету SCAPS-3302» з дисципліни «Фізикотехнологічні основи перетворення електричної енергії» / О.М. Кобяков, Ю.С. Єрьоменко, А.С. Опанасюк, М.М. Іващенко // Суми, СумДУ, 2015. – 28 с.