

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)

_____ 2024 р.

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА

на здобуття освітнього ступеня

бакалавр

(бакалавр / магістр)

зі спеціальності 171 Електроніка,
(код та назва)

освітньо-професійної програми Електронні інформаційні системи
(освітньо-професійної / освітньо-наукової) (назва програми)

на тему: Чисельне моделювання та оптимізація двовимірних
фотоелектричних перетворювачів

Здобувача групи ЕІз-01б Приймака Олександра Анатолійовича
(шифр групи) (прізвище, ім'я, по батькові)

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

(підпис)

Олександр ПРИЙМАК

(Ім'я та ПРІЗВИЩЕ здобувача)

Керівник викладач, к.ф.-м.н., доцент, Іван БУРИК
(посада, науковий ступінь, вчене звання, ім'я та ПРІЗВИЩЕ) (підпис)

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

АНОТАЦІЯ

Фотогальванічні елементи із гетеропереходами на основі двовимірних матеріалів мають значну перспективу застосування у галузі відновлюваної сонячної енергетики. Основні переваги останніх включають високу ефективність перетворення сонячної енергії та стабільність роботи протягом тривалого часу. Однак, для досягнення максимальної продуктивності необхідно дослідити та оптимізувати ці елементи.

Метою роботи є чисельне моделювання гетеропереходу $n\text{-MoS}_2/p\text{-CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ та визначення оптимальних параметрів для підвищення ефективності перетворення сонячної енергії.

У результаті проведених досліджень було здійснено ряд комп'ютерних симуляцій структур фотоелектричних перетворювачів сонячної енергії, набуто навичок роботи з транспортними моделями, а також зроблено висновки щодо особливостей їх застосування.

Робота складається зі вступу, трьох розділів основної частини та висновків. У першому розділі наведено огляд фізичних основ принципу дії, властивостей, особливостей будови та класифікація фотогальванічних елементів на основі двовимірних гетеропереходів. У другому розділі описано методику дослідження, опис програмного забезпечення та вхідні дані для комп'ютерної симуляції електричних параметрів гетеропереходу $n\text{-MoS}_2/p\text{-CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$. У третьому розділі проаналізовано результати досліджень структури та електричних параметрів, розглянуті методи оптимізації характеристик двовимірних гетеропереходів.

Робота викладена на 39 сторінках, у тому числі включає 11 рисунків, 5 таблиць, список цитованої літератури із 45 джерел.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: фотовольтаїчні пристрої, двовимірні матеріали, р-n-гетероперехід, електричні параметри, комп'ютерна симуляція

ЗМІСТ

	Стор.
ВСТУП	4
РОЗДІЛ 1. ОГЛЯД ХАРАКТЕРИСТИК ДВОВИМІРНИХ ФОТОГАЛЬВАНІЧНИХ ПРИСТРОЇВ	5
1.1. Властивості та застосування 2D матеріалів	5
1.2. Класифікація 2D фотогальванічних пристроїв	12
1.3. Електричні параметри фотоелектричних перетворювачів	15
РОЗДІЛ 2. МЕТОДИКА І ТЕХНІКА ЕКСПЕРИМЕНТУ	18
2.1. Алгоритм чисельного моделювання та визначення параметрів	18
2.2. Вхідні дані моделювання гетеропереходу n-MoS ₂ /p-CH ₃ NH ₃ PbI ₃	20
РОЗДІЛ 3. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ	24
3.1. Характеристики гетеропереходу n-MoS ₂ /p-CH ₃ NH ₃ PbI ₃	24
3.2. Розмірні залежності параметрів поглинального шару	26
3.3. Розмірні залежності параметрів віконного шару.....	28
3.4. Оптимізація властивостей 2D p–n гетеропереходів.....	30
ВИСНОВКИ	33
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	34
ДОДАТОК А. СЛАЙДИ ПРЕЗЕНТАЦІЇ РОБОТИ	39

ВСТУП

Двовимірні (2D) фотовольтаїчні пристрої (PVD - photovoltaic devices) на основі гетеропереходу n-MoS₂/p-CH₃NH₃PbI₃ є різновидом фотогальванічних пристроїв, які перетворюють сонячне світло в електричну енергію. На відміну від традиційних кремнієвих сонячних елементів, останні виготовляються за допомогою технологічного процесу для гнучкої електроніки. Основні переваги цих сонячних елементів – це їхня економічна ефективність, легкість та можливість ефективного збору світла навіть за відносно низьких температур [1-8]. Однією з ключових переваг є те, що їх можна виготовляти з недорогих матеріалів, що робить їх привабливим варіантом для масштабного виробництва сонячної енергії. У всьому світі доступні багато матеріалів для виробництва двовимірних структур, тоді як традиційні сонячні елементи часто залежать від рідкісних та дорогих матеріалів. Це робить їх потенційно реалістичною заміною іншим типам сонячних елементів з широким спектром застосування, зокрема в районах з обмеженими ресурсами або доступом до високотехнологічних технологій. Незважаючи на свій потенціал, двовимірні фотоперетворювачі все ще стикаються з багатьма викликами, які потрібно подолати, перш ніж вони зможуть конкурувати з традиційними сонячними елементами. Це включає покращення їх ефективності, стабільності та довговічності, а також зниження вартості виробництва. Однак постійні дослідження та розробки в цій галузі роблять значні кроки вперед, і двовимірні сонячні елементи продовжують розглядатися як перспективна альтернатива традиційним.

Проведення комплексних досліджень та оптимізацій у цих напрямках допоможе максимально розкрити потенціал фотогальванічних елементів на основі гетеропереходів двовимірних матеріалів і сприяти їх впровадженню у практичні застосування.

РОЗДІЛ 1 ОГЛЯД ХАРАКТЕРИСТИК ДВОВИМІРНИХ ФОТОГАЛЬВАНІЧНИХ ПРИСТРОЇВ

1.1. Властивості та застосування 2D матеріалів

2D матеріали є двовимірними кристалічними структурами з товщиною всього в один або кілька атомів. Завдяки своїм унікальним електронним, оптичним та механічним властивостям, ці матеріали привертають значну увагу в наукових та технологічних дослідженнях. Ці матеріали характеризуються високою рухливістю носіїв заряду, наявністю напівпровідникових та провідникових характеристик, низькою ефективною масою електронів, високою прозорістю у видимому спектрі, інтенсивною фотолюмінесценцією, регульованими оптичними властивостями (ширина забороненої зони залежить від товщини), високою міцністю та гнучкістю, високою термічною та хімічною стійкістю, високою теплопровідністю та відмінною стійкістю до термічних коливань. Їх застосовують в електроніці (транзистори, гнучка електроніка, інтегральні схеми), оптоелектроніці (фотодетектори, сонячні елементи, світловипромінюючі діоди (LED)), енергетиці (суперконденсатори, акумулятори, водневе паливо), каталізі (каталізатори для водневого синтезу, хімічних реакцій) та біомедицині (біосенсори, доставка ліків, біосумісні матеріали) [1-4].

Відкриття графену у 2004 році стало поштовхом для інтенсивного вивчення інших 2D матеріалів, таких як дисульфід молібдену (MoS_2), гексагональний нітрид бору (h-BN), фосфорен, та інші.

Як основний 2D матеріал графен (Graphene) має структуру одношарового графіту, утворену з атомів вуглецю, розташованих у гексагональній решітці. Має високу електронну рухливість, нульову ширину забороненої зони. Слід відмітити високу міцність та гнучкість графену. Він також має високу прозорість (поглинає лише 2,3% видимого світла).

Застосовується для виготовлення транзисторів, сенсорів, суперконденсаторів, композитних матеріалів.

Дисульфід молібдену (MoS_2) - тришаровий матеріал з молібденом між двома шарами сірки. Напівпровідник з шириною забороненої зони ~ 1.8 eV у моношлі. Характеризується гнучкістю та високою міцністю. Інтенсивна фотолюмінесценція у моношлі. Застосовується для виготовлення транзисторів, фотодетекторів та каталізаторів. Подібними характеристиками в цьому класі володіють також такі 2D матеріали як MoSe_2 , WS_2 , WSe_2

Гексагональний нітрид бору (h-BN). Гексагональна решітка бору та азоту. Широка заборонена зона ~ 5.9 eV. Висока термічна і хімічна стійкість. Висока прозорість у видимому та УФ-діапазонах. Застосовується для виготовлення ізоляторів, субстратів для інших 2D матеріалів, в УФ-лазерах.

Фосфорен (Phosphorene) представляє собою одношаровий чорний фосфор з хвилястою структурою. Напівпровідник з шириною забороненої зони $\sim 0.3 - 2$ eV, залежно від товщини. Володіє гнучкістю та високою міцністю. Має регульовану ширину забороненої зони. Застосовується для виготовлення транзисторів, фотодетекторів, акумуляторів.

2D матеріали володіють унікальними фізичними та хімічними властивостями, які роблять їх перспективними для широкого спектра застосувань у сучасній науці та технології. Подальші дослідження та розробки в цій галузі можуть призвести до значних проривів у багатьох областях, включаючи електроніку, фотовольтаїку, енергетику та біомедицину.

Як приклад розглянемо застосування 2D-матеріалів у спліт-гейт технології, яка є важливим інструментом у сучасній мікроелектроніці та нанотехнологіях, оскільки вона дозволяє створювати пристрої з високою точністю та функціональністю.

Спліт-гейт (англ. split-gate) — це тип транзистора або пристрою з двома розділеними воротами (затворами), які керують потоком електронів або носіїв заряду в каналі. Кожен з воріт може бути незалежно керованим для

модифікації електричних властивостей каналу. Спліт-гейт конструкції (рис.1.1) дозволяють більш точний контроль над електричними характеристиками і можуть бути використані для створення різних зон в напівпровідникових пристроях, що дозволяє виконувати складні електронні функції на одному чіпі [13-16].

У транзисторах спліт-гейт використовується для покращення контролю над каналом струму, що покращує продуктивність та ефективність пристрою. У квантових точках спліт-гейт застосовується для створення та контролю квантових точок, що важливо для квантових обчислень. Спліт-гейти використовуються у високочутливих сенсорах для покращення виявлення слабких сигналів. Забезпечує більш точний контроль над електричними властивостями каналу. Дозволяє створення складних електронних функцій. Підвищує ефективність і продуктивність напівпровідникових пристроїв.

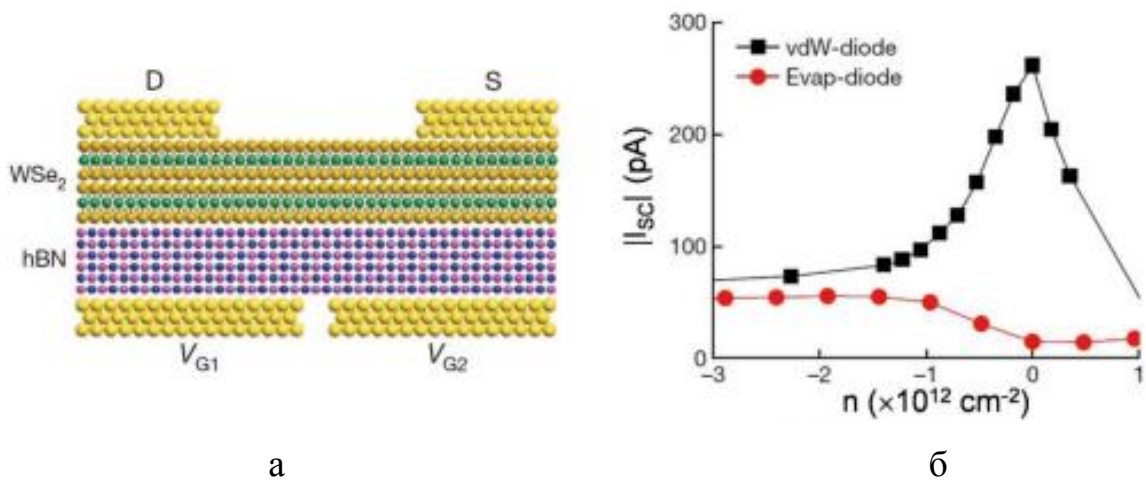


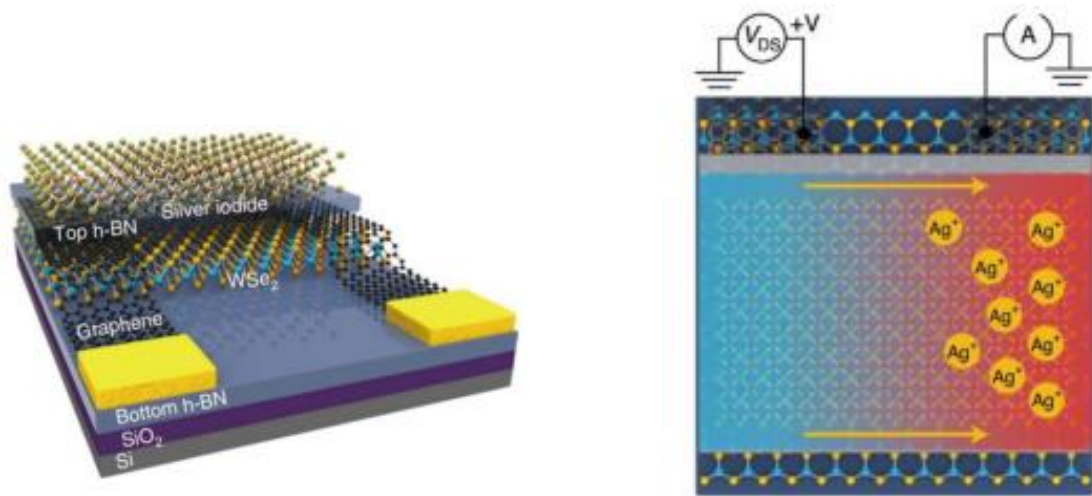
Рис. 1. 1. Схема пристрою WSe₂ зі спліт-гейтом (а) та залежність сили струму I_{sc} від густини носіїв заряду для пристрою з ван-дер-ваальсовим та конденсованим контактами (б). Рисунок адаптовано з роботи [4]

