

УДК 539.2: 536.421.1

DOI 10.36910/775.24153966.2021.72.31

Ж.Р. Олексин¹, Л.І. Никируй¹, Р.С. Яворський¹, І.В. Малярська¹, О.М. Матківський¹,
О.В. Замуруєва², С.А. Федосов²¹Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника²Волинський національний університет імені Лесі Українки**МОДЕЛЮВАННЯ ВПЛИВУ ПАРАМЕТРІВ БУФЕРНОГО ШАРУ НА ВЛАСТИВОСТІ
ФОТОЕЛЕКТРИЧНОЇ КОМІРКИ**

У статті теоретично продемонстровано високоефективні сонячні батареї на основі телуриду кадмію (CdTe) з подвійним гетеропереходом (DHSC) з додаванням, окремо, шару заднього контакту (BSF) селеніду кадмію (CdSe) і селеніду сурми (Sb₂Se₃), за допомогою програмного забезпечення SCAPS 3.3.09. Детально досліджено вплив вихідних параметрів на фотоелектричні характеристики проектованої гетероструктури. Встановлено, що ефективність перетворення енергії (PCE) сонячної батареї CdTe значно підвищується за рахунок використання шарів BSF CdSe та Sb₂Se₃. Коефіцієнт корисної дії сонячного елемента CdTe збільшується з 14,57%, для чистих SC, до 24,13% при значеннях $V_{oc}=1,03$ В, $J_{sc}=28,26$ мА/см² і $FF=82,97\%$, завдяки використанню шару BSF CdSe. З іншого боку, ефективність сонячного елемента CdTe підвищується до 25,16% при $V_{oc}=1,06$ В, $J_{sc}=28,25$ мА/см² і $FF=83,26\%$, відповідно при використанні шару BSF Sb₂Se₃. Ці результати показують, що і CdSe, і Sb₂Se₃ є перспективними BSF для виготовлення економічно ефективних сонячних елементів з подвійним гетеропереходом на основі CdTe.

Ключові слова: сонячні батареї, SCAPS, тонкі плівки, гетероструктури, телурид кадмію, селенід кадмію, селенід сурми.

Ж.Р. Олексин, Л.І. Никируй, Р.С. Яворський, І.В. Малярська, О.М. Матківський,
О.В. Замуруєва, С.А. Федосов**МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПАРАМЕТРОВ БУФЕРНОГО СЛОЯ НА СВОЙСТВА
ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ЯЧЕЙКИ**

В статье теоретически продемонстрированы высокоэффективные солнечные батареи на основе теллурида кадмия (CdTe) с двойным гетеропереходом (DHSC) с добавлением отдельно слоя заднего контакта (BSF) селенида кадмия (CdSe) и селенида сурьмы (Sb₂Se₃), с помощью программного обеспечения SCAPS 3.3.09. Подробно исследовано влияние выходных параметров на фотоэлектрические характеристики проектируемой гетероструктуры. Установлено, что эффективность преобразования энергии (PCE) солнечной батареи CdTe значительно повышается за счет использования слоев BSF CdSe и Sb₂Se₃. Коэффициент полезного действия солнечного элемента CdTe увеличивается с 14,57%, для чистых SC, до 24,13% при значениях $V_{oc}=1,03$ В, $J_{sc}=28,26$ мА/см² и $FF=82,97\%$, благодаря использованию шара BSF CdSe. С другой стороны, эффективность солнечного элемента CdTe повышается до 25,16% при $V_{oc}=1,06$ В, $J_{sc}=28,25$ мА/см² и $FF=83,26\%$ соответственно при использовании слоя BSF Sb₂Se₃. Эти результаты показывают, что и CdSe, и Sb₂Se₃ перспективны BSF для изготовления экономически эффективных солнечных элементов с двойным гетеропереходом на основе CdTe.

Ключевые слова: солнечные батареи, SCAPS, тонкие пленки, гетероструктуры, теллурид кадмия, селенид кадмия, селенид сурьмы.

Z. Oleksyn, L. Nykyruy, R. Yavorskiy, I. Malyars'ka, O. Matkivskiy, O. Zamurujeva, S. Fedosov

**SIMULATION OF INFLUENCE OF BUFFER LAYER PARAMETERS ON PHOTOELECTRIC
CELL PROPERTIES**

The article theoretically demonstrates high-performance solar cells based on cadmium telluride (CdTe) with double heterojunction (DHSC) with the addition of a separate back contact layer (BSF) of cadmium selenide (CdSe) and antimony selenide (Sb₂Se₃), using software SCAPS 3.3.09. The influence of initial parameters on the photoelectric characteristics of the designed heterostructure is investigated in detail. It is established that the energy conversion efficiency (PCE) of the CdTe solar battery is significantly increased due to the use of BSF CdSe and Sb₂Se₃ layers. The efficiency of the solar cell CdTe increases from 14.57%, for pure SC, to 24.13% at $V_{oc}=1.03$ V, $J_{sc}=28.26$ mA/cm² and $FF=82.97\%$, due to the use of the BSF CdSe layer. On the other hand, the efficiency of the solar cell CdTe increases to 25.16% at $V_{oc}=1.06$ V, $J_{sc}=28.25$ mA/cm² and $FF=83.26\%$, respectively, when using the BSF layer Sb₂Se₃. These results show that both CdSe and Sb₂Se₃ are promising BSFs for the fabrication of cost-effective solar cells with a double heterojunction based on CdTe.

Keywords: solar panels, SCAPS, thin films, heterostructures, cadmium telluride, cadmium selenide, antimony selenide.

Вступ. Глобальна енергетична криза та стрімкий ріст використання електричної енергії у повсякденному житті є серйозними проблемами, які спричинили підвищений інтерес науковців до вивчення альтернативних джерел енергії [1-2]. За останні кілька десятиліть стрімко почала розвиватись сонячна енергетика, яка має більше перспектив аніж інші відновлювальні джерела енергії. На даний час, фотоелектричне перетворення сонячної енергії дає значний внесок у виробництво електроенергії в багатьох країнах, причому понад 90% світового ринку

© Ж.Р. Олексин, Л.І. Никируй, Р.С. Яворський, І.В. Малярська, О.М. Матківський, О.В. Замуруєва,
С.А. Федосов

фотоелектричної енергії покладається на, кремнієві сонячні батареї першого покоління, оскільки це стабільний, нетоксичний і добре відомий матеріал [3-5]. Сучасний стан лабораторних досліджень спрямований на здешевлення технології, а відповідно і кінцевої вартості продукції при підвищенні ефективності фотоелектричних модулів [6-7]. Найкращі значення ефективності кремнієвих сонячних елементів на теперішній час становлять 26,7%. [8-9]. Однак кремній є непрямозонним напівпровідником з відносно слабким коефіцієнтом поглинання світла, його запаси є вичерпними. Близько 40% вартості кінцевої панелі обходиться шліфування і підготовка кремнію, а впродовж 10 років використання, ефективність такого модуля падає вдвічі [10]. Для здешевлення технології виробництва стрімко почали розвиватись тонкоплівкові сонячні елементи. Такі модулі на їх основі показали конкурентноспроможні властивості в порівнянні із кремнієвими, при значно менших товщинах матеріалу [11]. Структура тонкоплівкового сонячного елемента другого покоління (2G), заснована на CdTe і CIGS (Copper Indium Gallium Selenide), показує високі значення коефіцієнта поглинання у видимому діапазоні спектру.

Межа, до якої може наблизитися ефективність сонячної комірки, залежить від властивостей матеріалу (ширина забороненої зони) та ряду факторів, як наприклад, геометрія, кут падіння сонячного випромінювання, коефіцієнт поглинання сонячної енергії та ін. Серед важливих чинників потрібно вказати на врахування частки рекомбінації між дірками та електронами, що призводить до випромінювання. Випромінювальна рекомбінація встановлює верхню межу часу життя неосновних носіїв, який розраховують із використанням принципу детальної рівноваги. Відповідно до такої постановки задачі, у [12] показано, що ліміт ефективності фотоелектричної комірки на основі абсолютно чорного тіла може становити у межах 30 %. Такі ж значення показують і інші роботи [13]. Використання нанодротів у якості тонкоплівкових сонячних елементів дозволяє розширити цю межу до 40%, однак, у таких структурах вже технологічно реалізовано методику концентрації випромінювання [14].

Ефективність сонячного перетворювача, за допомогою систем концентраторів чи відбивачів, в принципі можна довести навіть до термодинамічної межі (Th-Tc)/Tc [15]. Планарний сонячний елемент без концентраторів випромінювання не може наблизитися до таких значень. Тому повідомлення про високі значення ефективності деколи можуть викликати певні сумніви [16]. Однак, без сумніву, використання гетероструктур з різними матеріалами за структурою та значенням ширини забороненої зони є перспективним для розвитку фотоелектричних систем 2-ої генерації та спонукає шукати нові композиції.

