



DOI: 10.31388/2220-8674-2022-1-20

УДК 538.975:621.383.5

А. Ф. Дяденчук, к.т.н.,¹

ORCID 0000-0002-6625-9985

Є. В. Філіпович²,

ORCID 0000-0002-9633-7251

¹Таврійський державний агротехнологічний університет
імені Дмитра Моторного²Національний університет «Запорізька політехніка»

e-mail: dyadenchukalena@gmail.com, тел: 066-828-85-19

МОДЕЛЮВАННЯ ФУНКЦІОНАЛЬНИХ ХАРАКТЕРИСТИК СОНЯЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ НА ОСНОВІ ZnO І TiO₂

Анотація. У статті розглянуто одноперехідні конфігурації сонячних елементів, що являють собою гетероструктури з оксидними плівками ZnO і TiO₂ в якості електронного транспортного матеріалу та напівпровідникові підкладки Si, GaAs та CIGS в якості поглинального матеріалу. З використанням чисельного інструменту моделювання сонячних елементів програми wxAMPS отримано фотовольтаїчні параметри (фактор заповнення, напруга холостого ходу, щільність струму короткого замикання та ККД) гетеропереїдних фотоелектричних перетворювачів ZnO/Si, ZnO/GaAs, ZnO/CIGS, TiO₂/Si, TiO₂/GaAs, TiO₂/CIGS. Максимальне значення ефективності 24,84 % отримано при моделюванні параметрів структури ZnO/GaAs. Розраховано температурні залежності ККД досліджуваних фотоперетворювачів у межах температур 280-330 К. Встановлено, що зміна ефективності фотоперетворювачів на основі гетероструктур ZnO/Si і TiO₂/Si при зміні температури становить 3,31% і 3,43% відповідно, для інших розглянутих структур дана величина не перевищує 2,7 %.

Ключові слова: сонячний елемент, гетеропереїд, напівпровідники, комп'ютерне моделювання, wxAMPS.

Постановка проблеми. Сонячна енергетика відноситься до найбільш перспективних відновлювальних джерел енергії. Однак для максимального використання всіх можливостей даного джерела енергії необхідно розвивати технології фотовольтаїки, яка має великий потенціал. На сьогодні основною задачею фотовольтаїки є здешевлення електричної енергії, що виробляється сонячними елементами (СЕ). Для досягнення цієї мети необхідно підвищувати ефективність та знижувати вартість СЕ. Близько 85 % від загального



обсягу виробництва складають сонячні елементи на основі кремнію. Однак майже половину загальної вартості кремнієвого сонячного модуля складає вартість вихідних кремнієвих пластин, у зв'язку з чим виникає необхідність заміни монокристалічного кремнію або більш тонкими пластинами мультикристалічного Si, або іншими перспективними матеріалами.

Серед одноперехідних сонячних елементів виділяють кремнієві, на основі напівпровідникових з'єднань A₃B₅, A₂B₆, A₁B₃C₆ та змішані [1]. Фотоперетворювачі (ФП) на основі A₃B₅ (GaAs, GaAlAs, GaInAsP, InAs, InSb, InP та інші) володіють майже ідеальними характеристиками, а їх ККД може досягати 30 %. Для оптимізації параметрів сонячних елементів використовується широкий спектр напівпровідникових з'єднань A₃B₅ в різноманітних комбінаціях, але частіше за все знаходять застосування GaAs та InP. Як абсорбційний шар при виробництві фотоперетворювачів може бути використано напівпровідникове з'єднання CIGS (Cu(In,Ga)(Se,S)₂) [2], які на даний момент займають близько 2 % обсягу світового ринку тонкоплівкових сонячних елементів [3].

При виготовленні сонячних елементів в останні десятиліття, завдяки передбаченому високому значенню ефективності, застосовуються елементи на основі напівпровідникових оксидів металів (TiO₂, ZnO, CuO, Cu₂O, SnO₂ та інші). З одного боку, тонкі плівки оксидів широко використовуються як прозорі провідні електроди в сонячних елементах. З іншого ж боку, ці плівки представляють значний інтерес як фотоактивний шар ФП завдяки доброму узгодженню спектрів їх поглинання зі спектрами сонячного випромінювання. Вирізняються серед вищеперерахованих оксидів плівки оксиду цинку та діоксиду титану [4, 5]. Використання тонких плівок ZnO і TiO₂ при виготовленні фотоелементів на основі p-n-переходів може значно підвищити ефективність перетворення сонячної енергії за рахунок розширення діапазону в ультрафіолетову і фіолетову області спектру [6, 7].