У 2021 році Чен та ін. виготовили пристрої WSe₂ зі спліт-гейтом (рис. 1.1а), щоб модулювати легування електронами та дірками в WSe₂ і дослідили поведінку екситонів під освітленням [4]. Для отримання інтерфейсу з мінімальною рекомбінацією Шоклі-Ріда-Холла використовується vdW-

металевий контакт, що дозволяє реалізувати інтрінзичну фотофізику пристрою. p-n гомоперехід утворюється шляхом модулювання електростатичного поля в геометрії спліт-гейту. Під освітленням спостерігається фотогальванічний ефект, і досліджується I_{SC} під впливом модулювання гейтової напруги. У пристрої з vdW-контактом пік I_{SC} з'являється при низькій густині заряду завдяки модулюванню гейтом (рис. 1.1б). Пік I_{SC} пояснюється зменшеною екситон-зарядовою Оже-рекомбінацією при низькій густині заряду. Однак у пристрої з конденсованим контактом пік I_{SC} зникає через вплив дефектів на інтерфейсі. Слід відмітити, що екситон-зарядова Оже-рекомбінація - це процес рекомбінації, що виникає в напівпровідниках, де екситони (зв'язані стани електрон-дірка) взаємодіють з вільними носіями заряду (електронами або дірками) і рекомбінуються через механізм Оже. У цьому процесі енергія, втрачена при рекомбінації, передається іншому носієві заряду або іншим екситонам, замість того, щоб випромінювати фотон. Це явище може призводити до ефективного зменшення кількості світла, яке конвертується в електричний струм у фотовольтаїчних або фотодетекторних пристроях. Фотогальванічні характеристики значно покращуються завдяки зниженій рекомбінації носіїв, досягаючи EQE 83,6% та V_{OC} 0,75 В у тришаровому пристрої.

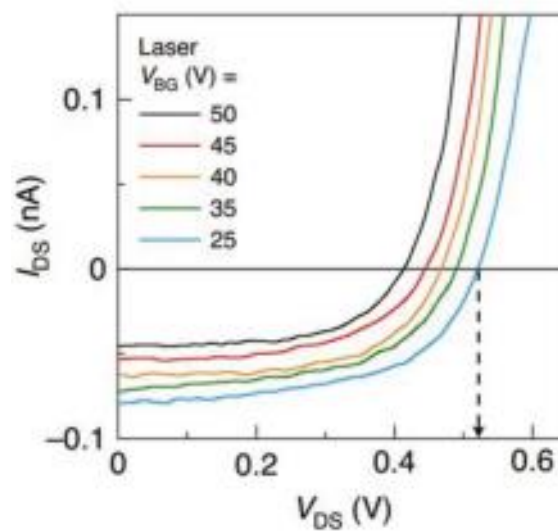
У останні роки досліджувалися нові стратегії легування. У 2020 році Лі та ін. повідомили про оборотне твердотільне легування 2D матеріалів шляхом введення суперіонного шару срібла йодиду у пристрій WSe_2 , як показано на рис. 1.2а [4]. Шляхом застосування електричного поля до пристрою при температурі вище температури переходу у суперіонну фазу, Ag^+ може бути вибірково накопичений або вичерпаний у місцях легування, таким чином, неволатильне (після застосування електричного поля до пристрою легування не зникає) р-типове або n-типове легування може бути оборотно реалізоване у каналі WSe_2 (рис.1.2б). P-n гомоперехід проявляє виразний фотогальванічний ефект з високою V_{OC} приблизно 0,52 В (рис.

1.2в). Крім того, р-п гомопереходи також можуть бути реалізовані за допомогою внутрішньої міграції іонів у 2D матеріалах.



а

б



в

Рис. 1.2. Схема пристрою на основі 2D шару WSe_2 (а), ілюстрація механізму легування пристрою іонами Ag^+ (б) та вольт-амперні характеристики гомопереходу під впливом лазерного опромінення з довжиною хвилі 532 нм (в). Рисунок адаптовано з роботи [4]

У 2023 році Чжу та ін. представили р-п гомоперехід на основі 2D CuInP_2S_6 [4]. Іони Cu^+ мігрують під дією площинного електричного поля, що призводить до утворення областей легування р-типу та n-типу, формуючи

бічний p-n гомоперехід. p-n перехід проявляє виразні прямувальні та фотогальванічні характеристики. Більше того, прямувальна та фотогальванічна поведінка можуть бути ефективно налаштовані та обернуті шляхом зміни напруги поляризації. В результаті досягнуті добрі фотогальванічні характеристики, включаючи V_{oc} 0,3 В і J_{sc} 20 мА/см².

Фотогальванічні пристрої відіграють важливу роль у перетворенні сонячної енергії, зображенні, зв'язку та ін. Хоча широко застосовуються фотогальванічні пристрої на основі традиційних об'ємних напівпровідників, такі обмеження, як низький коефіцієнт поглинання, невідповідність кристалічних ґраток, крихкість і поверхневі висячі зв'язки, перешкоджають подальшому розвитку високопродуктивних і носимих фотогальванічних пристроїв.

2D матеріали привертають все більшу увагу через унікальні оптоелектронні властивості, включаючи поверхню без висячих зв'язків, сильну взаємодію світло-матерія, широкосмугове поглинання та гнучкість. Порівняно з традиційними напівпровідниками, 2D матеріали мають великі переваги у фотогальванічних пристроях. У таблиці 1.1 показано властивості 2D матеріалів та їх значення для фотогальванічних пристроїв.

По-перше, dangling-bond-free surface дозволяє інтегрувати різні 2D матеріали за допомогою ван-дер-ваальсових сил без невідповідності кристалічних ґраток. Тому перенесення носіїв може бути модульовано за допомогою інженерії зон, а широкосмугове поглинання світла може бути досягнуто шляхом укладання 2D матеріалів з різними зонними заборонами. Більше того, така поверхня без висячих зв'язків є самопасивованою, що дозволяє уникнути складного процесу пасивації поверхні.

По-друге, ультратонке тіло 2D матеріалів дозволяє ефективно модулювати електричні властивості за допомогою зовнішнього поля та хімічного оточення, таким чином фотоефективність може бути ефективно модульована, що відкриває нові шляхи для покращення фотогальванічної продуктивності. По-третє, 2D матеріали, такі як дихалькогеніди перехідних

металів, демонструють сильну взаємодію світло-матерія, що показує більше поглинання світла порівняно з об'ємними напівпровідниками на наномасштабній товщині, і таким чином можуть бути досягнуті ультратонкі фотогальванічні пристрої за допомогою 2D матеріалів.

Таблиця 1.1

Властивості 2D матеріалів і їх значення для ФЕП [4]

Властивості 2D матеріалів	Значення для ФЕП
На поверхні матеріалу відсутні неспарені атомні зв'язки (dangling-bond-free surface)	Ван-дер-ваальсова інтеграція: різні 2D матеріали можна легко поєднувати за допомогою слабких ван-дер-ваальсових сил, не створюючи невідповідностей кристалічних ґраток; це дозволяє створювати гетероструктури з покращеними властивостями. Самопасивована поверхня: відсутність висячих зв'язків означає, що поверхня матеріалу природно пасивована, тобто не потребує додаткової обробки для зниження поверхневих дефектів; це спрощує процес виготовлення пристроїв і покращує їхню стабільність та продуктивність
Ультратонке тіло	Сильна модуляція електричних властивостей
Сильна взаємодія світло-матерія	Ультратонкі пристрої з високою продуктивністю
Механічна гнучкість	Гнучкі пристрої

Механічна гнучкість 2D матеріалів робить їх придатними для гнучких і носимих фотогальванічних пристроїв. Таким чином, 2D матеріали відкривають великі можливості для наступного покоління фотогальванічних пристроїв. Досягнуто значного прогресу у розробці 2D фотогальванічних пристроїв. Нагальна потреба в комплексному огляді та прогнозі подальшого розвитку 2D фотогальванічних пристроїв.

Загальні фотогальванічні пристрої потребують внутрішнього електричного поля, де фотоутворені носії розділяються і генерується фотострум. Вбудоване поле може бути створене шляхом виготовлення гетеропереходів, гомопереходів і шоттківських переходів. Самопасивована поверхня 2D матеріалів забезпечує платформу для виготовлення пристроїв через ван-дер-ваальсову взаємодію, а їхня ультратонка природа робить їх дуже чутливими до зовнішніх полів та хімічного оточення. Більше того, в 2D матеріалах були виявлені нові властивості, такі як об'ємний фотогальванічний ефект. Таким чином, 2D матеріали відкривають великі можливості для нових фотогальванічних пристроїв.

1.2. Класифікація 2D фотогальванічних пристроїв

На рис. 1.3 наведено класифікацію 2D фотогальванічних пристроїв, включаючи шоттківські переходи, гомопереходи, 2D–2D гетеропереходи, 2D–3D гетеропереходи та пристрої з об'ємним фотогальванічним ефектом. Шоттківські переходи включають металеві контакти та 2D матеріали для створення внутрішнього електричного поля. Гомопереходи використовують два однакові 2D матеріали з різним легуванням для створення внутрішнього електричного поля. 2D–2D гетеропереходи складаються з двох різних 2D матеріалів, які інтегруються за допомогою ван-дер-ваальсових сил. 2D–3D гетеропереходи поєднують 2D матеріали з традиційними 3D напівпровідниками для досягнення унікальних властивостей. Пристрої з

об'ємним фотогальванічним ефектом (BPVE – bulk photovoltaic effect device) використовують нові властивості 2D матеріалів для покращення ефективності перетворення світла на електрику.