У цій статті досліджено високоефективний сонячний елемент із подвійним гетеропереходом на основі абсорбційного шару CdTe шляхом імітаційного підходу, щоб відповідати критеріям проектування сонячних елементів з використанням професійного апарату комп'ютерного моделювання SCAPS-1D (Solar Cell Capacitance Simulator). На сьогодні CdTe є одним з найбільш перспективних матеріалів, на основі яких можна отримати високоефективні тонкоплівкові фотоелементи [8]. Ефективність фотоперетворення, яка спостерігалася для нього становить $\eta \geq 21,0\%$ з напругою розімкненого кола >1 В [17, 18]. Сонячні елементи на основі CdTe досягли світового ринку фотоелектричної енергії з часткою $\sim 5,1\%$, і він вважається другим економічно ефективним матеріалом після кремнію [8, 19]. Є дослідження, які вказують, що модуль сонячних елементів CdTe має ефективність 18% із використанням Mg_xZn_{1-x}O (MZO) як віконного шару замість CdS [20]. У [21] було передбачено, що ефективність сонячних елементів на основі CdTe може бути додатково підвищена до 28,04% за допомогою дірково-транспортного шару оксиду нікелю NiO.

Високопровідну тонку плівку CdSe та Sb₂Se₃ представляємо у дослідженні окремо як буферний шар (BSF) для підвищення ефективності сонячних елементів із гетеропереходом CdS/CdTe. CdSe є напівпровідником II-VI n-типу з прямою забороненою зоною 1,7 eV [22]. Він широко використовується у світловипромінюючих діодах, сонячних елементах, а також фотоелектрохімічних елементах [203]. Тонкі плівки CdSe можна осаджувати різними методами: фізичне осадження з парової фази, напилення, піролізне розпилення, електроосадження тощо [24-27]. Фізичне осадження з парової фази для цього матеріалу часто використовується, оскільки воно дає багато можливостей для модифікації параметрів осадження та отримання плівок із визначеною структурою та властивостями. Теплове випаровування під вакуумом за допомогою техніки квазізамкнутого об'єму є одним з найбільш вигідних методів отримання однорідних плівок CdSe. На даний час CdSe в основному використовувався в якості віконного шару, як альтернатива CdS, в

сонячних елементах CdTe [22]. Проте майже немає інформації про високолегований р-тип CdSe як шар BSF в сонячних елементах CdTe.

Селенід сурми (Sb_2Se_3) є неорганічним напівпровідником р-типу з ромбічною фазою [28]. Для нього характерні прямі оптичні переходи у забороненій зоні в діапазонах 1,0–1,5 eV [29] і 1,2–1,9 eV [30] залежно від методу осадження та умов легування. Він має рухливість дірок до $42 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ і високий коефіцієнт поглинання ($>10^5 \text{ cm}^{-1}$) [31]. Ці фізичні параметри зробили Sb_2Se_3 придатним поглинаючим шаром для застосування у фотовольтаїці. Концентрацію носіїв р-типу Sb_2Se_3 можна збільшити шляхом легування S, Sn, Cu тощо [32]. Найвищий ККД виготовлених сонячних елементів з Sb_2Se_3 як поглинаючого шару показує ефективність 9,2% [33]. Проте існує дуже мало повідомлень про використання матеріалу Sb_2Se_3 як шару BSF.

У цій роботі теоретично показано вплив різних фізичних параметрів шарів CdS, CdTe, CdSe та Sb_2Se_3 на фотоелектричні параметри змодельованих сонячних елементів ITO/CdS/CdTe/CdSe (або ITO/CdS/CdTe/ Sb_2Se_3). Це дослідження показує, що включення буферних шарів CdSe та Sb_2Se_3 є перспективним для високоефективних сонячних елементів із подвійним гетеропереходом CdS/CdTe.

Методологія досліджень. Сонячні елементи з гетеропереходом CdS/CdTe були змодельовані за допомогою програмного забезпечення SCAPS 3.3.09 з урахуванням змінних параметрів, як описано в інших джерелах [10, 33]. Симуляційний пакет SCAPS (Solar Cell Capacitance Simulator) створений для модельних розрахунків тонкоплівкових сонячних елементів [34, 35]. Програмне середовище використовує метод дрейфу-дифузії, який працює на основі математичного розв'язку рівняння Пуассона та рівнянь неперервності для вільних електронів і вільних дірок [36]. Тому він може враховувати вплив зміщення смуги, рухливості носіїв, концентрації легування та ширину забороненої зони. Для проведення моделювання спроектованої структури сонячного елемента в середовищі SCAPS використовували світловий спектр AM 1,5 та потужність випромінювання 1000 Вт/м^2 при температурі 300 К. ITO та Mo були використані як передній та задній контакти.

Оптична ширина забороненої зони, коефіцієнт поглинання, концентрація носіїв та інші вхідні параметри, які використані при моделюванні структури сонячного елемента, брали з дослідницьких робіт [37, 38, 39], або обчислені експериментально. Властивості матеріалу для кожного шару сонячного елемента з гетеропереходом CdS/CdTe наведені в таблицях 1 та 2. З таблиць також видно, що при моделюванні враховано значну кількість дефектів інтерфейсу, щоб мати більш реалістичний пристрій.

Табл. 1.

Параметри моделювання використані для сонячних елементів з подвійним гетеропереходом n-CdS/p-CdTe/p⁺-CdSe або n-CdS/p-CdTe/p⁺- Sb_2Se_3 при 300 К

Параметри	ITO	n-CdS	p-CdTe	CdSe	Sb_2Se_3
Товщина, нм	50	100*	1500*	100*	100*
Ширина забороненої зони, eV	3,6	2,42	1,5	1,7	1,53
Спорідненість до електрона, eV	4,5	4,3	4,28	3,93	4,04
Діелектрична проникність (відн.)	8,9	9,35	10,3	9,5	18,0
Ефективна густина станів зони провідності, cm^{-3}	$2,2 \cdot 10^{18}$	$2,2 \cdot 10^{18}$	$9,2 \cdot 10^{17}$	$2,8 \cdot 10^{18}$	$2,2 \cdot 10^{18}$
Ефективна густина станів валентної зони, cm^{-3}	$1,8 \cdot 10^{19}$	$1,8 \cdot 10^{19}$	$5,2 \cdot 10^{18}$	$1,2 \cdot 10^{19}$	$1,8 \cdot 10^{19}$
Теплова швидкість електронів (см/с)	$1,0 \cdot 10^7$	$1,0 \cdot 10^7$	$1,0 \cdot 10^7$	$1,0 \cdot 10^7$	$1,0 \cdot 10^7$
Теплова швидкість дірок (см/с)	$1,0 \cdot 10^7$	$1,0 \cdot 10^7$	$1,0 \cdot 10^7$	$1,0 \cdot 10^7$	$1,0 \cdot 10^7$
Рухливість електронів, $\text{cm}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$	$5,0 \cdot 10^1$	$1,0 \cdot 10^2$	$3,2 \cdot 10^2$	$0,593 \cdot 10^1$	$1,5 \cdot 10^1$
Рухливість дірок, $\text{cm}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$	$1,0 \cdot 10^1$	$2,5 \cdot 10^1$	$4,0 \cdot 10^1$	$2,5 \cdot 10^1$	$5,1 \cdot 10^0$
N_D , cm^{-3}	$1,0 \cdot 10^{21}$	$1,15 \cdot 10^{17*}$	0	$1,0 \cdot 10^7$	$1,0 \cdot 10^7$
N_A , cm^{-3}	0	0	$1,0 \cdot 10^{16*}$	$1,0 \cdot 10^{19*}$	$1,0 \cdot 10^{19*}$
Коефіцієнт радіаційної рекомбінації ($\text{cm}^3/\text{с}$)	$2,3 \cdot 10^{-11}$	$2,3 \cdot 10^{-9}$	$2,3 \cdot 10^{-9}$	$2,3 \cdot 10^{-9}$	$2,3 \cdot 10^{-9}$

Табл. 2.

Параметрів дефектів на інтерфейсі, що використовуються при моделюванні

Параметри	Інтерфейс CdS/CdTe	CdTe/ CdSe або інтерфейс Sb ₂ Se ₃
Тип дефекту	Нейтральний	Нейтральний
Поперечний переріз захоплення електронів (см ²)	$1 \cdot 10^{-19}$	$1 \cdot 10^{-19}$
Поперечний переріз захоплення дірок (см ²)	$1 \cdot 10^{-19}$	$1 \cdot 10^{-19}$
Енергетичне положення дефекту E _t	Вище найвищого E _v	Вище найвищого E _v
Рівень енергії щодо еталонного (eV)	0,250	0,250
Загальна густина (см ⁻²)	$1,0 \cdot 10^{14}$	$1,0 \cdot 10^{14}$

«*» позначає змінні параметри.

Обговорення результатів.