Досить перспективним напрямом є дослідження одноперехідних фотоперетворювальних структур, в яких як електронний транспортний матеріал застосовуються оксидні плівки ZnO і TiO₂, а як поглинальний шар – підкладки кремнію Si, арсеніду галію GaAs або селеніду міді-індію-галію CIGS.

Аналіз останніх досліджень. Металооксидні напівпровідники ZnO і TiO₂ мають широку заборонену зону (~3 eV) і високі показники провідності, вони прозорі у видимому діапазоні оптичного спектру, не токсичні та мають невисоку вартість, що дозволяє використовувати їх при виробництві приладів фотовольтаїки [8-11]. На сьогодні багато наукових колективів працює над дослідженнями в області оптимізації



параметрів ФП на основі даних оксидів. При цьому в літературі повідомляється про моделювання значень ефективності для гетеропереходів ZnO/Si та TiO₂/Si в широких межах від 6 % до ~24 %.

Так в роботі [12] отримано ККД 17,16 % ($V_{oc}=675,8$ мВ, $I_{sc}=30.24$ мА/см² і FF=83,96 %) при використанні n-ZnO як електричного випромінювача на підкладці c-Si p-типу провідності, однак досліджувалися структури ZnO:B(n)/ZnO/c-Si(p). R. Pietruszka із співавторами підготували сонячні елементи на основі гетеропереходу атомний шар ZnO/p-Si, що демонструє ефективність 14 % [13]. Згідно імітації в програмі PC1D ефективність $\eta=24,8$ % сонячної енергії гетеропереходу ZnO/Si досягається при значеннях товщини бази 400 мкм, товщини випромінювача 20 мкм, концентрації носіїв заряду $1,1 \cdot 10^{17}$ см⁻³ та $5,1 \cdot 10^{16}$ см⁻³ в базі і випромінювачі відповідно [14]. Діоксид титану досить довгий час досліджувався як просвітлююча плівка для кремнієвих сонячних елементів [15]. Проте авторами праці [16] показано, що нанесення на m-Si нанорозмірного TiO₂ дозволяє значно покращити ефективність сонячних батарей з 17,18 % до 17,87 % при товщині шару TiO₂ 55,2 нм.

Таким чином, запропоновані конструкції сонячних комірок на основі ZnO/Si і TiO₂/Si можуть бути однією з кращих альтернатив звичайним кремнієвим сонячним елементам.

У випадку використання CIGS-підкладок ефективність в 17 % досягається при товщині шару ZnO 100 нм і значенні ширини забороненої зони 3,4 еВ [17]. Можливі маршрути для підвищення виробництва на рівні ефективності 20 % обговорюються в роботі [18]. У дослідженні [19] ефективність перетворення сонячної енергії досягає максимального значення 12,38 % при використанні оксиду індія-олова як віконного оксиду, діоксиду титану TiO₂ як буферного шару n-типу і матеріалу Cu(In,Ga)Se₂.

Дещо вищою є ефективність SE при використанні напівпровідникових з'єднань AlB5, і безпосередньо напівпровідника GaAs. Крім високого ККД, дані фотоперетворювачі характеризуються високою стабільністю параметрів та стійкістю до дії навколишнього середовища. Xin Jin та Naiyun Tang після оптимізації сонячних елементів ZnO/GaAs у програмі Silvaco Atlas повідомляють про ефективність перетворення енергії 22,84 % [20]. Трохи нижчим є значення ККД для сонячних елементів на основі структури TiO₂/GaAs [21]. Даний фотоелемент досягає підвищеної щільності струму короткого замикання $J_{sc}=24,82$ мА/см², що призводить до покращення ефективності до значення 19,66 %.

Однак аналіз наукових джерел свідчить, що питання дослідження даних структур все ще залишається відкритим і потребує детального

вивчення з метою подальшої оптимізації конструкцій і підбору максимально ефективних параметрів.

Формулювання мети статті. Метою дослідження є числове моделювання функціональних характеристик гетероперехідних сонячних елементів на основі плівок оксиду цинку та діоксиду титану, а також розрахунок температурних залежностей ККД.