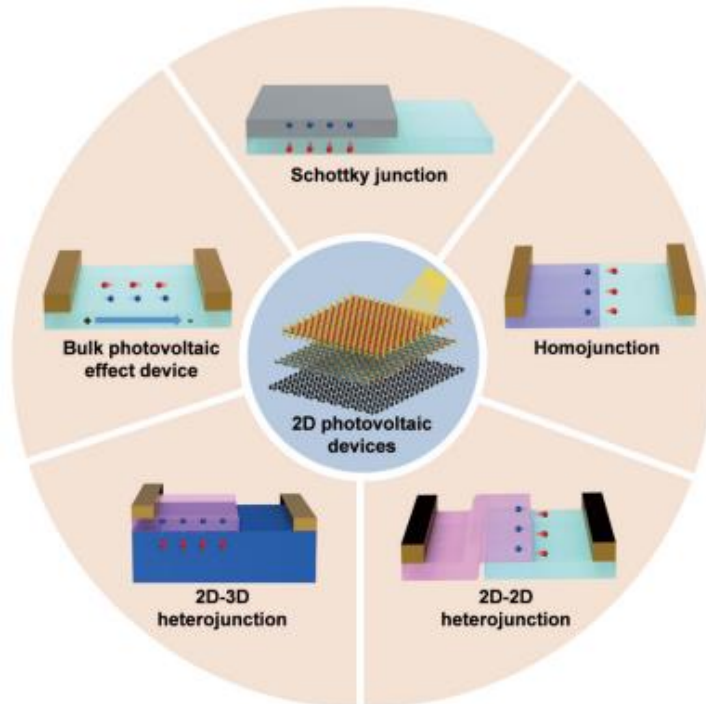


Рис. 1.3. Загальна класифікація 2D фотоелектричних пристроїв, включаючи переходи Шоттки, гомопереходи, 2D–2D гетеропереходи, 2D–3D гетеропереходи та пристрої з об'ємним фотогальванічним ефектом [4]. Сині кулі представляють дірки, а червоні кулі представляють електрони

2D матеріали показали великий потенціал у фотогальванічних пристроях завдяки унікальним оптоелектронним властивостям, включаючи широкосмугове поглинання світла, сильну взаємодію світло-матерія та гнучкість. Більше того, самопасивована поверхня дозволяє виготовляти пристрої через ван-дер-ваальсову взаємодію (vdW) без невідповідності кристалічних ґраток, наприклад, ван-дер-ваальсові металеві контакти та ван-дер-ваальсові p-n гетеропереходи. На цій основі можна реалізувати інженерію зон і значно покращити фотогальванічні характеристики, такі як EQE (зовнішня квантова ефективність), PCE (ефективність перетворення

потужності) і V_{oc} (напруга неробочого ходу). У цьому огляді ми представили останні досягнення у фотогальванічних пристроях на основі 2D матеріалів, включаючи шоттківські переходи, гомопереходи, 2D-2D гетеропереходи, 2D-3D гетеропереходи та пристрої з об'ємним фотогальванічним ефектом (BPVE).

Шоттківські переходи на основі ван-дер-ваальсових металевих контактів мають великі переваги у фотогальванічних пристроях. Ван-дер-ваальсовий металевий контакт забезпечує інтерфейс без дефектів, без пінінгу рівня Фермі, що дозволяє отримати велике вбудоване поле та широку зону виснаження, а також зменшує втрати через рекомбінацію, викликану дефектами. Таким чином, фотогальванічна продуктивність може бути значно покращена. Крім того, вертикальний контактний пристрій зменшує втрати через рекомбінацію носіїв під час транспортування, що додатково покращує фотогальванічну продуктивність.

Гомопереходи на основі 2D матеріалів можна реалізувати шляхом легування та модулювання зовнішнім полем. Легування забезпечує зручний спосіб створення р-n гомопереходів, і різні стратегії, такі як плазмове легування, іонообмінне легування та твердотільне легування, успішно застосовуються у фотогальванічних пристроях. Зовнішнє поле дозволяє ефективно і переналаштовуване модулювання переносу носіїв у 2D матеріалах для створення р-n гомопереходів, а фотогальванічні характеристики р-n гомопереходів можуть бути покращені за допомогою модулювання. Останніми роками також розроблено нові стратегії, такі як зворотнє твердотільне легування.

р-n гетеропереходи з різними 2D матеріалами можна легко виготовити через ван-дер-ваальсову взаємодію, що забезпечує новий шлях для інженерії зон для високоефективних фотогальванічних пристроїв. Для реалізації високопродуктивних фотогальванічних пристроїв продемонстровано кілька стратегій виготовлення гетеропереходів, таких як одностороннє виснаження,

екситонний фотогальванічний ефект, комбінація з високопоглинаючими матеріалами, інженерія контактів та вертикальне транспортування носіїв.

2D–3D p–n гетеропереходи використовують переваги традиційних об'ємних напівпровідників, таких як велике оптичне поглинання і широкосмугове поглинання, що ефективно долає обмежене поглинання в 2D матеріалах. Наприклад: Кремній (Si) і германій (Ge): Використання цих матеріалів у p–n гетеропереходах забезпечує велике поглинання світла. Ртутно-кадмієвий телурид (HgCdTe): Використання вузькозонних матеріалів забезпечує широкосмугове поглинання.

Об'ємний фотогальванічний ефект був виявлений у 2D матеріалах і продемонстрований як перспективний для подолання межі Шоклі-Квейссера (S–Q limit). BPVE можна реалізувати в нецентросиметричних 2D матеріалах, а також за допомогою інженерії симетрії, такої як створення ван-дер-ваальсову інтерфейсу та виготовлення нанотрубок.

1.3. Електричні параметри фотоелектричних перетворювачів

Незважаючи на значний прогрес, фотогальванічні пристрої на основі 2D матеріалів все ще стикаються з деякими викликами. Більшість поточних PCE для 2D фотогальванічних пристроїв складають менше 5%, що значно відстає від теоретичної межі. Поточні значення V_{oc} для більшості 2D фотогальванічних пристроїв становлять менше 0.5 В, тоді як зонні заборони більшості 2D напівпровідників знаходяться в межах 1–2 еВ. Це вказує на значний потенціал для покращення V_{oc} . Ключ до вирішення низького V_{oc} полягає в модулюванні внутрішнього поля. Легування може ефективно модулювати вбудоване поле шляхом регулювання концентрації легуючих домішок. Модулювання транспортування носіїв на інтерфейсі може значно покращити продуктивність пристроїв. У таблиці 1.2 наведено електричні параметри різних композицій 2D структур. 2D матеріали, такі як MoS_2 , WSe_2 , та їх комбінації з іншими матеріалами, показують значно кращі

характеристики поглинання світла і взаємодії світло-матерія. Деякі пристрої, такі як CsPbBr₃/CdS, досягли високих значень ефективності перетворення потужності (PCE) до 17,5%. Слід відмітити, що MoO_x/Gr/WSe₂/Au досягли V_{oc} значення 0,476 В. Проте більшість пристроїв показують значення V_{oc} нижче 0,5 В, що вказує на можливості для подальшого покращення характеристик 2D гетеропереходів.

Таблиця 1.2

Електричні параметри фотоелектричних перетворювачів [4]

Пристрої	PCE (%)	EQE (%)	V _{oc} (V)	FF
Pt/MoS ₂ /Ag	0,2	1,74	1,02	0,26
1T'-MoTe ₂ /MoS ₂ /Cr	–	20	0,19	–
WS ₂ /Au	0,46	40	0,256	0,44
Gr/WS ₂ /Pt	5	92	0,4	0,39
Gr/WO _x /WSe ₂ /Pt	5,44	–	0,47	0,59
MoO _x /Gr/WSe ₂ /Au	5,1	–	0,476	0,617
MoTe ₂ homojunction	–	40	0,3	0,5
WSe ₂ homojunction	–	83.6	0,75	–
CsPbBr ₃ /CdS	17,5	–	0,76	0,5
Cs ₂ AgBiBr ₆ /WS ₂ /Gr	–	14.7	–	–
Gr/WSe ₂ /MoS ₂	3,4	50	0,38	–
PbS/MoS ₂ /WSe ₂	7,65	100	0,42	–
Perovskite/BP/MoS ₂	–	80	0,32	–
MoS ₂ /AsP	9	71	0,61	0,5
Gr/WO _x /WSe ₂ /MoS ₂	5	–	0,46	0,45
CNT/WSe ₂ /MoS ₂ /CNT	–	42,7	0,35	–
PtSe ₂ /Si	–	80	0,3	–

Фотогальванічні пристрої на основі 2D матеріалів мають великий потенціал для наступного покоління сонячних елементів, однак ще

залишаються деякі виклики, такі як підвищення PCE, EQE, та V_{OC} . Подальші дослідження мають зосередитися на розвитку нових методів легування, таких як: твердотільне легування та дистанційне модульоване легування; оптимізації інженерії контактів для покращення транспортування носіїв; вивченні нових 2D матеріалів і гетероструктур для підвищення продуктивності фотогальванічних пристроїв. Таким чином, 2D матеріали пропонують значні можливості для створення наступного покоління високоефективних фотогальванічних пристроїв з покращеними характеристиками та широким спектром застосувань.

Ось кілька ключових аспектів, на які варто звернути увагу при дослідженні та оптимізації фотогальванічних елементів на основі гетеропереходів двовимірних матеріалів. Двовимірні матеріали, такі як графен, MoS_2 , WS_2 та інші, мають унікальні електронні властивості, які роблять їх привабливими для використання у фотогальванічних елементах. Важливо вибрати матеріали з оптимальними електронними та оптичними властивостями для ефективного поглинання світла і перенесення зарядів. Конструювання гетеропереходу з правильним вирівнюванням енергетичних рівнів є критично важливим для ефективного розділення і переносу зарядів. Дослідження та моделювання енергетичних діаграм допоможуть зрозуміти, як найкраще поєднати різні двовимірні матеріали для досягнення оптимальної продуктивності. Якість інтерфейсу між двовимірними матеріалами та іншими компонентами сонячної комірки (такими як електроди) значно впливає на продуктивність пристрою. Необхідно досліджувати методи підвищення адгезії та зменшення рекомбінації зарядів на інтерфейсах.

Отже, двовимірні матеріали пропонують нові можливості для створення фотогальванічних пристроїв з високими показниками продуктивності завдяки своїм унікальним властивостям та можливостям для інженерії зон, що робить їх перспективними кандидатами для наступних поколінь сонячних елементів.

РОЗДІЛ 2

МЕТОДИКА І ТЕХНІКА ЕКСПЕРИМЕНТУ

2.1. Алгоритм чисельного моделювання та визначення параметрів

Експериментальні дослідження в галузі фотовольтаїки розвинулися в напрямку енергетичних замінників, енергетичної безпеки та зниження забруднення при створенні сонячних елементів практичного значення [10-16]. Використання комп'ютерних симуляцій у проектуванні та виробництві фотоперетворювачів може покращити експериментальні дослідження. Програмне забезпечення SCAPS є унікальним, зручним і інтелектуальним програмним забезпеченням, що використовується для моделювання та аналізу фотоелектричних елементів різних поколінь.

Товщина двовимірних матеріалів впливає на їх здатність поглинати світло і переносити заряди. Оптимізація товщини шарів може допомогти максимізувати ефективність поглинання світла та мінімізувати втрати на рекомбінацію [7,8].

Хімічна стабільність двовимірних матеріалів під впливом навколишнього середовища (таких як волога, кисень та ультрафіолетове випромінювання) є важливим аспектом для довготривалої стабільності фотогальванічних елементів. Дослідження захисних покриттів і методів інкапсуляції може допомогти підвищити стабільність пристроїв

Для практичного застосування необхідно розробити методи масштабованого виробництва високоякісних двовимірних матеріалів та інтеграції їх у фотогальванічні елементи. Важливо враховувати економічну ефективність та екологічну безпечність виробничих процесів.

Алгоритм процесу розрахунків дифузійно-дрейфових струмів у сонячному елементі за допомогою ітераційної процедури наведений на рис. 2.1. Дискретизована дифузійно-дрейфова модель добре описана в літературі

та є основним числовим методом розрахунку при моделюванні фізичних процесів у напівпровідникових сонячних елементах.