1. Вплив поглинального та віконного шару на PV параметри CdS/CdTe сонячного елемента без шару BSF

1.1. Вплив товщини та концентрації носіїв поглинаючого шару CdTe

На першому етапі проведено дослідження впливу товщини шару поглинача CdTe та концентрації носіїв на продуктивність сонячних елементів CdS/CdTe. На рис. 1 показані залежності фотоелектричних характеристик сонячного елемента CdS/CdTe від товщини шару поглинача при сталій концентрації носіїв 10^{16} см⁻³. Оптимальна товщина шару CdS складала 100 нм і залишалась незмінною впродовж зміни параметрів моделювання, а товщину шару CdTe змінювали у діапазоні 250 – 2000 нм. На рис. 1 добре видно, що фотоелектричні параметри: напруга розімкнутого кола (V_{oc}), густина струму (J_{sc}) і коефіцієнт заповнення (FF) зростають із збільшенням товщини шару CdTe від 250 нм до 1500 нм, отже, і ефективність фотоперетворення η зростає з ~ 5,75% до ~ 14,57%. При подальшому збільшенні товщини поглинаючого шару від 1500 нм до 2000 нм параметри комірки J_{sc}, V_{oc} та FF мають тенденцію залишатися практично постійними при незначній зміні значення ефективності в межах ~1%. Спостерігається, що чим вище значення товщини шару CdTe, тим вище значення η. Але завданням даного дослідження є мінімізувати об'єми кінцевого пристрою, тому максимально допустиме значення товщини шару CdTe було встановлено 1500 нм з η = 14,57%.

На рис. 2 показано вплив концентрації носіїв шару поглинача CdTe в діапазоні від 10^{12} до 10^{17} см⁻³ для дослідження продуктивності комірки з сталою товщиною шару 1500 нм. На рисунку добре видно, що із збільшенням концентрації носіїв CdTe, значення V_{oc} і FF, а отже, ефективність перетворення енергії (power conversion efficiency (PCE)) гетеропереходу CdS/CdTe збільшується до ~ 15,45% і потім має тенденцію бути постійним, де J_{sc} незначно зменшується. Це пов'язано зі збільшенням рекомбінації серед численних носіїв по всій плівці зі збільшенням концентрації носіїв понад 10^{14} см⁻³. При більших концентраціях носіїв у шарі поглинача CdTe розсіювання домішок і швидкість рекомбінації носіїв збільшуються. Таким чином, транспортування дірок пригнічується на шарі поглинача CdTe до буферного шару CdSe або Sb₂Se₃. Враховуючи ці ефекти, було враховано граничний рівень концентрації носіїв шару поглинача CdTe, який становив 10^{16} см⁻³. З іншого боку, дефекти дислокацій та меж зерен, діють як центр захоплення носіїв, що зменшує час життя носіїв. Отже, густина розподілу дефектів є одним із критичних параметрів для проектування фотоелементів.

На рис. 3, представлена крива квантової ефективності (QE) з відповідною товщиною, виявляється цей подібний наслідок для товщини CdTe 250–2000 нм. Тому для подальшого дослідження шару BSF CdSe і Sb₂Se₃ було обрано оптимальну товщину CdTe ~ 1500 нм з η ~ 21%.

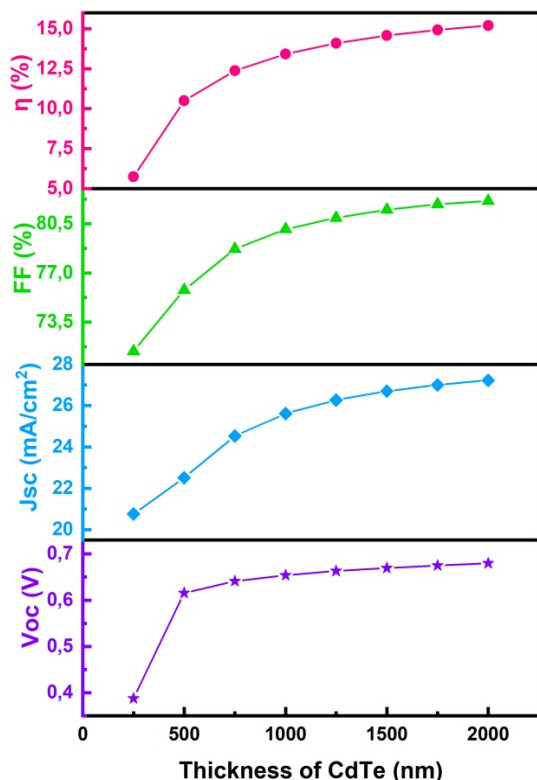


Рис. 1. Зміна вихідних параметрів V_{oc} , J_{sc} , FF та η для гетеропереходу CdS/CdTe як функції товщини поглинаючого шару CdTe ($d_{CdTe} = 250-2000$ nm)

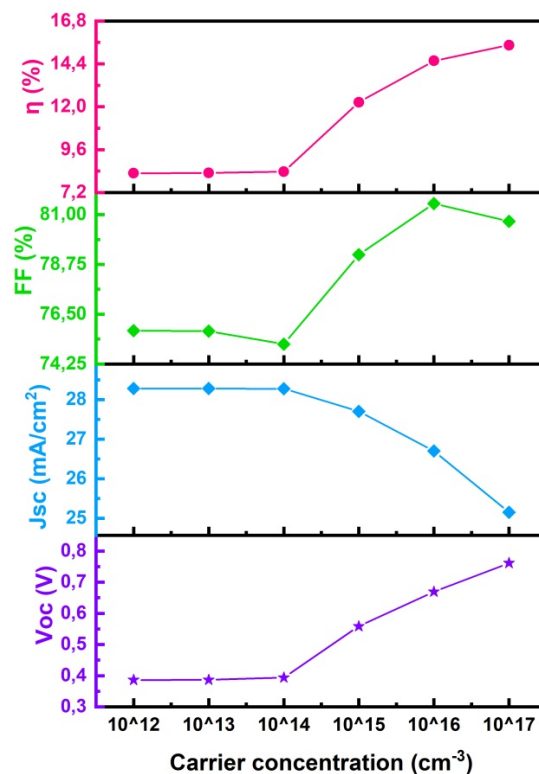


Рис.2. Зміна вихідних параметрів V_{oc} , J_{sc} , FF та η для гетеропереходу CdS/CdTe як функції концентрації носіїв поглинаючого шару CdTe

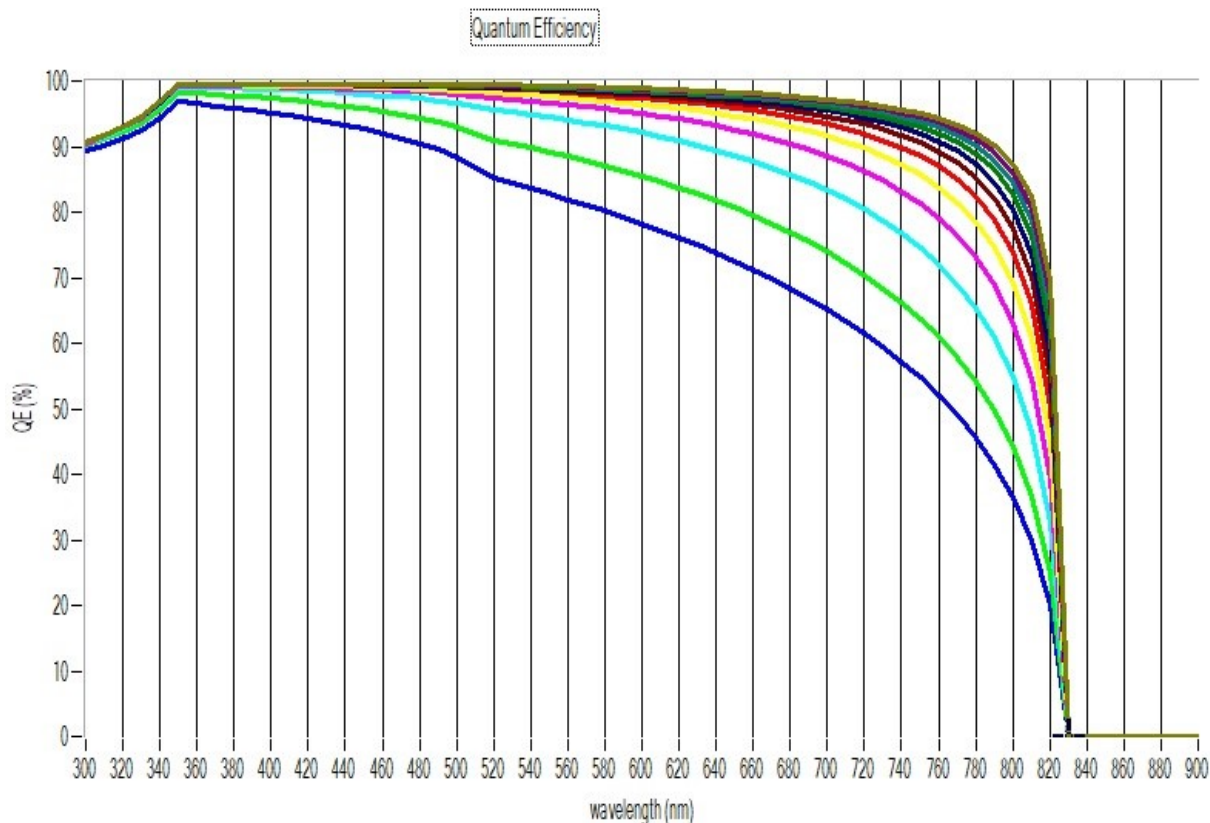


Рис. 3. Залежність квантової ефективності від товщини абсорбційного шару

1.2. Вплив товщини та концентрації носіїв віконного шару CdS.