Основна частина. Для апробації науково-технічних рішень в області оптимізації параметрів конструкцій фотоперетворювачів актуальними є задачі моделювання параметрів сонячних елементів з використанням програмного забезпечення. Для моделювання функціональних характеристик ФП можуть бути застосовані такі програми як AMPS-1D, SCAPS-1D, PC1D, AFORS-HET та інші [22-25]. Вільнорозповсюдженою, простою та ефективною при вивченні СЕ є програма wxAMPS (версія AMPS (Analysis of Microelectronic and Photonic Structures)). Даний програмний засіб дозволив змодельовати функціональні характеристики досліджуваних фотоелементів (рис. 1).

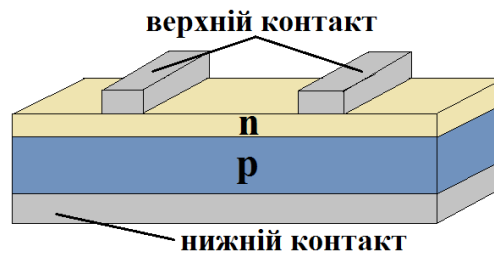


Рисунок 1. Схематичне зображення змодельованих фотоелементів

Значення для входних параметрів шарів, що використовувалися для моделювання ФП, обиралися літературних джерел і числових даних. Деякі з них наведено в таблиці 1.

Таблиця 1

Параметри шарів досліджуваних структур

Матеріал	Товщина шару d, мкм	Концентрація легуючої домішки N, см ⁻³	Ширина забороненої зони E _g , eВ	Діелектрична проникність матеріалу ε
ZnO	0,2	1,0·10 ¹⁸	3,30	9,0
TiO ₂		1,0·10 ¹⁷	2,26	10,0
Si	3,0	1,5·10 ¹⁶	1,12	11,9
GaAs		2,0·10 ¹⁷	1,42	10,9
CIGS		2,0·10 ¹⁶	1,15	13,6

Вимірювання параметрів СЕ було проведено при спектрі випромінювання, що відповідає АМ1.5 та інтегральній щільності потоку випромінювання 1000 Вт/м^2 [26]. Температура становила 300 К.

З wxAMPS 3.0 було отримано густину струму короткого замикання J_{SC} , напругу холостого ходу V_{OC} , коефіцієнт заповнення FF і коефіцієнт корисної дії η . Отримані значення занесено до таблиці 2. Вольт-амперні характеристики (ВАХ) досліджених структур представлено на рисунку 2.

Таблиця 2

Фотовольтаїчні параметри досліджуваних структур

Структура	Густина струму короткого замикання J_{SC} , мА/см^2	Напруга холостого ходу V_{OC} , мВ	Фактор заповнення FF, %	ККД η , %
ZnO/CIGS	29,31	0,64	79,54	14,92
ZnO/GaAs	30,07	0,95	86,65	24,84
ZnO/Si	30,66	0,51	79,29	12,29
TiO ₂ /CIGS	29,27	0,63	78,78	14,57
TiO ₂ /GaAs	30,20	0,95	85,37	24,39
TiO ₂ /Si	30,90	0,50	79,72	12,36

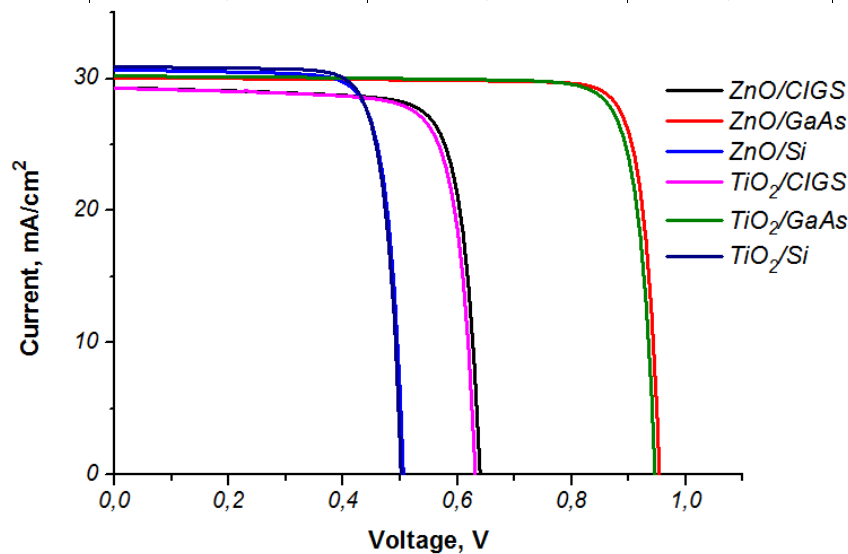


Рисунок 2. Вольт-амперні характеристики сонячних елементів на основі досліджуваних структур