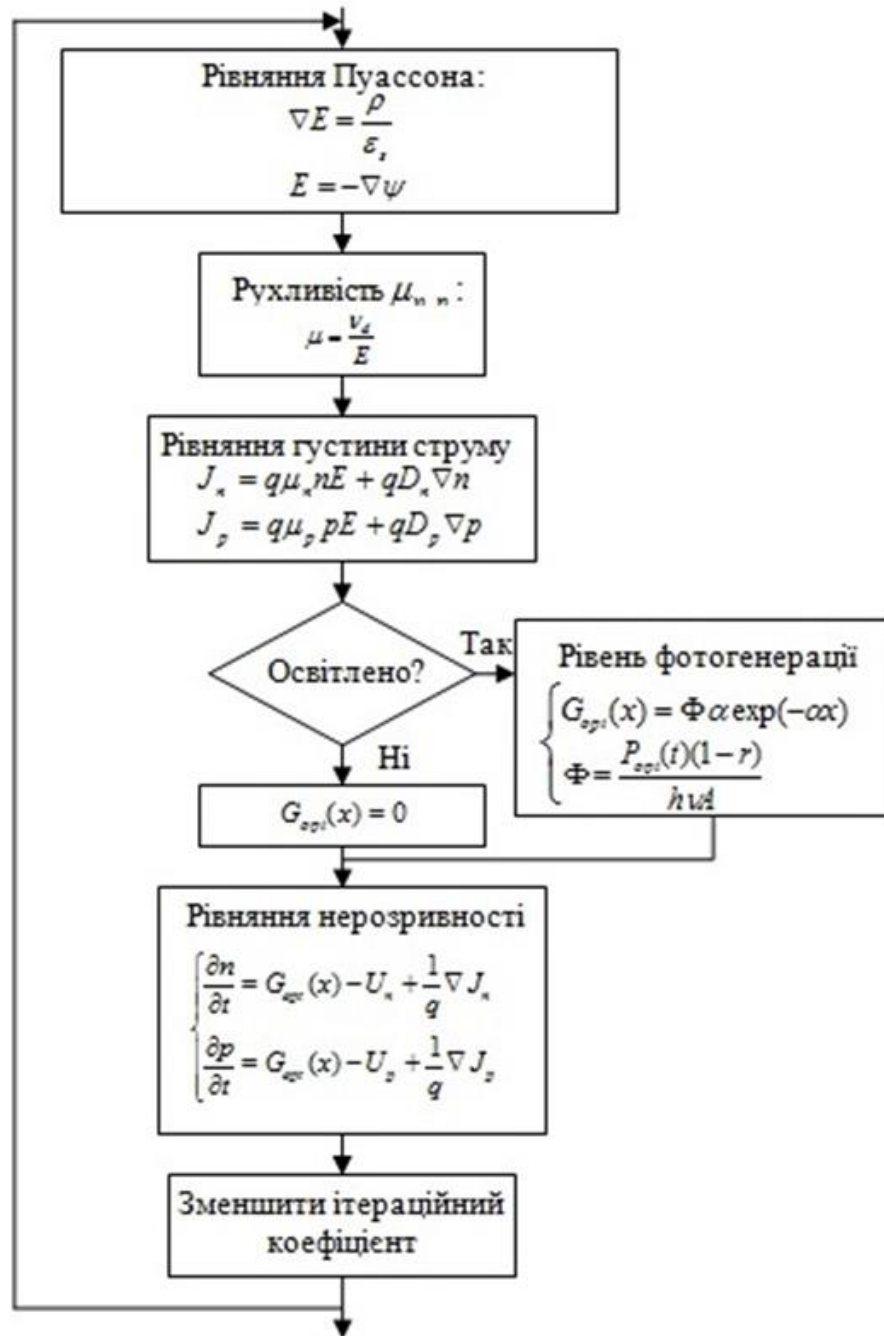


Рис. 2.1. Алгоритм числового розв'язання біполярної дрейф-дифузної системи рівнянь Пуассона [17]

При дослідженні вольт-амперних характеристик (ВАХ) фотоперетворювачів та розрахунку їх основних параметрів можна використовувати різні схеми заміщення. Як приклад на рис. 2.2 приведено

схемний еквівалент ідеального фотогальванічного перетворювача. Фотоперетворювач можна зобразити у вигляді діода та джерела струму. Джерело струму J моделює електричний струм, створений у фотогальванічному елементі під дією фотонів світла. При постійній температурі та потужності сонячного випромінювання цей струм залишається сталим і на еквівалентній схемі заміщення позначається як I_{sc} .

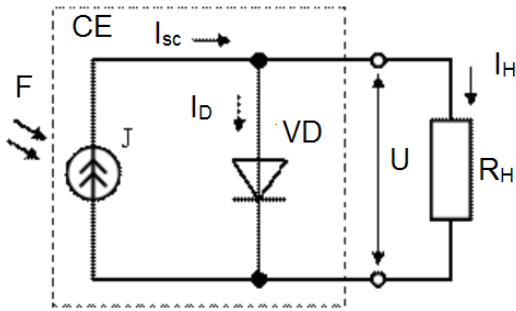


Рис. 2.2. Електрична схема заміщення ідеального фотогальванічного перетворювача

Відомо [17], що на основі світлових вольт-амперних характеристик фотоперетворювачів визначаються такі важливі параметри фотоелектричних приладів, як: напруга неробочого ходу (U_{oc}); густина сили струму короткого замикання (J_{sc}); фактор заповнення (FF); коефіцієнт корисної дії (η) або ефективність перетворення сонячної енергії в електричну.

Коефіцієнт корисної дії (ККД) розраховується за формулою (рис.2.3):

$$\eta = \frac{FF \cdot I_{sc} \cdot U_{oc}}{P}, \quad (2.1)$$

де P – потужність сонячного опромінювання;

FF – фактор заповнення ВАХ (рис.2.3), який визначається як

$$FF = \frac{I_m \cdot U_m}{I_{sc} \cdot U_{oc}}, \quad (2.2)$$

де I_m та U_m – відповідно максимальна сила струму та максимальна напруга (на кривій максимальної потужності на рис.2.3 наведена точка екстремуму), що відповідають найбільшій потужності приладу.

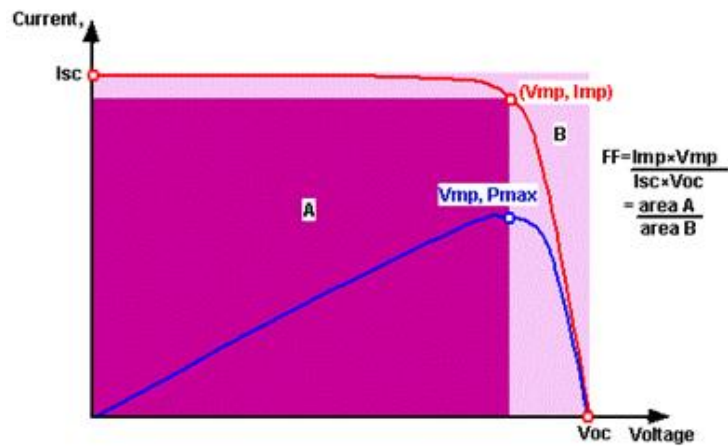


Рис.2.3. Визначення фактора заповнення FF світлової ВАХ ідеального ФЕП [17]

На ефективність фотогальванічного перетворювача впливає велика кількість параметрів як самого приладу, так і напівпровідникових матеріалів, на основі яких він створений. Основні втрати енергії пов'язані з відбиттям сонячного випромінювання від поверхні перетворювача, міжфазною та об'ємною рекомбінацією генерованих носіїв заряду, проходженням частини світла через фотоелемент без поглинання, поверхневим, внутрішнім та контактним опором приладу тощо. Такі фактори можуть бути враховані у відповідних математичних рівняннях та дозволяють найбільш повно змоделювати робочі характеристики досліджуваних ФЕП [18-26].

2.2. Вхідні дані моделювання гетеропереходу $n\text{-MoS}_2/p\text{-CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$

Перед початком процедури моделювання необхідно задати вхідні параметри матеріалів, що входять до складу фотоперетворювача. Це включає, наприклад, товщину віконного та поглинаючого шару (d), ширину забороненої зони матеріалів (E_g), їх електронну спорідненість (χ), діелектричні сталі напівпровідників (ϵ/ϵ_0), рухливості електронів та дірок (μ) тощо. Вхідні параметри гетеропереходу $n\text{-MoS}_2/p\text{-CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, які були використані у цій роботі, наведено в табл. 2.1. Як стандарт джерела світла

використовується AM1.5 з потужністю 1000 Вт/м^2 [27-36]. Для шару n-MoS₂ були використані вхідні дані із літературних джерел [5,37], а для шару перовскіту p-CH₃NH₃PbI₃ із бази даних програми SCAPS.

Таблиця 2.1

**Вхідні параметри моделювання процесів у гетеропереході
n-MoS₂/p-CH₃NH₃PbI₃**

Шар	n-MoS ₂	p-CH ₃ NH ₃ PbI ₃
Товщина l , мкм	0,001-0,015	2,0-4,5
Ширина зони E_g , eV	1,58	1,04
Спорідненість електронів χ , eV	4,2	4,3
Діелектрична стала ϵ/ϵ_0	13,6	12,0
Густина станів в зоні провідності N_C , см ⁻³	$2,2 \cdot 10^{18}$	$1,00 \cdot 10^{19}$
Густина станів в валентній зоні N_V , см ⁻³	$1,80 \cdot 10^{18}$	$1,00 \cdot 10^{19}$
Рухливість електронів μ_e , см ² /с	100	100
Рухливість дірок μ_h , см ² /с	25	25

Зовнішній вигляд моделі гетеропереходу n-MoS₂/p-CH₃NH₃PbI₃, яка відображається у діалоговому вікні програми SCAPS, приведено на рис.2.4.

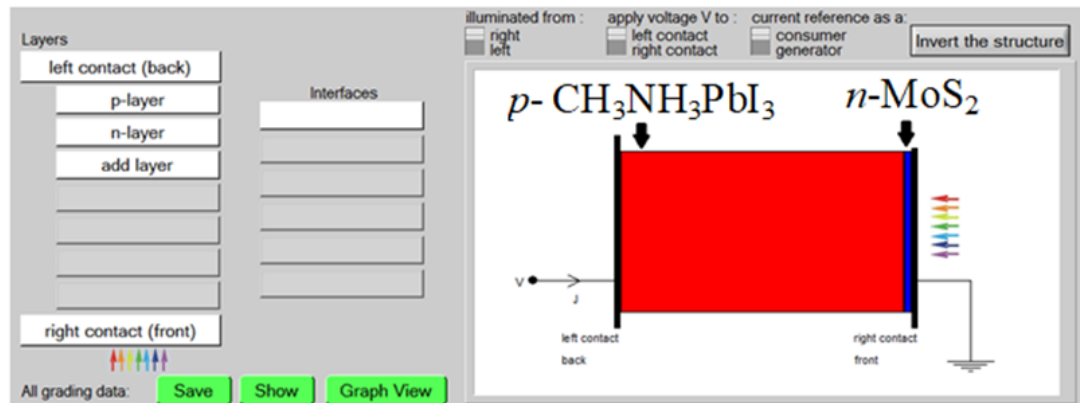


Рис. 2.4. Зовнішній вигляд SCAPS-моделі гетеропереходу n-MoS₂/p-CH₃NH₃PbI₃

У сонячних елементах концентрація легування р-n-переходу на рівні $1 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ є ключовим параметром, який відіграє важливу роль у загальній фотоелектричній ефективності. Для досягнення ефективної роботи сонячних елементів ми встановили концентрації легування відповідними домішками як

p-шарів, так і n-шарів на рівні $1 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$, враховуючи фотоелектричну ефективність та аспекти процесу.

Ефективність збору носіїв заряду також є ключовим фактором у фотогальванічних характеристиках. У p–n переході на межі гетеропереходу утворюється область виснаження. Фотоутворені носії можуть швидко розділятися і виводитися з області виснаження за допомогою внутрішнього поля без рекомбінації. Однак під час дифузійного процесу в невиснаженому каналі відбувається рекомбінація носіїв, що знижує ефективність збору носіїв заряду і обмежує зовнішню квантову ефективність (EQE)[44]. Тому слід мінімізувати транспортування носіїв у невиснаженому каналі. Виготовлення вертикальних p–n переходів з ультратонких 2D матеріалів може мінімізувати дифузію носіїв у невиснаженому каналі, забезпечуючи водночас велику фотоактивну площу. Схема p–n гетеропереходу $\text{WSe}_2/\text{MoS}_2$ з графеном і золотом у ролі верхніх і нижніх електродів приведена на рис. 2.5а.

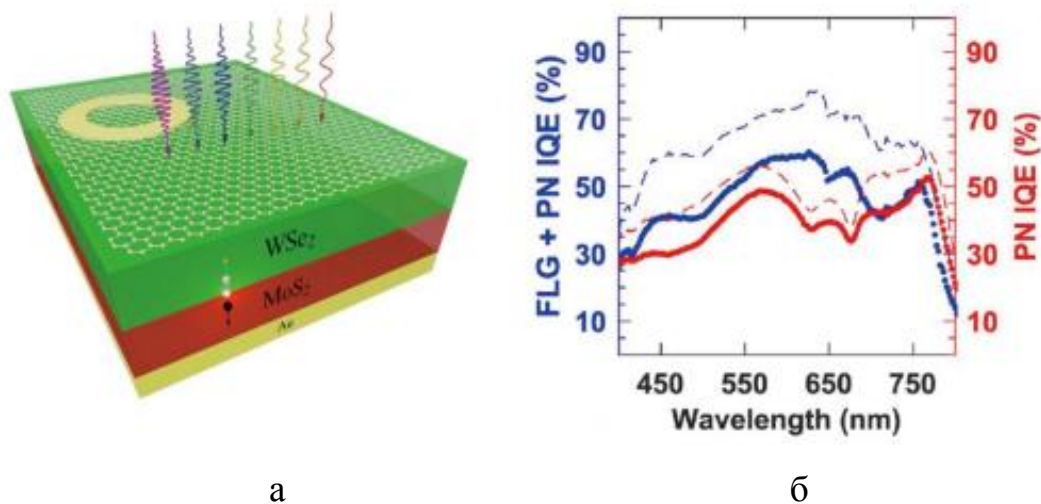


Рис.2.5. Схема вертикального $\text{WSe}_2/\text{MoS}_2$ p–n-гетеропереходу (а) та його квантова ефективність з і без графенового верхнього електрода (б) [4]

Квантова ефективність пристрою з верхнім графеновим електродом значно покращується порівняно з пристроєм без верхнього графенового електрода (рис. 2.5б), що підтверджує значне покращення ефективності збору носіїв заряду у вертикальноканалному пристрої. У результаті досягається висока EQE до 50%.