На рис. 4 і 5 показано вплив товщини та концентрації носіїв віконного шару CdS на фотоелектричні характеристики сонячних елементів CdS/CdTe відповідно. Товщина шару CdS варіювалася від 50 до 350 нм. З рис. 4 видно, що J_{sc} зменшується з $\sim 26,71$ до $\sim 26,06$ mA/cm^2 зі збільшенням товщини віконного шару від 50 до 350 нм. Ефективність η зменшується з 14,57 до 14,33% зі збільшенням товщини віконного шару з 50 до 350 нм. У цьому дослідженні було обрано оптимальну товщину шару вікна CdS 100 нм.

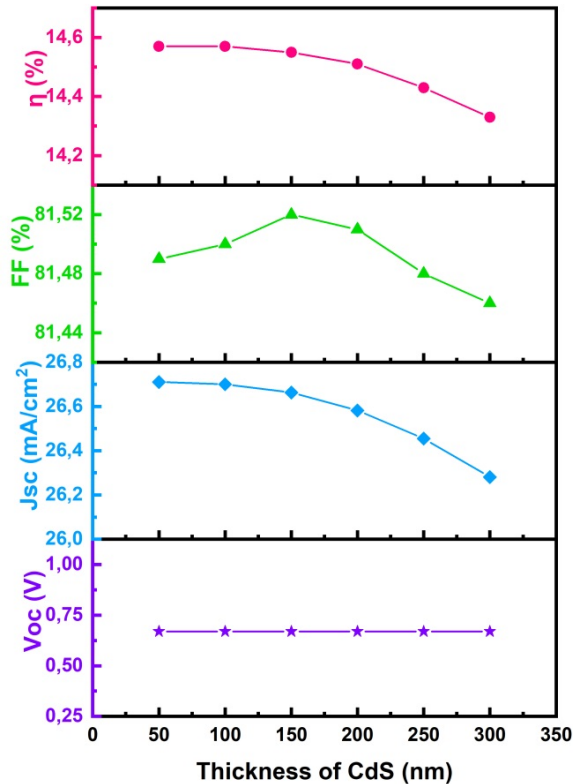


Рис. 4. Зміна вихідних параметрів V_{oc} , J_{sc} , FF та η для гетеропереходу CdS/CdTe як функції товщини віконного шару CdS ($d_{CdS} = 50\text{-}300$ nm)

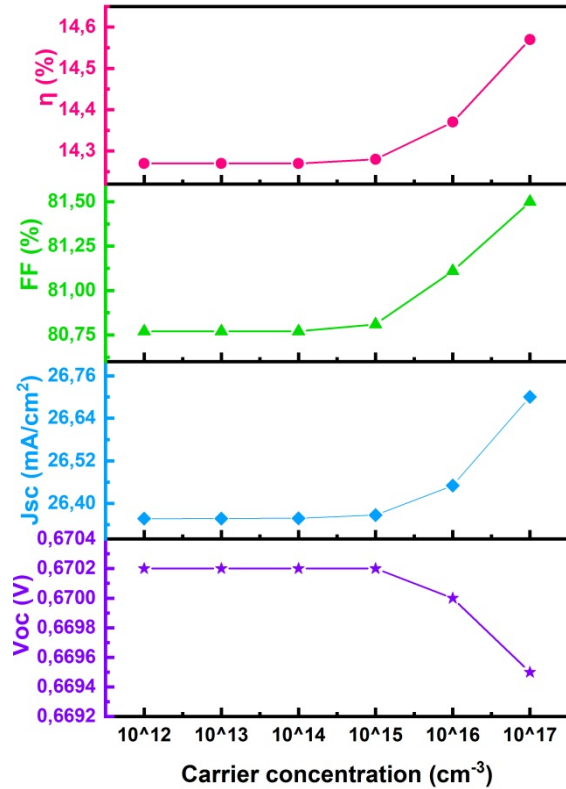


Рис. 5. Зміна вихідних параметрів V_{oc} , J_{sc} , FF та η для гетеропереходу CdS/CdTe як функції концентрації носіїв віконного шару CdS

1.3. Вплив BSF шару CdSe на продуктивність сонячного елемента

Для вивчення впливу додавання шару CdSe було досліджено роботу комірки при різній товщині та концентрації носіїв CdSe на CdS/CdTe/CdSe подвійного гетероперехідного сонячного елемента (dual-heterojunction solar cells (DHJSC)). На рис. 6 при збільшенні товщини шару CdSe від 50 нм до 300 нм V_{oc} показує постійну величину. Як показано на рис. 6, J_{sc} незначно змінюється від 28,261 до 28,262 mA/cm^2 із збільшенням товщини від 50 до 200 нм, а потім має тенденцію бути постійною величиною до 300 нм. З рис. 7 встановлено, що найвищий ККД CdS/CdTe сонячних елементів становить 24,13 % з $V_{oc}=1,03$ В, $J_{sc}=28,26$ mA/cm^2 і $FF=82,97\%$ з концентрацією носіїв 10^{19}cm^{-3} .

1.4. Вплив BSF шару Sb_2Se_3 на продуктивність сонячного елемента

Розглянуто моделювання впливу товщини та концентрації носіїв буферного шару Sb_2Se_3 на фотоелектричні параметри сонячного елемента CdS/CdTe. Відповідні залежності наведено на рис. 8 та 9. На рис. 8 товщину шару Sb_2Se_3 змінювали від 50 нм до 300 нм, напруга холостого ходу V_{oc} , густина струму короткого замикання J_{sc} при значеннях товщини шару більше 100 нм залишалися незмінними. Ефективність досягає свого максимального значення при $d_{CdSe} = 100$ нм і далі при збільшенні товщини шару змінюється несуттєво, одночасно значення фактору заповнення має тенденцію до спадання.

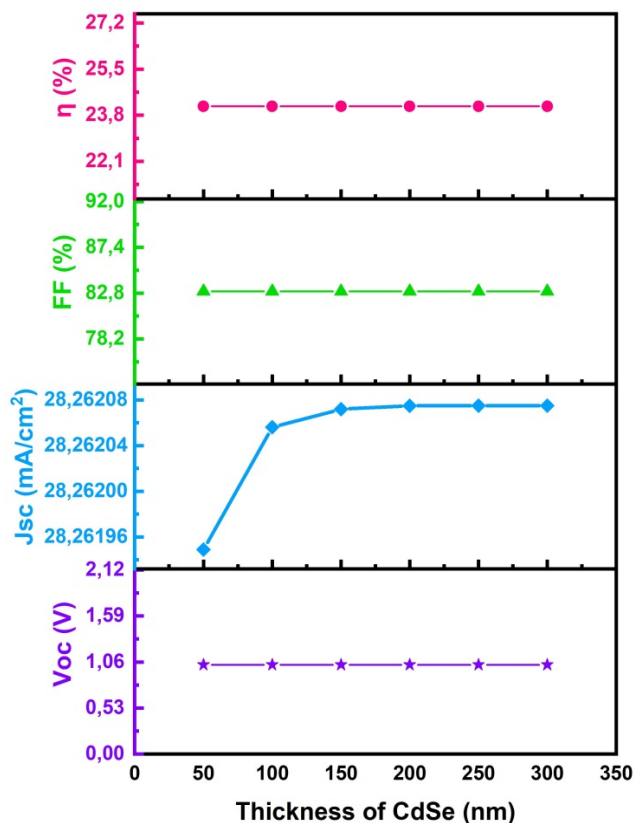


Рис. 6. Зміна вихідних параметрів V_{oc} , J_{sc} , FF та η сонячних елементів CdS/CdTe залежно від товщини BSF шару CdSe ($d_{CdSe} = 50\text{-}350$ нм)

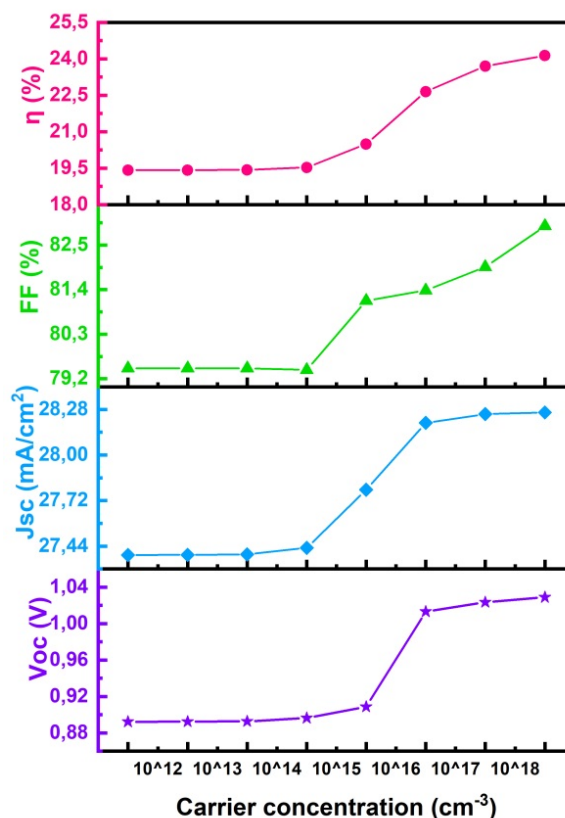


Рис. 7. Зміна вихідних параметрів V_{oc} , J_{sc} , FF та η сонячних елементів CdS/CdTe залежно від концентрації носіїв BSF шару CdSe

Як видно з рис.9, концентрацію носіїв шару Sb_2Se_3 змінюють від 10^{12} до 10^{19} cm^{-3} . Густина струму короткого замикання J_{sc} та напруга холостого ходу V_{oc} збільшуються із збільшенням концентрації носіїв шару $Sb_2Se_3 > 10^{15}$ cm^{-3} і майже не змінюється для товщини шару BSF ≥ 150 нм. Таке різке поліпшення фотоструму пов'язане з поглинанням фотонів більшої довжини хвилі і, отже, створенням більшої кількості пар електрон-дірка. Як добре видно з рис. 8, коли концентрація носіїв Sb_2Se_3 становить $\sim 10^{16}$ cm^{-3} , навіть товщина шару Sb_2Se_3 близько 50 нм забезпечує різке підвищення густини струму насичення фотоелемента до 28,2460 mA/cm^2 , V_{oc} 1,0674 В і FF 83,413.