Відповідно до отриманих даних, значення ККД для одного і того ж напівпровідника р-типу при використанні різних напівпровідників n-типу провідності відрізняються на 0,1-0,6 %. Максимальне значення ефективності (24,84 %) отримано при моделюванні параметрів структури ZnO/GaAs, що свідчить про перспективність подальшого вивчення даного гетеропереходу. Це ж спостерігається і в значеннях

фактору заповнення. ККД для сонячних елементів ZnO/Si, ZnO/CIGS, TiO₂/Si, TiO₂/CIGS відповідає значенням, які наведено в літературі.

Однією зі значних проблем експлуатації сонячних елементів в умовах безперервного і прямого падіння сонячного випромінювання є технічне рішення і засоби попередження їх перегріву. Тому доцільним є дослідження впливу температури на вигляд вольт-амперної характеристики сонячних елементів [27]. ВАХ сонячних елементів при різних значеннях температури вказані на рисунку 3, а, в, д і рисунку 3, б, г, ж для ZnO і TiO₂ відповідно. Діапазон температур становив 280-330 К.

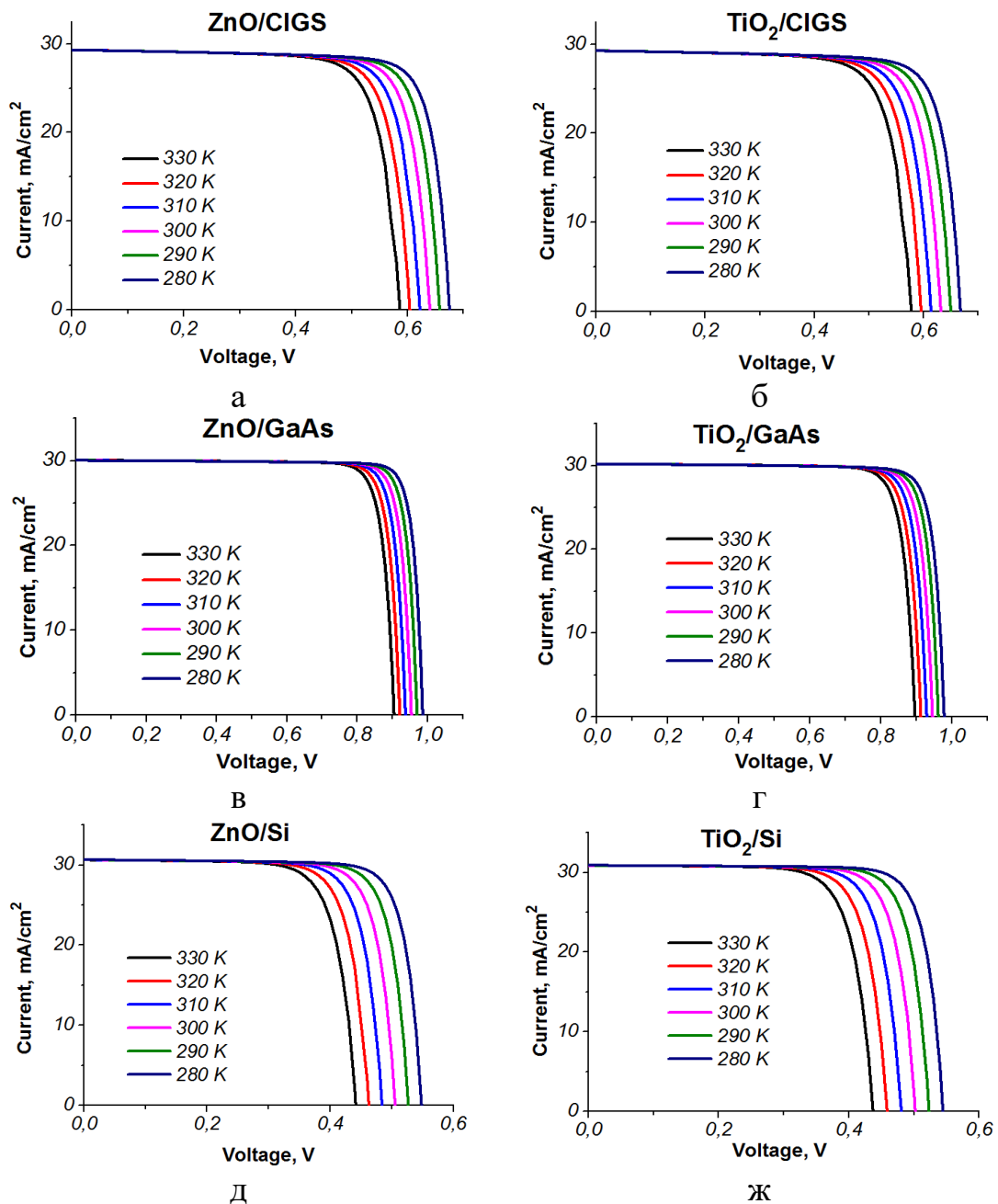


Рисунок 3. Вольт-амперні характеристики сонячних елементів на основі досліджуваних структур при різних значеннях температури

Отримані результати підтверджують, що температура впливає на струм і напругу сонячного елемента. Напруга фотоелементу спадає. Підвищення температури дещо збільшує струм СЕ, що пов'язано зі збудженням великої кількості електронно-діркових пар, проте ця зміна для обраного діапазону температур складає $\sim 0,02$ мА/см².