РОЗДІЛ 3

РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

3.1. Характеристики гетеропереходу n-MoS₂/p-CH₃NH₃PbI₃

Фотогальванічні елементи на основі гетеропереходів типу 2D/perovskite мають великий потенціал для підвищення ефективності перетворення сонячної енергії завдяки унікальним властивостям обох матеріалів. Зокрема, гетероперехід n-MoS₂/p-perovskite(CH₃NH₃PbI₃) поєднує в собі високу електронну рухливість молібдену дисульфиду (MoS₂) та чудові фотоелектричні властивості перовскітного матеріалу метил-амонію свинцю йодиду (CH₃NH₃PbI₃). У даній роботі розглянуто принцип роботи, властивості та можливості їх застосування.

Сонячні елементи з гетеропереходами складаються з двох шарів різнорідних матеріалів, що мають різні енергетичні рівні. У випадку гетеропереходу n-MoS₂/p-CH₃NH₃PbI₃, MoS₂ виступає в ролі n-типу напівпровідника – віконного шару, а CH₃NH₃PbI₃ — у ролі p-типу напівпровідника – поглинального шару. На межі розділу цих двох матеріалів формується гетероперехід, який забезпечує ефективне розділення та перенесення електронів і дірок, що генеруються під впливом сонячного світла.

MoS₂ є двовимірним матеріалом, що належить до класу дихалькогенідів перехідних металів (TMDs). Він має наступні важливі характеристики: висока рухливість електронів; стабільність у повітрі та під дією світла; можливість виготовлення ультратонких шарів товщиною в один атом.

CH₃NH₃PbI₃ — це органічно-неорганічний гібридний перовскіт, що володіє такими властивостями: високий коефіцієнт поглинання світла; широкий спектр поглинання (від ультрафіолету до ближнього інфрачервоного діапазону); висока ефективність перетворення сонячної енергії.

Світло поглинається шаром перовскіту $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, утворюючи електрон-діркові пари (екситони). Завдяки різниці енергетичних рівнів на межі гетеропереходу, екситони розділяються на вільні електрони і дірки. Електрони переходять до шару MoS_2 , а дірки залишаються в шарі перовскіту, що забезпечує розділення зарядів і зменшує рекомбінацію. Вільні електрони і дірки транспортуються до відповідних електродів, створюючи електричний струм.

Використання комбінації 2D-матеріалів та перовскітів дозволяє значно підвищити ефективність сонячних елементів. Тонкі шари 2D-матеріалів сприяють зменшенню ваги та об'єму сонячних панелей. Використання безсвинцевих перовскітів може зменшити екологічне навантаження.

Необхідно покращувати стабільність перовскітних матеріалів під впливом вологи та високих температур. Забезпечення хорошого зчеплення між 2D-матеріалом та перовскітом для мінімізації втрат на межі розділу. Оптимізація процесів виробництва для зниження вартості та збільшення обсягів виготовлення залишаються актуальними питаннями.

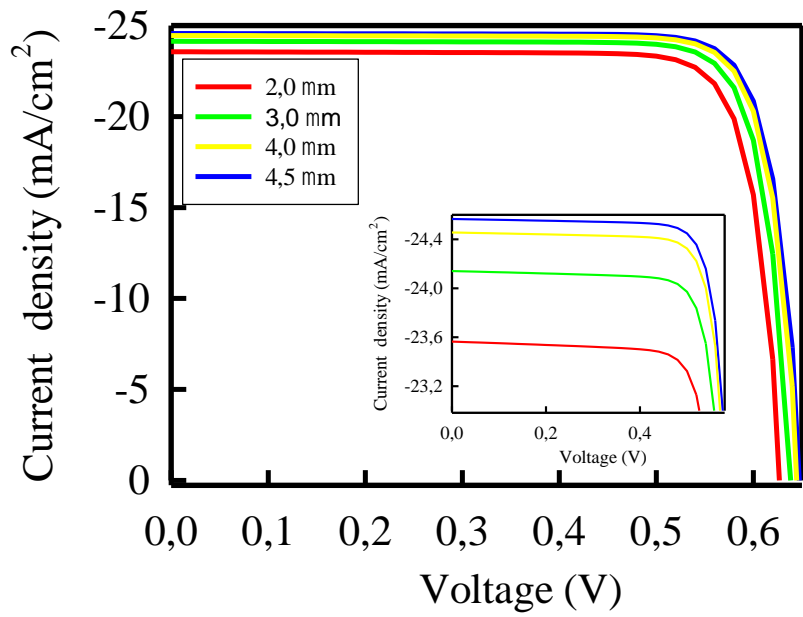
3.2. Розмірні залежності параметрів поглинального шару

Товщина поглинаючого шару є ключовою характеристикою фотоперетворювачів, оскільки вона визначає кількість поглинутого приладом випромінювання. Тому дослідження її впливу на основні електрофізичні характеристики фотоперетворювача є необхідним.

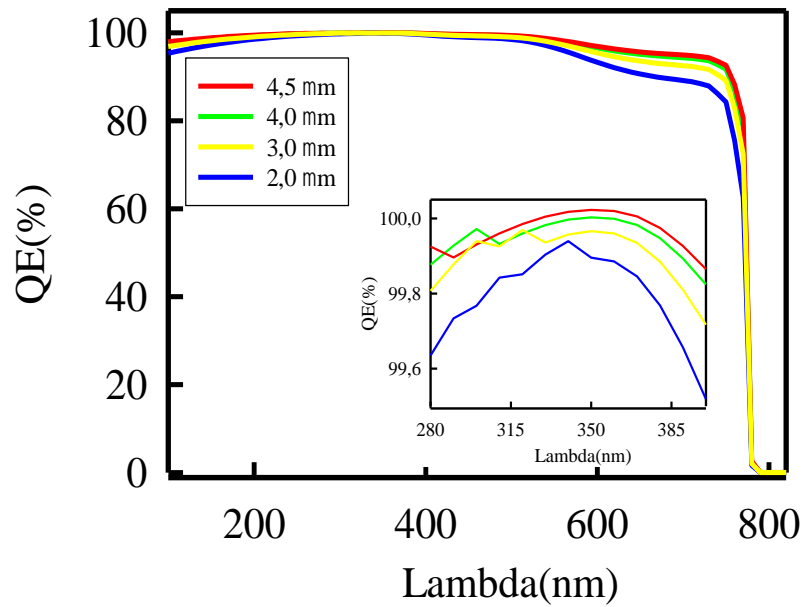
При моделюванні були взяті наступні вхідні параметри: температура навколишнього середовища становила 300 К, товщина віконного шару перовскіту залишалася сталою і становила 10 нм. Товщина поглинаючого шару змінювалася в межах від 2,0 до 4,5 мкм.

На рис. 3.1а наведені результати числового моделювання вольт-амперних характеристик (ВАХ) гетеропереходу $n\text{-MoS}_2/p\text{-CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ залежно від товщини поглинаючого шару. Результати моделювання основних

характеристик СЕ на основі гетеропереходу $n\text{-MoS}_2/p\text{-CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ при освітленні в умовах АМ-1,5 наведені в таблиці 3.1.



a



б

Рис. 3.1. ВАХ (а) та залежність квантового виходу (б) гетеропереходу $n\text{-MoS}_2/p\text{-CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ при різній товщині поглинального шару

**Вплив товщини поглинального шару на електричні параметри
гетеропереходу n-MoS₂/p-CH₃NH₃PbI₃**

Товщина поглинального шару d , мкм	U_{OC} , В	J_{SC} , мА/см ²	FF , %	η , %
2,0	0,6281	23,5642	83,06	12,29
2,5	0,6338	23,9007	83,21	12,60
3,0	0,6387	24,1409	83,29	12,84
3,5	0,6425	24,3184	83,40	13,03
4,0	0,6457	24,4561	83,51	13,19
4,5	0,6486	24,5662	83,60	13,32

З аналізу результатів моделювання видно, що зі збільшенням товщини поглинаючого шару спостерігається монотонне підвищення ККД СЕ до рівня 13,32%. При цьому спостерігається відповідне збільшення значень U_{OC} від 0,62 В до 0,65 В, та J_{SC} від 23,56 до 24,57 мА/см². Цей ефект можна пояснити тим, що при товщині абсорбуючого шару 4,0 мкм відбувається насичення поглинальної здатності i , відповідно, кількості генерованих електронно-діркових пар. Подальше збільшення товщини веде до збільшення послідовного опору приладу та віддалення області генерації носіїв від гетеропереходу.

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

Як видно з рис. 3.1 б, досліджувані сонячні елементи (СЕ) проявляють високу фотоактивність в області довжин хвиль $\lambda = 100 - 780$ нм. Верхня межа fotocутливості відповідає поглинанню в шарі перовскіту, тоді як квантовий вихід при довжині хвилі меншій за 800 нм зумовлений поглинанням випромінювання в віконному шарі. Розрахунки показують, що фотоактивність у цій області збільшується зі збільшенням товщини шару перовскіту. В

результаті проведених розрахунків встановлено, що оптимальна товщина поглинального шару для гетеропереходу становить 4,0 мкм.

3.3. Розмірні залежності параметрів віконного шару

Товщина віконного шару в гетеропереході є ключовим параметром, оскільки визначає кількість випромінювання, що потрапляє в абсорбуючий шар фотоперетворювача. Тому дослідження її впливу на електричні властивості сонячної елементи є дуже актуальним. На основі попередніх розрахунків були визначені оптимальні початкові умови для моделювання основних характеристик СЕ. Товщина поглинального шару у цих умовах залишалась сталою і становила $d = 2,0$ мкм. Товщина віконних шарів варіювалась в діапазоні від 1,0 нм до 15 нм. Моделювання проводилося при температурі $T = 300$ К. Результати моделювання представлені в таблиці 3.2.