1.5. Вплив концентрації дефектів на інтерфейсі на продуктивність фотоелектричної елемента

Інженерія інтерфейсу одна з найважливіших частин фотоелектричної технології. На рис. 10, 11 та 12 показані характеристики сонячних батарей для відповідної концентрації дефектів на інтерфейсі від 10^{11} – 10^{17} cm^{-2} для різних поверхонь CdS/CdTe, CdTe/CdSe та CdTe/ Sb_2Se_3 у відповідних сонячних елементах. Зазвичай дефект, який існує на межі розділу, збільшує ймовірність захоплення носіїв і послідовний опір комірки. Спостерігається несуттєвий вплив густини розподілу дефектів на межі розділу двох шарів до значення 10^{14} cm^{-2} , тоді як більша концентрація дефектів помітно впливає на вихідні параметри. На рис. 10 показано вплив концентрації дефектів на інтерфейсі CdS/CdTe для сонячної батареї ITO/CdS/CdTe, тобто структури без будь-якого BSF шару.

На рис. 11 зображено залежність вихідних параметрів сонячного гетероперехідного елемента ITO/CdS/CdTe/CdSe від величини концентрації дефектів на межі розділу CdTe/CdSe (а) та CdS/CdTe (б) окремо. Як видно на рис. 11(а), FF зменшується з 83,0% до 80,0%, а V_{oc} зменшується з 1,03 до 0,98 В, тому ефективність падає з 24,14% до 21,63%, хоча зниження J_{sc} несуттєве з 28,26 до 27,65 mA/cm^2 зі зміною концентрації дефектів на інтерфейсі CdSe/CdTe від 10^{11} до 10^{17} cm^{-2} . Це пов'язано зі збільшенням швидкості рекомбінації носіїв і послідовним опором.

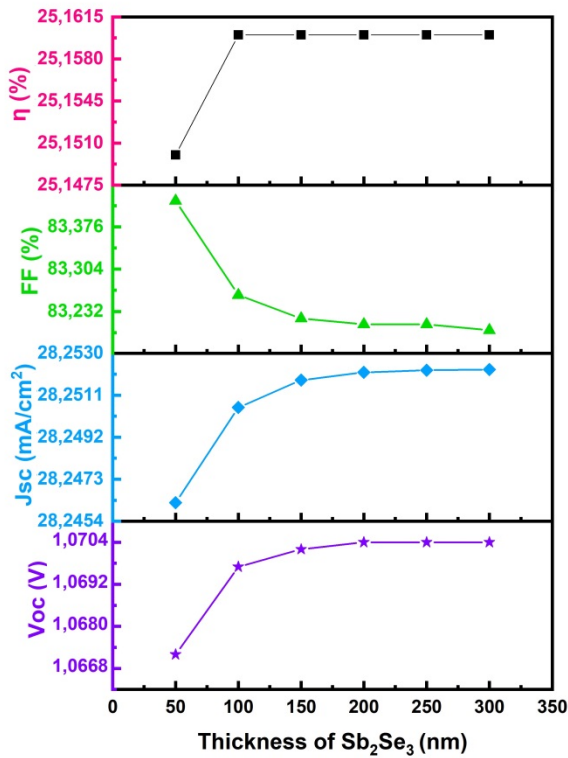


Рис. 8. Зміна вихідних параметрів V_{oc} , J_{sc} , FF та η сонячних елементів CdS/CdTe залежно від товщини BSF шару Sb_2Se_3 ($d_{Sb_2Se_3} = 50-350$ нм)

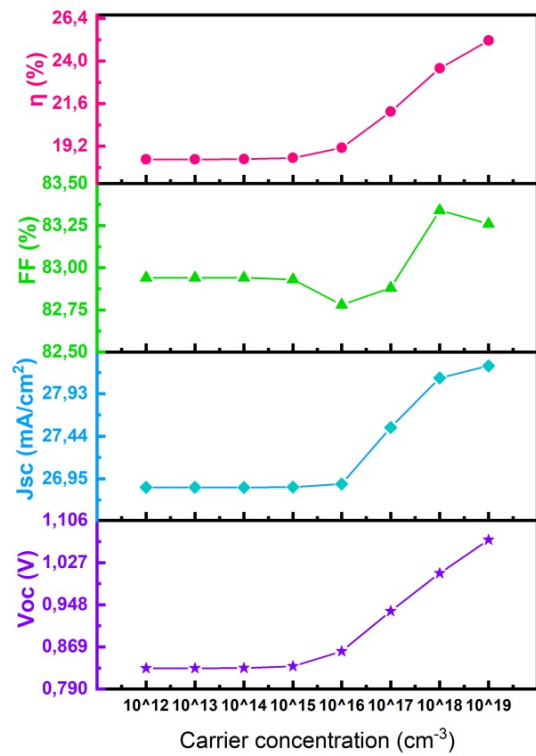


Рис. 9. Зміна вихідних параметрів V_{oc} , J_{sc} , FF та η сонячних елементів CdS/CdTe залежно від концентрації носіїв BSF шару Sb_2Se_3

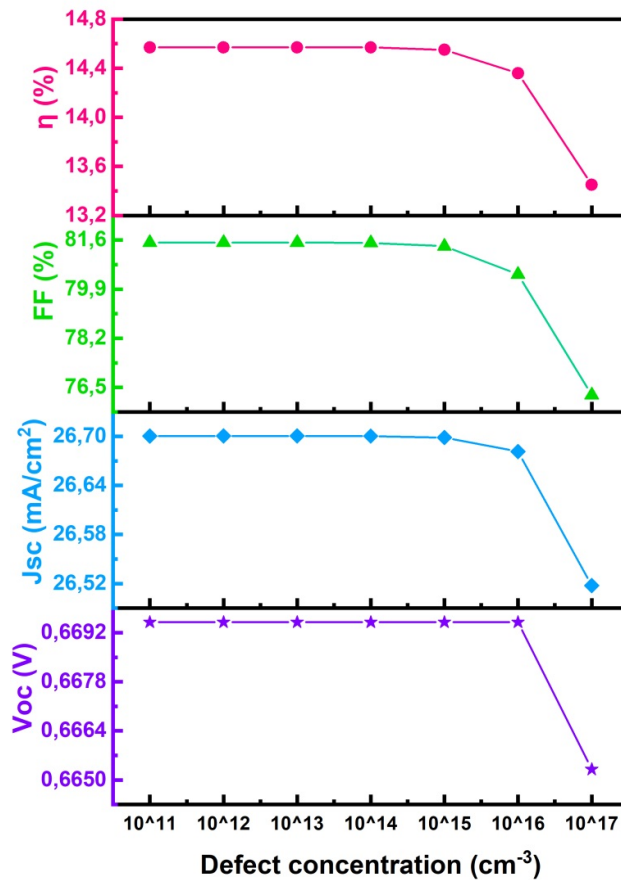
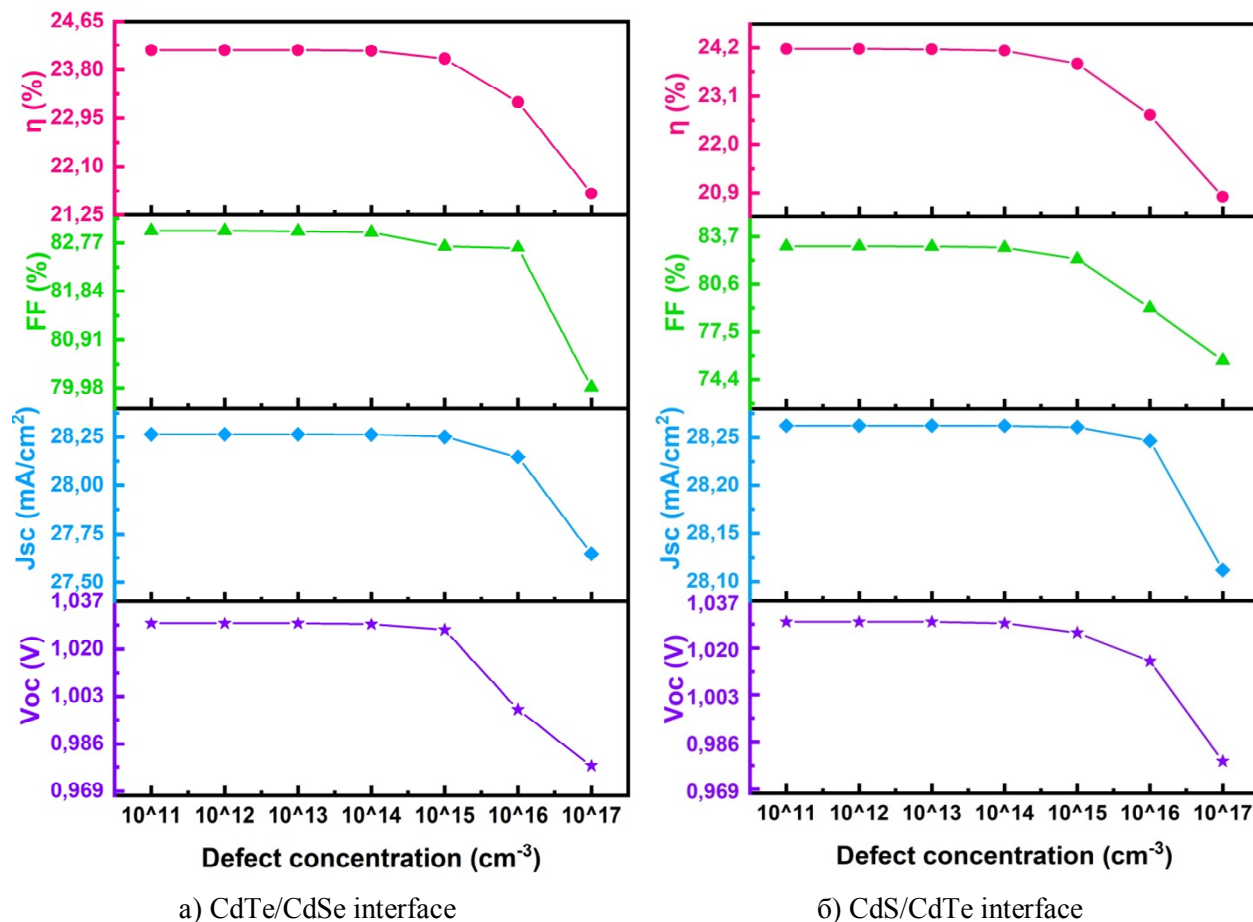