Зміна струму короткого замикання і напруги призводить до зміни коефіцієнта заповнення й ефективності сонячних елементів. Залежності ККД елементів від температури показано на рисунку 4.

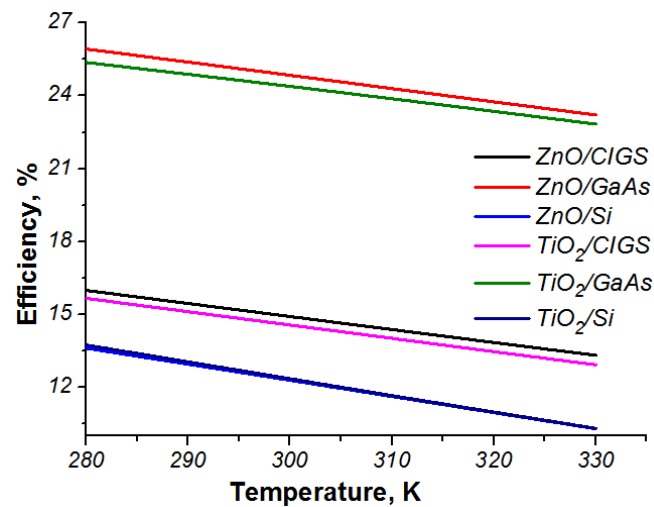


Рисунок 4. Залежність ефективності сонячних елементів від температури

Встановлено, що зміна ефективності фотоперетворювачів на основі гетероструктур ZnO/Si і TiO₂/Si при зміні температури становить 3,31% і 3,43% відповідно. Для решти розглянутих структур зміна ефективності не перевищує 2,7%.

Висновки. Таким чином, дослідження показують, що оксидні напівпровідники ZnO і TiO₂ є досить перспективними матеріалами фотовольтаїки, а виготовлені на їх основі одноперехідні сонячні елементи можуть бути однією з кращих альтернатив звичайним кремнієвим сонячним елементам. Отримані результати будуть використані на наступних етапах дослідження з оптимізації параметрів структур задля підвищення ефективності фотоперетворювачів та порівнянні отриманих під час моделювання експериментальних світлових характеристик фотоелементів із експериментальними характеристиками.

Список використаних джерел

1. Лобанов В. В., Терebinская М. И., Филоненко О. В., Ткачук О. И. Солнечные элементы на основе органических и органо-



неорганических материалов. *Поверхность*. 2019. Вып. 11(26). С. 270–343. DOI: 10.15407/Surface.2019.11.270

2. Bhuiyan M. A. M., Islam M. S., Datta A. J. Modeling, Simulation and Optimization of High Performance CIGS Solar Cell. *International Journal of Computer Applications*. 2012. Vol. 57, No.16. P. 26–30.