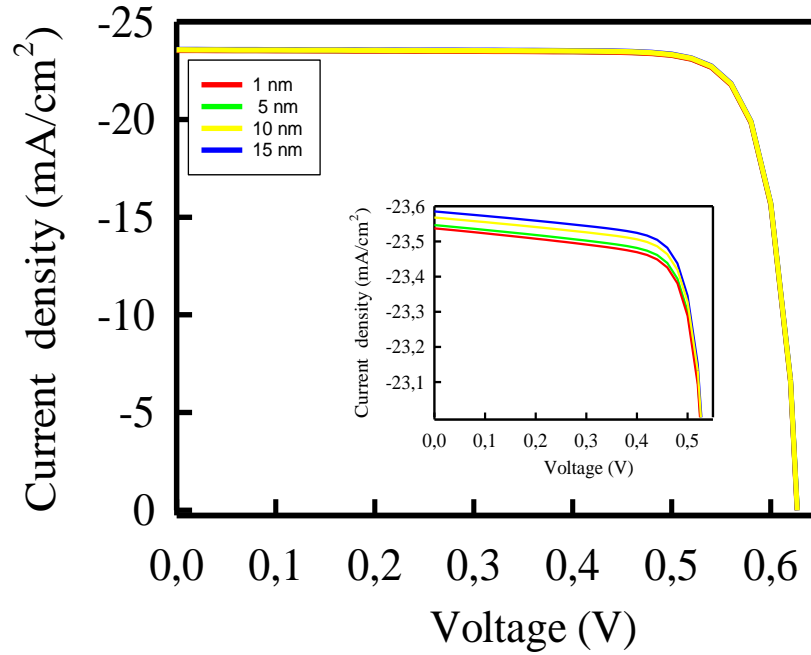
Таблиця 3.2

Вплив товщини віконного шару на електричні параметри гетеропереходу n-MoS₂/p-CH₃NH₃PbI₃

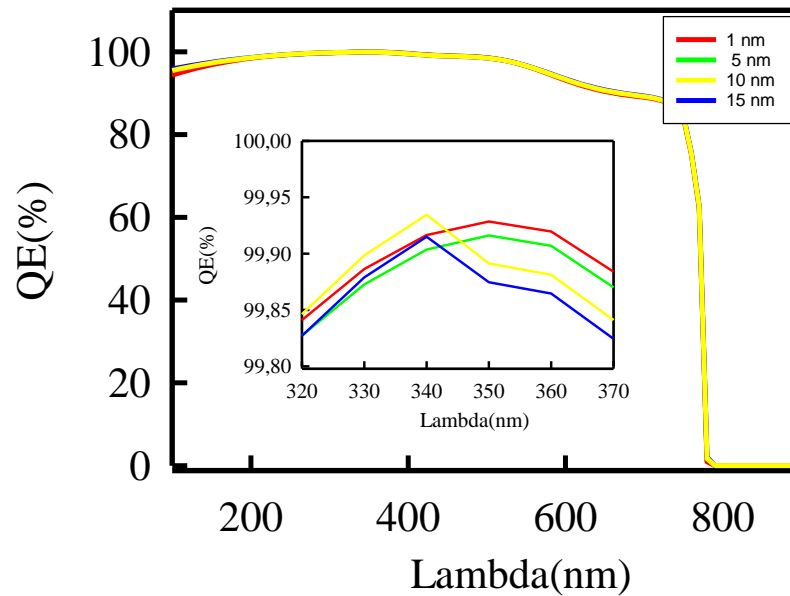
Товщина віконного шару d , нм	U_{oc} , В	J_{sc} , мА/см ²	FF , %	η , %
1,0	0,6280	23,5373	83,03	12,27
3,0	0,6280	23,5410	83,03	12,28
5,0	0,6281	23,5466	83,04	12,28
7,0	0,6281	23,5521	83,05	12,29
9,0	0,6281	23,5605	83,06	12,29
11,0	0,6281	23,5680	83,06	12,30
13,0	0,6281	23,5762	83,07	12,30
15,0	0,6281	23,5853	83,07	12,31

В результаті проведених розрахунків було встановлено, що при підвищенні товщини віконного шару від 1,0 до 15 нм спостерігається незначне збільшення ККД СЕ майже на 0,33 %.

Відповідні світлові ВАХ та спектральні залежності квантового виходу гетеропереходу $n\text{-MoS}_2/p\text{-CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, наведені на рис. 3.2.



a



б

Рис. 3.2. ВАХ (а) та залежність квантового виходу (б) гетеропереходу $n\text{-MoS}_2/p\text{-CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ при різній товщині віконного шару

При збільшенні товщини віконного шару MoS_2 у ньому починає поглинатися більша кількість фотонів з енергією $h\nu > E_g$ матеріалу. Це призводить до зменшення квантового виходу сонячного елемента в області довжин хвиль випромінювання $\lambda < 786$ нм. На рис. 3.2 б показані спектральні залежності квантового виходу СЕ в залежності від товщини плівки MoS_2 . Як видно з рисунку, завдяки більшій ширині забороненої зони матеріалу віконного шару, розширюється область фоточутливості СЕ в ультрафіолетовій частині спектра. Зміна товщини MoS_2 призводить до незначної зміни квантового виходу фотоперетворювачів при енергіях, більших за E_g молібден сульфїду.

3.4. Оптимізація властивостей 2D p–n гетеропереходів

Низька ефективність поглинання світла є ще однією проблемою для фотогальванічних пристроїв на основі 2D p–n гетеропереходів. Впровадження в 2D p–n гетеропереходи матеріалів з високою здатністю до поглинання світла є ефективною стратегією для покращення поглинання світла. У роботі [37] відмічено, що в p–n перехід $\text{WSe}_2/\text{MoS}_2$ було впроваджено квантові точки (КТ) PbS (рис. 3.3а). КТ PbS діють як світлочутливий шар, а електрони, що утворюються у шарі КТ, можуть ефективно збиратися MoS_2 під дією внутрішнього поля. Це значно покращує поглинання світла. Як показано на рис. 3.3б, пристрій з шаром квантових точок PbS демонструє значно покращену фоточутливість та досягає максимальної зовнішньої квантової ефективності (EQE) у 100% (рис. 3.3в). 2D перовськіти з високою здатністю до поглинання світла також мають великий потенціал для подолання проблеми низької ефективності поглинання [38-40]. Автори [41] повідомили про p–n гетероперехід $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6/\text{WS}_2$, де 2D перовскіт $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ виступає як світлочутливий шар, який підвищує чутливість WS_2 , а на межі переходу спостерігається помітний перенос заряду. Крім того, вертикально укладений шар графену

використовується для додаткового покращення ефективності збору носіїв заряду. У результаті досягається виражений фотогальванічний ефект з великим напругою неробочого ходу близько 0,75 В. В роботі [42] дослідили гетероперехід перовскіт/ВР/МоS₂, де MAPbI₃ використовується як світлочутливий шар для покращення роботи р-n переходу ВР/МоS₂, і фотогенеровані носії у MAPbI₃ можуть ефективно передаватися у шар ВР. У результаті досягається висока EQE близько 80%.

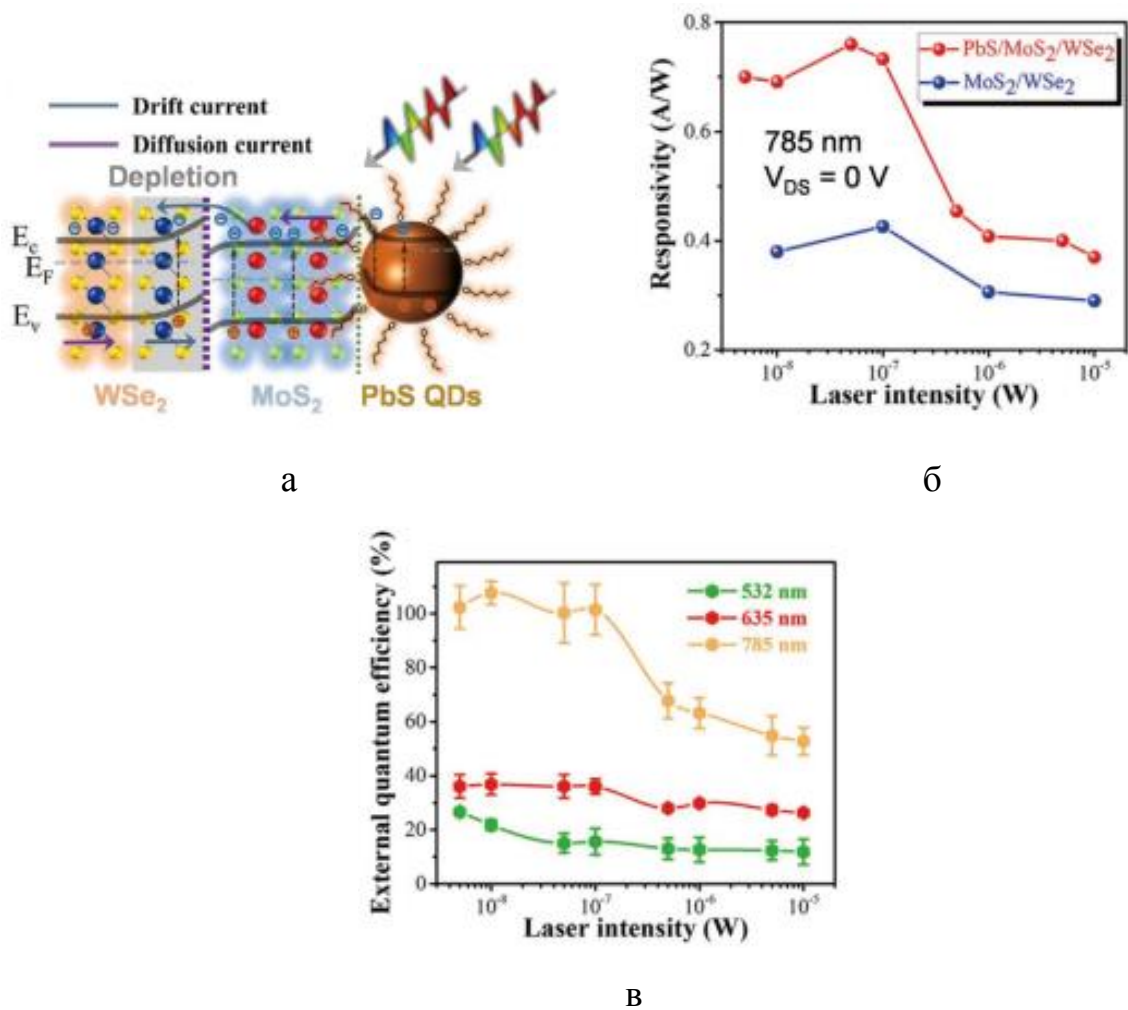


Рис.3.3. Енергетична діаграма р-n гетеропереходу WSe₂/MoS₂ із квантовими точками галеніту PbS (а), фотовідгук з квантовими точками і без них (б), квантова ефективність EQE із квантовими точками під впливом світла з різною довжиною хвилі (в). Рисунок адаптовано із роботи [37]

Інженерія контактів також була визнана ефективним методом підвищення характеристик 2D p–n гетеропереходів. В роботі [43] наведено робочі характеристики p–n гетеропереходу $\text{WSe}_2/\text{MoS}_2$ з атомарно тонким шаром WO_x на поверхні WSe_2 , який слугує транспортним шаром для носіїв. На межі WSe_2/WO_x формується сильне внутрішнє електричне поле, яке сприяє вилученню дірок до графену, блокуючи перенос дисоційованих електронів. Таким чином, швидка рекомбінація розділених зарядів на гетеропереході пригнічується, що значно підвищує фотогальванічні характеристики. ККД зростає з 0,7% до 5,0% після додавання шару WO_x .

В роботі [45] про вертикальні точкові p–n гетеропереходи на основі вуглецевих нанотрубок (CNT)/ $\text{WSe}_2/\text{MoS}_2/\text{CNT}$. Вертикальний канал формується завдяки вертикально перехресно укладеним CNT. Картографування фотоструму показує, що фотострум здебільшого генерується в точках перетину CNT. Це підтверджує, що вертикальний канал забезпечує вищу ефективність збору носіїв заряду. У результаті досягається висока для 2D гетеропереходів EQE близько 30%.

ВИСНОВКИ

Дослідження фотоелектричних параметрів гетеропереходів на основі двовимірних матеріалів та перовскіту є актуальним напрямком для подальшого розвитку технологій виготовлення фотогальванічних пристроїв. Поєднання високих електронних характеристик двовимірних матеріалів з відмінними фотоелектричними властивостями перовскітів дозволяє створювати ефективні та потенційно дешеві сонячні елементи. Подальші дослідження спрямовані на покращення стабільності, сумісності матеріалів та масштабування виробничих процесів.

В результаті комп'ютерних симуляцій вдалось отримати максимальну ефективність фотоперетворювачів на основі гетеропереходу $n\text{-MoS}_2/p\text{-CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ на рівні 13,2 %, напругу неробочого ходу $U_{oc}=0,65$ В, густину сили струму $J_{sc}=24,5$ mA/cm^2 , фактор заповнення ВАХ $FF=83,5$ %. Товщина поглинаючого шару перовскіту $p\text{-CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ становила від 3,5 до 4,0 мкм, а товщина віконного шару двовимірного матеріалу $n\text{-MoS}_2$ відповідно - від 5 нм до 10 нм.

Розглянуті гетеропереходи $n\text{-MoS}_2/p\text{-CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ мають широку область fotocутливості в діапазоні довжин хвиль від 100 нм до 785 нм. Це свідчить про те, що гетеросистеми такої конструкції забезпечують великий вибір параметрів для експлуатації. Збільшення товщини поглинаючого шару $p\text{-CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ понад 4,0 мкм є недоцільним, оскільки саме при цій товщині досягається насичення здатності до поглинання світла та генерації електронно-діркових пар. Подальше збільшення товщини шару призводить до зростання послідовного опору приладу та віддалення області генерації носіїв заряду від гетеропереходу.