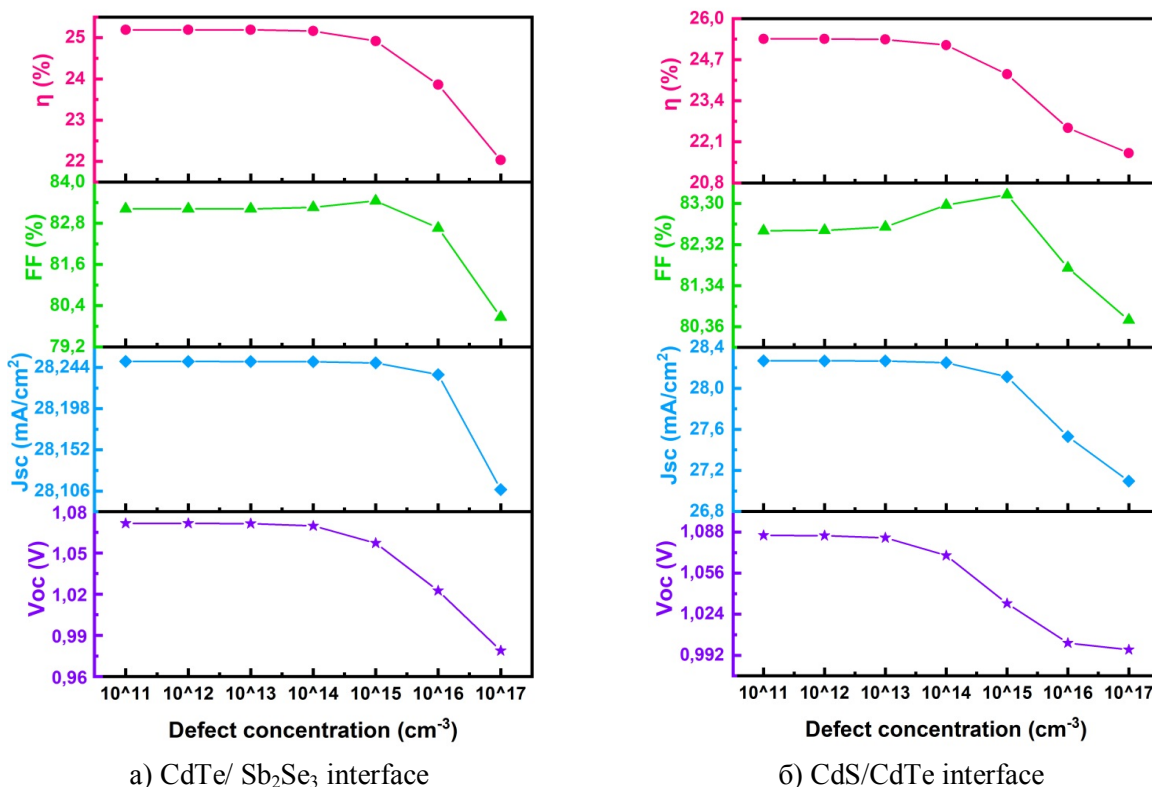
Рис. 10. Зміна вихідних параметрів V_{oc} , J_{sc} , FF та η залежно від концентрації дефектів на інтерфейсі: CdS/CdTe сонячного елемента ITO/CdS/CdTe без BSF шару

Вплив концентрації дефектів інтерфейсу CdS/CdTe на продуктивність комірки з подвійним гетеропереходом CdTe із BSF шаром CdSe показано на рис. 11(б). Ефективність η зменшується з 24,17 до 20,87% зі зниженням V_{oc} з 1,03 до 0,98 В, FF з 83,06% до 75,63% і J_{sc} з 28,26 до 27,65 mA/cm^2 зі зміною концентрації дефектів від 10^{11} до 10^{17} cm^{-2} на інтерфейсі CdS/CdTe. Подібно до інтерфейсу CdTe/CdSe, концентрація дефектів нижче 10^{14} cm^{-2} не помітна, але при $> 10^{14} \text{ cm}^{-2}$, зменшує ефективність кінцевої структури.



а) CdTe/CdSe interface
 б) CdS/CdTe interface
 Рис. 11. Зміна вихідних параметрів V_{oc} , J_{sc} , FF та η залежно від концентрації дефектів на інтерфейсі: (а) інтерфейс CdTe/CdSe та (б) інтерфейс CdS/CdTe сонячного елемента ITO/CdS/CdTe/CdSe на основі подвійного гетеропереходу

На рис. 12(а) показано вплив концентрації дефектів на вихідні параметри для інтерфейсу CdTe/Sb₂Se₃ сонячного елемента ITO/CdS/CdTe/Sb₂Se₃. Збільшення густини розподілу дефектів від 10^{11} до 10^{17} cm^{-3} на межі розділу CdTe/Sb₂Se₃ спричиняє до зниження V_{oc} з 1,08 до 0,99 В, FF з 82,65 до 80,52% і J_{sc} від 28,27 до 27,09 mA/cm^2 , тому ККД помітно падає з 25,36 до 21,74% (рис. 12, б). Дослідження концентрації дефектів на поверхні інтерфейсів свідчить про те, що концентрація дефектів має вагомий вплив на продуктивність сонячних елементів на основі CdTe із подвійним гетеропереходом. Міжфазні дефекти викликані дефектами структури двох відповідних матеріалів, а дифузія катіонів металу через шар поглиначка під час виготовлення комірки є ключовими джерелами дефектів на межі розділу [40-41]. Використовуючи ефективну техніку осадження та високу концентрацію під час виготовлення комірки, можна мінімізувати вплив дефектів на інтерфейсах.