3. Хрипко С. Л., Кідалов В. В. Сонячні батареї створенні на основі низько-розмірних нанокмпозитних структур. *Журнал нано- та електронної фізики*. 2016. Т. 8, № 4(2). С. 04071-1-04071-10. DOI: 10.21272/jnep.8(4(2)).04071

4. Йулчиев Ш. Х., Бобоев А. Й., Махмудов Х. А. Свойства и применение металлооксидных тонких плёнок в преобразователях энергии. *Scientific Bulletin. Physical and Mathematical Research*. 2021. V. 3, Is. 1. P. 58–62. DOI: 621.315.592.3

5. Дяденчук А. Ф., Кідалов В. В. Гетероструктури n-ZnO:Al/porous-CdTe/p-CdTe в якості фотоелектричних перетворювачів. *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*. 2017. Т. 15, № 3. С. 487–494.

6. Kidalov V. V., Dyadenchuk A. F., Khrypko S. L., Khrypko O. S. Investigation the Structures ZnO:Al/SiOx/PorSi/p-Si/Al. *Physics and Chemistry of Solidstate*. 2017. V. 18, № 2. P. 180–183. DOI: 10.15330/pcss.18.2.180–183

7. Johansson W., Peralta A., Jonson B., Anand S., Osterlund L., Karlsson S. Transparent TiO₂ and ZnO thin films on glass for UV modules. *Frontiers in Materials*. 2019. V. 6. P. 259. DOI: 10/3389/fmats.2019.00259

8. Eman M. Nasir, Asmaa N. Mohammed Ali. Characterization of ZnO/GaAs heterojunction. *Iraqi Journal of Physics*. 2019. V. 17, No.43. P. 58-66. DOI: 10.20723/ijp.17.43.58–66

9. Richards B. S. Novel Uses of Titanium Dioxide for Silicon Solar Cells. A thesis submitted as partial fulfillment of the requirement for the Degree of Doctor of Philosophy. 2002. P. 255.

10. Ganesh I., Kumar P., Gupta A., Sekhar P., Radha K., Padmanabham G., Sundararajan G. Preparation and characterization of Fe-doped TiO₂ powders for solar light response and photocatalytic applications. *Processing and application of ceramics*. 2012. V. 17, No.43. P. 21–36. DOI: 10.2298/pac1201021g

11. Hussain B., Ebong A., Ferguson I. Zinc oxide as an active n-layer and antireflection coating for silicon based heterojunction solar cell. *Solar Energy Materials and Solar Cells*. 2015. V. 139. P. 95–100. DOI: 10.1016/j.solmat.2015.03.017

12. Chen L., Chen X., Liu Y., Zhao Y., Zhang X. Research on ZnO/Si heterojunction solar cells. *Journal of Semiconductors*. 2017. V. 38(5). P. 054005. DOI: 10.108/1674-4926/38/5/054005