література :

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Ivashchenko M.M. A numerical simulation of solar cells based on the CuO and Cu₂O absorber layers with ZnMgO window layer / [M.M. Ivashchenko O.V. Diachenko, A.S. Opanasyuk, I.P. Buryk, D.V. Kuzmin, A. Cerskus, O. Shapovalov, S.V. Plotnikov, I.A. Gryshko] // Materials Science and Engineering B. – 2024. – V. 300. – P. 117133.
2. Nowsherwan G.A. Numerical optimization and performance evaluation of ZnPC:PC70BM based dye-sensitized solar cell / G.A.Nowsherwan, M.A. Iqbal, S.U. Rehman et al. // Sci Rep . – 2023. – V. 13. – P. 10431.
3. Roshi, Modelling and simulation of silicon solar cells using PC1D / Roshi, Bhim Singh, Vivek Gupta // Materials Today: Proceedings. – 2022. – V.54, P. 3. – Pages 810-813,
4. Wang H. Y. Recent advances in two-dimensional photovoltaic devices / [H. Y. Wang, X. Y. Song, Z. X. Li, D. Y. Li, X. Xu, Y. X. Chen, P. B. Liu, X. Zhou, T. Y. Zhai] // J. Semicond. – 2024. – 45(5) . – P. 051701.
5. Aouragh A. Assessing the Performance of Solar Cells Based on MoS₂: WS₂ and WSe₂ Buffer Layers Effects / A. Aouragh, F. Selloum, S. Djeflal et al. // Acta Physica Polonica Series A. – 2024. – V. 145(5) . – P. 242-246.
6. Devendra K.C. Modelling and simulation of AlGaAs/GaAs solar cell / K.C. Devendra, Wagle Raju, Gaib Raid et al. // American Journal of Engineering Research (AJER). – 2020. – V.9, 4. – P. 218-223.
7. Ivashchenko M.M. Numerical simulation of SnS-based solar cells / [M.M.Ivashchenko, A.S.Opanasyuk, I.P.Buryk, D.V.Kuzmin] // Journal of Nano- and electronic Physics. 2018. – V.10(3) . – P. 03004-1–03004-6.
8. Ivashchenko M.M. Optical properties of pure and Eu doped ZnSe films deposited by CSVS technique / [M.M. Ivashchenko, A.S. Opanasyuk, I.P. Buryk, V.A.Lutsenko, A.V. Shevchenko] //Journal of Nano- and electronic Physics. – 2017. – V.9(1) . – P.01011-1 – 01011-5.

9. Zavorotnyi V.F. The laboratory tester of solar cells with dynamic reconfiguration of measuring system / [V. F. Zavorotnyi, O.V. Borisov] // *Microsyst Electron Acoust.* – 2018. – vol. 23, №. 1. – P. 23-29.

10. Рябко А. Використання сонячних модулів у лабораторному практикумі з фізики /А. Рябко, Р. Кухарчук // *Педагогічні науки: теорія, історія, інноваційні технології.* – 2018, № 1 (75) . – С. 65-75.

11. Василюха Х. В. Вдосконалення нормативно-технічної бази випробувань сонячних перетворювачів: автореф. дис. на здобуття наук. ступеня канд. техн. наук: спец. 05.01.02 / Національний університет «Львівська політехніка». – Львів, 2017. – 20 с.

12. Божко К.М. Вдосконалення методів та засобів контролю дефектів фотоелектричних сонячних батарей: автореф. дис. на здобуття наук. ступеня канд. техн. наук: спец. 05.11.13 / Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут». – Київ, 2016. – 24 с.

13. Курс лекцій з дисципліни «Твердотільна електроніка» / А.І. Новгородцев, О.А. Борисенко, О.М. Кобяков та ін. - Суми: Вид-во СумДУ, 2008. – 205 с.

14. Борисов О.В. Твердотільна електроніка : підручник / О.В. Борисов, Ю.І. Якименко; за заг. ред. Ю.І. Якименка – К.: НТУУ “КПІ”, 2015. – 484 с.

15. Матвієнко М.П. Основи електроніки: підручник. / М.П. Матвієнко – К. Ліра-К, 2016. – 364 с.

16. Колонтаєвський Ю.П. Промислова електроніка та мікросхемна техніка: теорія і практикум: навч. посібн. / Ю.П. Колонтаєвський, А.Г. Сосков; за ред. А.Г. Соскова 2-е вид. – К.: Каравела, 2004. – 432 с.

17. Методичні вказівки до виконання лабораторної роботи «Числове моделювання робочих характеристик сонячних елементів з використанням програмного пакету SCAPS-3302» з дисципліни "Фізико-технологічні основи перетворення сонячної енергії" / укладачі Кобяков О.М., Єрмоменко Ю.С., Іващенко М.М., Опанасюк А.С. - Суми: СумДУ, 2015. - 28 с.

18. Ivashchenko M.M. Influence of substrate temperature on physical properties of SnS films deposited by close-spaced vacuum sublimation / [M.M. Ivashchenko, I.P. Buryk, A.S. Opanasyuk, O.O. Podoprygora] // Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників "Лашкарьовські читання 2018", м. Київ, 4-6 квітня 2018 р.

19. Ivashchenko M.M. Numerical simulation of SnS/CdS(ZnO)/ITO solar cells / [M.M. Ivashchenko, I.P. Buryk, A.S. Opanasyuk, D.V. Kuzmin, O.O. Podoprygora] // Конференція молодих вчених з фізики напівпровідників "Лашкарьовські читання 2018", м. Київ, 4-6 квітня 2018 р.

20. Іващенко М.М. Моделювання робочих характеристик фотоперетворювачів, виконаних на базі структури SnS/ZnS/FTO / [М.М. Іващенко, І.П. Бурик, Д.В. Кузьмін, І.А. Гришко, А.С. Опанасюк] // I Міжнародна науково-практична конференція «Елементи, прилади та системи електронної техніки», м. Запоріжжя, 14 – 16 листопада 2018 р.

21. Ivashchenko M. Current-voltage curves numerical simulation of photoconverters based on SnS/SnS₂/FTO structure / [M. Ivashchenko, A. Opanasyuk, I. Buryk, D. Kuzmin, Yu. Stoliarchuk] // III Всеукраїнська науково-практична конференція «Перспективні напрямки сучасної електроніки, інформаційних та комп'ютерних систем» MEICS-2018, м. Дніпро, 21 – 23 листопада 2018 р.

22. Борисов О.В. Твердотільна електроніка : підручник / О.В. Борисов, Ю.І. Якименко; за заг. ред. Ю.І. Якименка – К.: НТУУ “КПІ”, 2015. – 484 с.

23. Md. Noumil Tousif, Sakib Mohammad, A. A. Ferdous, Md. Ashraful Hoque «Investigation of Different Materials as Buffer Layer in CZTS Solar Cells Using SCAPS». Journal of Clean Energy Technologies. 2018. – V. 6, 4.


24. Topical review: pathways toward cost-effective single-junction III–V solar cells / Vidur Raj et al // J. Phys. D: Appl. Phys. – V. 55. – 2022. –P. 143002.

25. Operating temperature effect on the thin film solar cell efficiency/ R.V. Zaitsev, M.V. Kirichenko, G.S. Khrypunov et al.// J. Nano- Electron. Phys. – 2019. – V. 11, No 4. – P. 04029-6.

26. Physics of the temperature coefficients of solar cells / O. Dupré, R. Vaillonet, M.A. Green // Sol. Energy Mater. Sol. Cells. – 2015. – V. 140.– P. 92.
27. <https://ela.kpi.ua/bitstream/123456789/28287/1/FEP.pdf> - Дослідження роботи фотоелектричного модуля дата доступу: 22.05.2024 р.
28. <http://page.if.ua/uploads/pcss/vol2/number2/0203-13.pdf> - Дослідження вихідних та діодних параметрів, дата доступу: 24.05.2024 р.
29. <https://core.ac.uk/download/pdf/52159454.pdf> - Застосування фотоелектричних технологій, дата доступу: 24.05.2024 р.
30. https://seltokphotonics.com/info/articles/sipm_revolyutsiyni_tekhnologiyi_d_etektuvannya/ - Кремнієві ФСЕ: революційні технології детектування, дата доступу: 29.05.2024 р.
31. <https://oeipt.vntu.edu.ua/index.php/oeipt/article/download/239/238> - Аналітичний огляд сучасних фотоелектричних технологій, дата доступу: 25.05.2024 р.
32. <https://events.pstu.edu/konkurs-energy/wp-content/uploads/sites/> - Кут нахилу сонячних батарей, дата доступу: 24.05.2022 р.
33. <https://oeipt.vntu.edu.ua/index.php/oeipt/article/download/239/238> - Аналітичний огляд сучасних технологій фотоелектричних перетворювачів, дата доступу: 24.05.2024 р.
34. http://kntu.net.ua/ukr/content/download/75589/438715/file/2020_3.06.pdf. Дослідження залежності параметрів сонячних батарей, дата доступу: 28.05.2024 р.
35. https://en.wikipedia.org/wiki/Perovskite_solar_cell – Perovskite solar cell, дата доступу: 24.05.2024 р.
36. <https://www.energy.gov/eere/solar/perovskite-solar-cells> – Perovskite Solar Cells, дата доступу: 25.05.2024р.
37. Zeng P.Y. MoS₂/WSe₂ vdW heterostructures decorated with PbS quantum dots for the development of high-performance photovoltaic and broadband photodiodes / P.Y. Zeng, W.H. Wang, D.S.Han et al. // ACS Nano. – 2022. – V.16. – P. 9329

38. Ma C. Heterostructured $\text{WS}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ photoconductors with suppressed dark current and enhanced photodetectivity / C. Ma, Y. M. Shi, W. Hu J, et al. // *Adv Mater.* – 2016. – V.28. – P. 3683
39. Ning W. H. Long electron-hole diffusion length in high-quality lead-free double perovskite films / W. H. Ning, F. Wang, B. Wu et al. // *Adv Mater.* – 2018. – V.30. – P. 1706246
40. Chen S. Two-dimensional materials for halide perovskite-based optoelectronic devices / S. Chen, G. Q. Shi // *Adv Mater.* – 2017. – V.29. – P. 1605448
41. Fang F.E. Two-dimensional $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6/\text{WS}_2$ heterostructure-based photodetector with boosted detectivity via interfacial engineering/ F.E. Fang, Y. Wan, H. N. Li et al. // *ACS Nano.* – 2022. – V.16. – P. 3985
42. Wang L. M. Perovskite/black phosphorus/ MoS_2 photogate reversed photodiodes with ultrahigh light on/off ratio and fast response/ L. M. Wang, X. Zou, J. Lin et al. // *ACS Nano.* – 2019. – V.13. – P. 4804
43. Yang S. Monolithic interface contact engineering to boost optoelectronic performances of 2D semiconductor photovoltaic heterojunctions/ Yang S, Cha J, Kim J C, et al. // *Nano Lett.* – 2020. – V. 20. – P. 2443
44. Lee I. Photoinduced tuning of Schottky barrier height in graphene/ MoS_2 heterojunction for ultrahigh performance short channel phototransistor/ I. Lee, W. T. Kang, J. E. Kim et al. // *ACS Nano.* – 2020. – V. 14. – P. 7574.
45. Zhang J. Mixed-dimensional vertical point p–n junctions / J. Zhang, L. Cong, K. Zhang et al. // *ACS Nano.* – 2020. – V.14. – P. 3181

СЛАЙДИ ПРЕЗЕНТАЦІЇ ДО РОБОТИ



МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ КРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
КЛАСИЧНИЙ ФАХОВИЙ КОЛЕДЖ
Центр заочної, дистанційної та вечірньої форм навчання

Кваліфікаційна робота бакалавра
**ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ОПТИМІЗАЦІЯ
ДВОВИМІРНИХ ФОТОЕЛЕКТРИЧНИХ
ПЕРЕТВОРЮВАЧІВ**

Студента гр. ЕІ.-01.

О.А. Приймака

Науковий керівник,
Викладач, к.ф.-м.н, доцент

І.П. Бурик

Колотоп 2024

ВСТУП

Об'єктом дослідження кваліфікаційної роботи є фізичні основи принципу дії, структурні та робочі характеристики плівкових фотоелектричних перетворювачів сонячної енергії на основі гетеропереходу $n\text{-MoS}_2/p\text{-CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$.

Мета роботи полягає у чисельному моделюванні гетеропереходу $n\text{-MoS}_2/p\text{-CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ та визначенні оптимальних параметрів для підвищення ефективності перетворення сонячної енергії.