а) CdTe/ Sb₂Se₃ interface
 б) CdS/CdTe interface
 Рис. 12. Зміна вихідних параметрів V_{oc}, J_{sc}, FF та η залежно від концентрації дефектів на інтерфейсі: (а) інтерфейс CdTe/ Sb₂Se₃ та (б) інтерфейс CdS/CdTe сонячного елемента ІТО/CdS/CdTe/ Sb₂Se₃ на основі подвійного гетеропереходу

3.9. Вплив роботи виходу заднього металевого контакту на сонячний елемент CdS/CdTe

Робота виходу визначається як мінімальна кількість енергії або фотонів, необхідних для викиду електрона з поверхні металу [42]. На рис. 13 показано вплив роботи виходу заднього контактного шару на продуктивність сонячних елементів із подвійним гетеропереходом на основі CdTe з додаванням CdSe або Sb₂Se₃ як шар BSF (back surface field) в діапазоні 4,6–5,7 еВ. На рис. 13 (а) та 13 (б) відповідно показані залежності густини струму короткого замикання J_{sc}, напруги холостого ходу V_{oc}, фактору заповнення FF та ефективності η сонячних елементів ІТО/n-CdS/p-CdT/CdSe та ІТО/n-CdS/p-CdTe/Sb₂Se₃ від значення роботи виходу (MWF) для різних металів. Моделювання проводили із використанням таких металів: молібдену (Mo), золота (Au), срібла (Ag), платини (Pt), заліза (Fe), міді (Cu), нікелю (Ni) та ніобію (Nb). Усі параметри для контактних матеріалів, що використовуються для моделювання, базуються на літературі [42-43]. У таблицях 3 та 4 відповідно, показано вплив роботи виходу на ефективність сонячних елементів та значення фактору заповнення ІТО/n-CdS/p-CdT/CdSe та ІТО/n-CdS/p-CdTe/Sb₂Se.

Табл. 3.

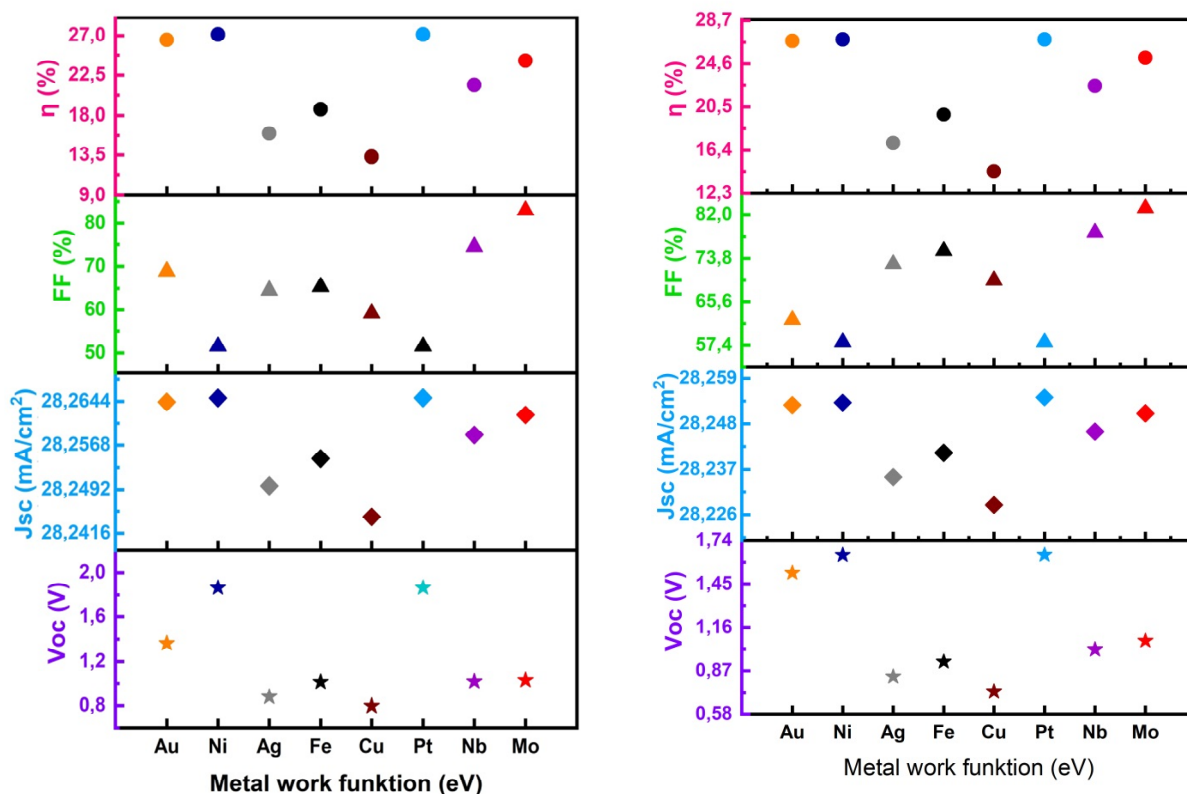
Вплив роботи виходу металу на кінцеву ефективність сонячного елемента ІТО/n-CdS/p-CdT/CdSe

Матеріал заднього контакту	Au	Ni	Ag	Fe	Cu	Mo	Pt	Nb
Робота виходу металу (MWF, eV)	5.1	5.5	4.7	4.8	4.6	5.0	5.7	4.9
Ефективність (η, %)	26.50	27.13	15.98	18.69	13.29	24.13	27.13	21.41
Фактор заповнення (FF, %)	68.88	51.53	64.54	65.35	59.19	82.97	51.53	74.50

Табл. 4.

Вплив роботи виходу металу на кінцеву ефективність сонячного елемента ІТО/n-CdS/p-CdTe/Sb₂Se

Матеріал заднього контакту	Au	Ni	Ag	Fe	Cu	Mo	Pt	Nb
Робота виходу металу (MWF, eV)	5.1	5.5	4.7	4.8	4.6	5.0	5.7	4.9
Ефективність (η, %)	26.75	26.90	17.06	19.77	14.37	26.15	26.90	22.49
Фактор заповнення (FF, %)	62.18	57.97	72.71	75.21	69.65	83.26	57.94	78.66



а) ITO/CdS/CdTe/CdSe

б) ITO/CdS/CdTe/Sb₂Se₃

Рис. 13. Залежність J_{sc} , V_{oc} , FF та η сонячних елементів ITO/n-CdS/p-CdTe/CdSe (а) та ITO/n-CdS/p-CdTe/Sb₂Se₃ (б) від значення роботи виходу (MWF) для різних металів при освітленості світленості сонячним спектром з падаючою потужністю випромінювання $P = 1000 \text{ Вт/м}^2$ при $T=300 \text{ К}$

Вибір відповідного металевого контакту має важливий вплив на ефективність η сонячного елемента з гетеропереходом. Молибденові електроди демонструють найвищу ефективність сонячних елементів з роботою виходу 5,0 eV та значенням фактору заповнення $>80\%$. Це пов'язано з високою функцією роботи виходу металу та більшим опором, що вплинуло на транспорт електронів. Для вищих значень роботи виходу висота бар'єру для більшості носіїв зменшилася, що вказує на те, що контакт стає більш омичним. Таким чином, зі збільшенням роботи виходу металу, V_{oc} і η також збільшуються. У цьому дослідженні отримали найкращі значення.

Висновки.

Досліджено роботу високоефективних сонячних елементів із подвійним гетеропереходом на основі CdTe із шарами BSF CdSe та Sb₂Se₃ за допомогою програмного середовища SCAPS 3.3.09. Результати моделювання показують, що введення шару CdSe та Sb₂Se₃ як BSF значно покращує вихідні параметри, а отже, і продуктивність сонячних елементів. Ефективність перетворення енергії (PCE) сонячного елемента CdS/CdTe без шару BSF становить приблизно 14,57%. Отримано значення фотоелектричної ефективності для гетероструктурних тонкоплівкових сонячних елементів ITO/CdS/CdTe/CdSe та ITO/CdS/CdTe/Sb₂Se₃ 24,13% та 25,16%, відповідно. Теоретичний аналіз показує, що шари CdSe та Sb₂Se₃ BSF, які можна осадити недорогими методами, створюють великий потенціал для практичного виготовлення високоефективних сонячних елементів із подвійним гетеропереходом на основі CdTe для використання сонячної енергії. Показано вплив роботи виходу заднього контактного шару на продуктивність сонячних елементів із подвійним гетеропереходом на основі CdTe з додаванням BSF-шарів.

Список використаних джерел:

1. Wisz, G., Nykyruy, L., Yakubiv, V., Hryhoruk, I., & Yavorskyi, R. Impact of Advanced Research on Development of Renewable Energy Policy: Case of Ukraine. International Journal of Renewable Energy Research (IJRER), 2018, 8(4), 2367-2384.