При виконанні роботи для розробки структури сонячних елементів на основі гетеропереходу $n\text{-MoS}_2/p\text{-CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ використовувалися методи комп'ютерної симуляції у програмному середовищі SCAPS.

У результаті проведених досліджень було виконано ряд комп'ютерних симуляцій структур фотоелектричних перетворювачів сонячної енергії, набуто навичок роботи з транспортними моделями, зроблено висновки про особливості застосування таких елементів.

Робота складається із вступу, трьох розділів основної частини та висновків. У першому розділі наведено огляд фізичних основ принципу дії, особливостей будови двовимірних фотогальванічних елементів. У другому розділі описано методи симуляції структур, розробку та опис програми для моделі фотоелектричного перетворювача на основі гетеропереходу $n\text{-MoS}_2/p\text{-CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$. У третьому розділі проаналізовано та порівняно результати моделювання з реальними характеристиками, розглянуто методи оптимізації ФЕП.

РОЗДІЛ 1. ОГЛЯД ХАРАКТЕРИСТИК ДВОВИМІРНИХ ФОТОЕЛЕКТРИЧНИХ ПЕРЕТВОРЮВАЧІВ

1.1. Властивості та застосування 2D матеріалів

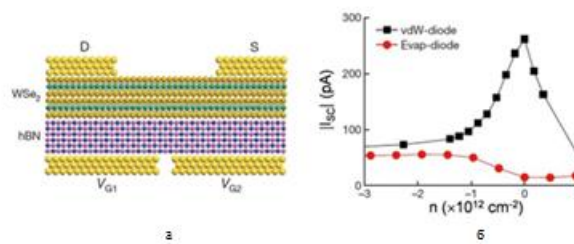


Рис.1.1. Схема пристрою WS₂ зі спліт-гейтом (а) та залежність I_{sc} від густини носіїв заряду для пристрою з ван-дер-ваальсовим (vdW) та конденсованим (Evap) контактами (б)

1.2. Класифікація 2D фотоелектричних перетворювачів

4

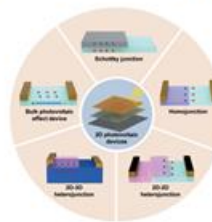


Рис. 1.2. Загальна класифікація 2D фотоелектричних пристроїв, включаючи переходи Шотткі, гомопереходи, 2D–2D гетеропереходи, 2D–3D гетеропереходи та пристрої з об'ємним фотогальванічним ефектом

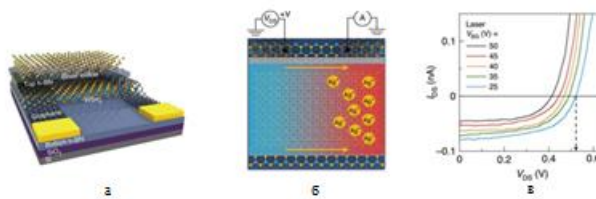


Рис. 1.3. Схема фотогальванічного пристрою на основі 2D шару WSe_2 (а), ілюстрація механізму легування іонами Ag^+ (б) та вольт-амперні характеристики гомопереходу під впливом лазерного опромінення з довжиною хвилі 532 нм (в)

1.3. Порівняльні характеристики 2D фотогальванічних переходів

5

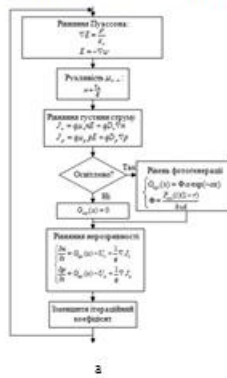
Таблиця 1.1

Електричні параметри фотоелектричних перетворювачів

Пристрій	PCE (%)	EQE (%)	V _{oc} (V)	FF
Pt/MoS ₂ /Ag	0,2	1,74	1,02	0,26
IT'-MoTe ₂ /MoS ₂ /Cr	–	20	0,19	–
WS ₂ /Au	0,46	40	0,256	0,44
Gr/WS ₂ /Pt	5	92	0,4	0,39
Gr/WO ₃ /WSe ₂ /Pt	5,44	–	0,47	0,59
MoO ₃ /Gr/WSe ₂ /Au	5,1	–	0,476	0,617
MoTe ₂ homojunction	–	40	0,3	0,5
WSe ₂ homojunction	–	83,6	0,75	–
CsPbBr ₃ /CdS	17,5	–	0,76	0,5
C ₃ AgBiBr ₆ /WS ₂ /Gr	–	14,7	–	–
Gr/WSe ₂ /MoS ₂	3,4	50	0,38	–
PbS/MoS ₂ /WSe ₂	7,65	100	0,42	–
Perovskite BP/MoS ₂	–	80	0,32	–
MoS ₂ /AsP	9	71	0,61	0,5
Gr/WO ₃ /WSe ₂ /MoS ₂	5	–	0,46	0,45
CNT/WSe ₂ /MoS ₂ /CNT	–	42,7	0,35	–
PtSe ₂ /Si	–	80	0,3	–

РОЗДІЛ 2 МЕТОДИКА І ТЕХНІКА ЕКСПЕРИМЕНТУ

2.1. Методика моделювання в SCAPS



Таблиця 2.1
Вхідні параметри моделювання процесів у гетероперелозі n-MoS₂/p-CH₃NH₂PbI₃

Параметр	n-MoS ₂	p-CH ₃ NH ₂ PbI ₃
Товщина L, нм	0,001-0,01*	2,0-4,5
Ширинка b1, мкм	1,5	1,0
Середня довжина в напрямку x, мкм	4,2	4,0
Діелектрична сталість ε ₁	11,6	12,6
Густина станів в зоні провідності N _c , см ⁻³	2,2 · 10 ¹⁹	1,00 · 10 ¹⁹
Густина станів в валентній зоні N _v , см ⁻³	1,80 · 10 ¹⁹	1,00 · 10 ¹⁹
Рухливість електронів μ _n , см ² /В	100	100
Рухливість дірок μ _p , см ² /В	25	25

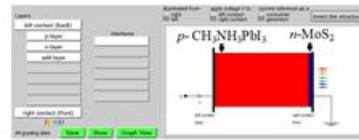


Рис. 2.1. Алгоритм числового розв'язання біполарної дрейф-дифузійної системи рівнянь Пуассона (а) та вигляд вікна SCAPS (б)

2.2. Оптимізація властивостей 2D гетеропереходів

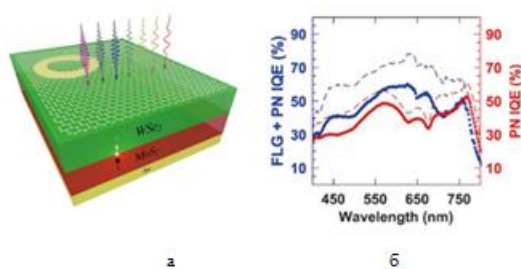
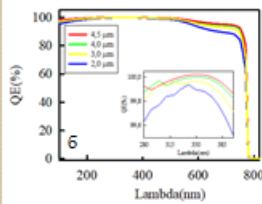
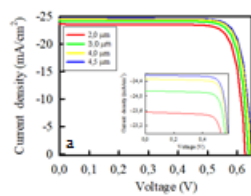


Рис. 2.2. Схема вертикального WSe_2/MoS_2 p-n-гетеропереходу (а) та його квантова ефективність з і без графенового верхнього електрода (б)

3.1. Розмірні залежності параметрів поглинального шару $p\text{-CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ 

Таблиця 3.1
Вплив товщини поглинального шару на електричні параметри гетеропереходу $n\text{-MoS}_2/p\text{-CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$

Товщина поглинального шару d , мкм	U_{oc} , В	J_{sc} , mA/cm^2	FF , %	η , %
2.0	0,6281	23,5642	83,06	12,29
2,5	0,6338	23,9007	83,21	12,60
3,0	0,6387	24,1409	83,29	12,84
3,5	0,6425	24,3184	83,40	13,03
4,0	0,6457	24,4561	83,51	13,19
4,5	0,6486	24,5662	83,60	13,32

Рис. 3.1. ВАХ (а) та залежність квантового виходу (б) гетеропереходу $n\text{-MoS}_2/p\text{-CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ при різній товщині поглинального шару

3.2. Розмірні залежності параметрів віконного шару n-MoS₂

9

Таблиця 3.2

Вплив товщини віконного шару на електричні параметри гетеропереходу n-MoS₂/p-CH₃NH₃PbI₃

Товщина віконного шару d , нм	U_{oc} , В	J_{sc} , mA/cm ²	FF , %	η , %
1,0	0,6280	23,5373	83,03	12,27
3,0	0,6280	23,5410	83,03	12,28
5,0	0,6281	23,5466	83,04	12,28
7,0	0,6281	23,5521	83,05	12,29
9,0	0,6281	23,5605	83,06	12,29
11,0	0,6281	23,5680	83,06	12,30
13,0	0,6281	23,5762	83,07	12,30
15,0	0,6281	23,5853	83,07	12,31

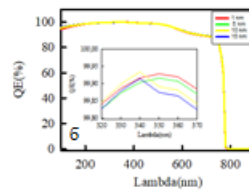
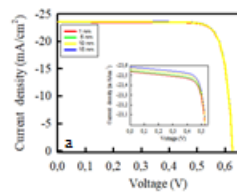


Рис. 3.2. ВАХ (а) та залежність квантового виходу (б) гетеропереходу n-MoS₂/p-CH₃NH₃PbI₃ при різних товщинах віконного шару

3.3. Оптимізація характеристик $\text{WSe}_2/\text{MoS}_2$ p-n-гетеропереходу із квантовими точками PbS

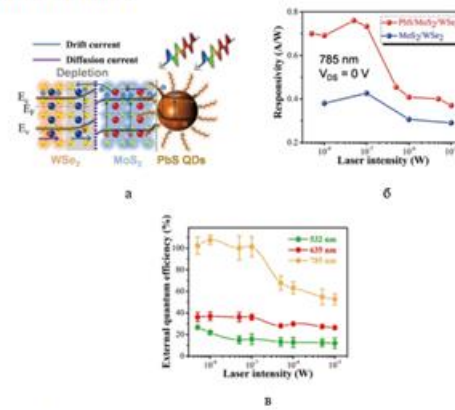


Рис.3.3. Енергетична діаграма p-n гетеропереходу $\text{WSe}_2/\text{MoS}_2$ із квантовими точками галеніту PbS (а), фотовідгук з квантовими точками і без них (б), квантова ефективність EQE гетеропереходу із квантовими точками під впливом світла з різною довжиною хвилі (в)

ВИСНОВКИ

11

1. Дослідження фотоелектричних параметрів гетеропереходів на основі двовимірних матеріалів та перовскіту є актуальним напрямом для подальшого розвитку технологій виготовлення фотогальванічних пристроїв. Поєднання високих електронних характеристик двовимірних матеріалів з відмінними фотоелектричними властивостями перовскітів дозволяє створювати ефективні та потенційно дешеві сонячні елементи. Подальші дослідження спрямовані на покращення стабільності, сумісності матеріалів та масштабування виробничих процесів.
2. В результаті комп'ютерних симуляцій вдалось отримати максимальну ефективність фотоперетворювачів на основі гетеропереходу $n\text{-MoS}_2/p\text{-CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ на рівні 13,2 %, напругу робочого ходу $U_{oc}=0,65$ В, густина сили струму $I_{sc}=24,5$ mA/cm^2 , фактор заповнення ВАХ $FF=83,5$ %. Товщина потпиняючого шару перовскіту $p\text{-CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ становила від 3,5 до 4,0 μm , а товщина віконного шару двовимірного матеріалу $n\text{-MoS}_2$ відповідно - від 5 нм до 10 нм.
3. Розглянуті гетеропереходи $n\text{-MoS}_2/p\text{-CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ мають широку область фоточутливості в діапазоні довжин хвиль від 100 нм до 785 нм. Це свідчить про те, що гетеросистеми такої конструкції забезпечують великий вибір параметрів для експлуатації. Збільшення товщини потпиняючого шару $p\text{-CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ понад 4,0 μm є недоцільним, оскільки саме при цій товщині досягається насичення здатності до потпинання світла та генерації електронно-діркових пар. Подальше збільшення товщини шару призводить до зростання послідовного опору приладу та віддалення області генерації носіїв заряду від гетеропереходу.
4. Сонячні батареї із гетеропереходами на основі двовимірних матеріалів із квантовими точками представляють собою перспективний напрям. Подальші дослідження можуть бути спрямовані на підвищенні ефективності та доступності цієї технології.