© Ж.Р. Олексин, Л.І. Никуруй, Р.С. Яворський, І.В. Малярська, О.М. Матківський, О.В. Замуруєва, С.А. Федосов

2. Yavorskyi R. Features of optical properties of high stable CdTe photovoltaic absorber layer. *Physics and Chemistry of Solid State*. 2020. Vol. 21, No. 2. P. 243–253.
3. Bhattacharya S., Sajeew J. Beyond 30% conversion efficiency in silicon solar cells: a numerical demonstration. *Scientific reports*. 2019. Vol.9, №1. P. 1-15. (<https://doi.org/10.1038/s41598-019-48981-w>).
4. IRENA. Global energy transformation: A roadmap to 2050 (2019 edition), International Renewable Energy Agency, Abu Dhabi. 2019. P. 1-52. URL: https://www.irena.org/-/media/Files/IRENA/Agency/Publication/2019/Apr/IRENA_Global_Energy_Transformation_2019.pdf.
5. Zhang C., Zhang J., Ma X., Feng Q. CdTe Solar Cells. *Semiconductor Photovoltaic Cells*. Springer, Singapore. 2021. P. 293-324. (DOI: 10.1007/978-981-15-9480-9_7)
6. Nykyruy L. I., Yavorskyi R. S., Zapukhlyak Z. R., Wisz G., Potera P. Evaluation of CdS/CdTe thin film solar cells: SCAPS thickness simulation and analysis of optical properties. *Optical Materials*. 2019. Vol. 92. P. 319-329.
7. Rahman M. F., Hossain J., Kuddus A., Tabassum S., Rubel M. H., Shirai H., Ismail A. B. A novel synthesis and characterization of transparent CdS thin films for CdTe/CdS solar cells. *Applied Physics A*. 2020. Vol. 126, No. 2. P. 145.
8. Green M. A., Dunlop E. D., Hohl-Ebinger J., Yoshita M., Kopidakis N., Hao X. Solar cell efficiency tables (version 56). *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*. 2020. Vol.28, №7. P. 629-638. <https://doi.org/10.1002/pip.3303>
9. Yoshikawa K., Kawasaki H., Yoshida W., Irie T., Konishi K., Nakano K., Yamamoto K. Silicon heterojunction solar cell with interdigitated back contacts for a photoconversion efficiency over 26%. *Nature energy*. 2017. Vol. 2, № 5, P.1-8.
10. Zapukhlyak Z. R., Nykyruy L. I., Wisz G., Rubish V. M., Prokopiv V. V., Halushchak M. O., Yavorskyi R. S. SCAPS modelling of ZnO/CdS/CdTe/CuO photovoltaic heterosystem. *Physics and Chemistry of Solid State*. 2020. Vol. 21, № 4. P. 660–668.
11. Petrus R. Y., Ilchuk H. A., Kashuba A. I., Semkiv I. V., Zmiiovskya E. O., Lys R. M. Optical Properties of Materials for Solar Energy Based on Cadmium Chalcogenides Thin Films. *Physics and Chemistry of Solid State*. 2019. Vol. 20, No. 4. P. 367–371.
12. Shockley, W., & Queisser, H. J. (1961). Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cells. *Journal of applied physics*, 32(3), 510-519.
13. Mathers, C. D. (1977). Upper limit of efficiency for photovoltaic solar cells. *Journal of Applied Physics*, 48(7), 3181-3182
14. Xu, Y., Gong, T., & Munday, J. N. (2015). The generalized Shockley-Queisser limit for nanostructured solar cells. *Scientific reports*, 5(1), 1-9
15. Müser, H. A. (1957). Thermodynamische behandlung von elektronenprozessen in halbleiter-randschichten. *Zeitschrift für Physik*, 148(3), 380-390
16. Kuddus, A., Ismail, A. B. M., & Hossain, J. (2021). Design of a highly efficient CdTe-based dual-heterojunction solar cell with 44% predicted efficiency. *Solar Energy*, 221, 488-501
17. Moon M. M. A., Rahman M.F., Kamruzzaman M.d., Hossain J., Ismail A.B.M. Unveiling the prospect of a novel chemical route for synthesizing solution-processed CdS /CdTe thin-film solar cells Unveiling the prospect of a novel chemical route for synthesizing solution-processed CdS/CdTe thin-film solar cells. *Energy Rep*. 2021. №7. P.1742–1756. <https://doi.org/10.1016/j.egy.2021.03.031>.
18. Clover I. First Solar Raises Bar for CdTe with 21.5% Efficiency Record. 6 February 2015. http://www.pv-magazine.com/2015/02/06/firstsolar-raises-bar-for-cdte-with-21-5-efficiency-record_100018069, 2015 (access, 15.11. 2020).
19. Rahman M. F., Hossain J., Kuddus A., Tabassum S., Rubel M. H., Shirai H., Ismail A. B. A novel synthesis and characterization of transparent CdS thin films for CdTe/CdS solar cells. *Applied Physics A*. 2020. Vol. 126, No. 2. P. 145.
20. Ahmmmed S., Aktar A., Rahman M.F., Hossain J., Ismail A.B.M. A numerical simulation of high efficiency CdS/CdTe based solar cells using NiO HTL and ZnO TCO. *Optik (Stuttg)*. 2020b. Vol.223. P.165625. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2020.165625>.
21. Romeo A. CdTe and CuInGaSe₂ Thin-Film Solar Cells. In *Solar Cells and Modules*. Springer, Cham. 2020. P. 197-217.

22. Yang X., Bao Z., Luo R., Liu B., Tang P., Li B., Zhang J., Li W., Wu L., Feng L. Preparation and characterization of pulsed laser deposited CdS/CdSe bi-layer films for CdTe solar cell application. *Materials Science in Semiconductor Processing*. 2016. Vol. 48. P. 27–32.
23. Shenouda A. Y., El Sayed M. Electrodeposition, characterization and photo electrochemical properties of CdSe and CdTe. *Ain Shams Engineering Journal*. 2015. Vol.6, №1. P.341-346. <https://doi.org/10.1016/j.asej.2014.07.010>.
24. K. L. Chopra, S. R. Das, *Thin Film Solar Cells* (Plenum Press, New York-London, 1983), 143-150.
25. C. M. Rouleau, D. H. Lowndes, *Appl. Surf. Sci.* 127-129, 418 (1998).
26. M. Ohishi, M. Yoneta, H. Saito, H. Sawanda, S. Mori, *J. Cryst. Growth* 184/185, 57 (1998).
27. H. Cachet, R. Cortes, M. Froment, A. Etcheberry, *Thin Solid Films* 361-362, 84 (2000).
28. Ilchuk, H., Petrus, R., Kashuba, A., Semkiv, I., & Zmiiovska, E. (2020). Optical-energy properties of CdSe thin film. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, 699(1), 1-8.
29. Luo, M., Leng, M., Liu, X., Chen, J., Chen, C., Qin, S., & Tang, J. (2014). Thermal evaporation and characterization of superstrate CdS/Sb₂Se₃ solar cells. *Applied Physics Letters*, 104(17), 173904.
30. Kosek F., Tulka J., Štourač L. Optical, photoelectric and electric properties of single-crystalline Sb₂Se₃. *Czechoslovak Journal of Physics B*. 1978. Vol.28, №3. P.325-330.
31. Zhang, J., Kondrotas, R., Lu, S., Wang, C., Chen, C., & Tang, J. (2019). Alternative back contacts for Sb₂Se₃ solar cells. *Solar Energy*, 182, 96-101.
32. Leng, M., Luo, M., Chen, C., Qin, S., Chen, J., Zhong, J., & Tang, J. (2014). Selenization of Sb₂Se₃ absorber layer: an efficient step to improve device performance of CdS/Sb₂Se₃ solar cells. *Applied Physics Letters*, 105(8), 083905.
33. Burgelman M., Verschraegen J., Degrave S., Nollet P. Modeling thin-film PV devices. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*. 2004. Vol. 12, № 2-3. P.143-153. (<https://doi.org/10.1002/pip.524>)
34. Verschraegen J., Burgelman M. Numerical modeling of intra-band tunneling for heterojunction solar cells in SCAPS. *Thin Solid Films*. 2007. Vol. 515, No. 15. P. 6276–6279
35. Degrave S., Burgelman M., Nollet P. Modelling of polycrystalline thin film solar cells: new features in scaps version 2.3. *Proc. Of 3rd World Conf. on Photovolt. Energy Convers.* 2003. Vol. 1. P. 487–490.
36. Khosroabadi S., Keshmiri S. H. Design of a high efficiency ultrathin CdS/CdTe solar cell using back surface field and backside distributed Bragg reflector. *Opt. Expr.* 2014. Vol. 22, No. 103. P. A921-A929.
37. Burgelman M., Nollet P., Degrave S. Modelling polycrystalline semiconductor solar cells. *Thin Solid Films*. 2000. Vol. 361. P. 527–532.
38. Dumitrache C., Olariu N., Lakatos E. St., Mantescu G., Olteanu L., Badea M. Some New Features of SCAPS 2902 Used for Optimisation of CdS-CdTe Thin-Film Photovoltaic Cell Structure. *Electrotehnica Electronica Automatica*. 2013. Vol. 61, No. 1. P. 25.
39. Ahmmed, S., Aktar, A., Hossain, J., Ismail, A.B.M., 2020a. Enhancing the open circuit voltage of the SnS based heterojunction solar cell using NiO HTL. *Sol. Energy* 207, 693–702. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2020.07.003>;
40. Kumar, S. Girish, Rao, K.S.R. Koteswara, 2014. Physics and chemistry of CdTe/CdS thin film heterojunction photovoltaic devices: Fundamental and critical aspects. *Energy Environ. Sci.* 7 (1), 45–102. <https://doi.org/10.1039/C3EE41981A>.
41. Anwar F, SarwarSatter S, Mahub R, Mahmud Ullah S, Afrin S. Simulation and Performance Study of Nanowire CdS/CdTe Solar Cell. *International journal of renewable energy research*. 2017; doi: 10.13140/RG.2.2.25657.98400.].
42. Derry GN, Kern ME, Worth EH. Recommended values of clean metal surface work functions. *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*. 2015; doi: 10.1116/1.4934685.