13. Pietruszka R., Witkowski B. S., Zielony E., Gwozdz K., Placzek-Popko E., Godlewski M. ZnO/Si heterojunctional solar cell fabricated by atomic layer deposition and hydrothermal methods. *Solar Energy*. 2017. V. 155. P. 1282. DOI: 10.1016/j.solener.2017.07.071
14. Naim H., Shah D. K., Bouadi A., Siddiqui M. R., Akhtar M. S., Kim C. Y. An In-Depth Optimization of Thickness of Base and Emitter of ZnO/Si Heterojunction-Based Crystalline Silicon Solar Cell: A Simulation Method. *Journal of Electronic Materials*. 2022. V. 51. P. 586–593. DOI: 10.1007/s11664-021-09341-5
15. Natsuhara H., Matsumoto K., Yoshida N., Itoh T., Nonomura S., Fukawa M., Sato K. TiO₂ thin films as protective material for transparent-conducting oxides used in Si thin film solar cells. *Solar energy materials and solar cells*. 2006. V. 90(17). P. 2867–2880. DOI: 10.1016/j.solmat.2006.05.001
16. Sagar R., Rao A. Nanoscale TiO₂ and Ta₂O₅ as efficient antireflection coatings on commercial monocrystalline silicon solar cell. *Journal of Alloys and Compounds*. 2021. V. 862. P. 158464. DOI: 10.1016/j.jallcom.2020.158464
17. Husna J., Sibuea S. R., Sulaiman O. K., Rafiq Yanhar M., Suhardi N., Nasution A. H., Haramaini T., Nasution M. K., Ambri M., Ahmad Rifqi M. Z. The Prospects Of Zinc Oxide (ZnO) For Window Layer Cigs Solar Cells. In & N. Baba Rahim (Ed.). *Multidisciplinary Research as Agent of change for Industrial Revolution 4.0*. 2019. V. 81. P. 730–738. DOI: 10.15405/epsbs.2020.03.03.85
18. Miguel A. Contreras, Brian Egaas, Ramanathan K., Hiltner J., Swartzlander A., Hasoon F., Rommel Noufi. Progress toward 20% efficiency in Cu(In,Ga)Se₂ polycrystalline thin-film solar cells. *Progress in Photovoltaics*. 1999. V. 7, Is. 4. P. 311-316. DOI: 10.1002/(SICI)1099-159X(199907/08)7:4<311::AID-PIP274>3.0.CO;2-G
19. Chihi A., Boujmil M. F., Bessais B. Investigation on the Performance of CIGS/TiO₂ Heterojunction Using SCAPS Software for Highly Efficient Solar Cells. *Journal of Electronic Materials*. 2017. V. 46. P. 5270-5277. DOI: 10.1007/s11664-017-5547-0
20. Jin X., Tang N. ZnO as an anti-reflective layer for GaAs based heterojunction solar cell. *Materials Research Express*. 2021. V. 8. P. 016412. DOI: 10.1088/2053-1591/abde58
21. Leem J. W., Yu J. S., Jun D.-H., Heo J., Park W.-K. Efficiency improvement of III–V GaAs solar cells using biomimetic TiO₂ subwavelength structures with wide-angle and broadband antireflection properties. *Solar Energy Materials and Solar Cells*. 2014. V. 127. P. 43–49. DOI: 10.1016/j.solmat.2014.03.041
22. Froitzheim A., Stangl R., Elstner L., Kriegel M., Fuhs W. AFORS-HET: a computer-program for the simulation of heterojunction solar cells to



be distributed for public use. In *3rd World Conference on Photovoltaic Energy Conversion*. 2003. V. 1. P. 279–282.

23. Hussain B., Aslam A., Khan T. M., Creighton M., Zohuri B. Electron Affinity and Bandgap Optimization of Zinc Oxide for Improved Performance of ZnO/Si Heterojunction Solar Cell Using PC1D Simulations. *Electronics*. 2019. V. 8. P. 238. DOI: 10.3390/electronics8020238

24. Дяденчук А. Ф., Иванов В. С. Застосування комп'ютерних технологій при підготовці фахівців в галузі електроенергетики. *Наукові записки молодих учених*. 2021. № 8. URL: <https://phm.cuspu.edu.ua/ojs/index.php/SNYS/article/view/1883/pdf> (дата звернення 25.04.2022)

25. Sawicka-Chudy P., Sibiński M., Wisz G., Rybak-Wilusz E., Cholewa M. Numerical analysis and optimization of Cu₂O/TiO₂, CuO/TiO₂, heterojunction solar cells using SCAPS. In *Journal of Physics: Conference Series*. 2018. V. 1033, No.1. P. 012002. DOI: 10.1088/1742-6596/1033/1/012002

26. Gueymard C. A., Myers D., Emery K. Proposed reference irradiance spectra for solar energy systems testing. *Solar Energy*. 2002. V. 73(6). P. 443. DOI: 10.1016/S0038-092X(03)00005-7

27. Абдувохидов М. К., Гуломов Ж. Ж., Алиев Р., Зияитдинов Ж., Муйдинова М. Цифровое моделирование температурных свойств кремниевых солнечных элементов. *Fotoenergetikada nanostrukturali yarimo'tkazgich materiallar*. Xalqaro ilmiy anjumani. Toshkent, 2020. С. 108–110.

Стаття надійшла до редакції 29.03.2022 р.

A. Dyadenchuk¹, Ye. Filipovich²

¹**Dmytro Motornyi Tavria State Agrotechnological University**

²**National University «Zaporizhzhia polytechnic»**

MODELING THE FUNCTIONAL CHARACTERISTICS OF SOLAR CELLS BASED ON ZnO AND TiO₂

Summary

The article discusses single-junction configurations of solar cells. These cells are heterostructures with ZnO and TiO₂ oxide films as electronic transport material and semiconductor substrates Si, GaAs and CIGS as absorption material. Using the numeral tools, the modeling of the solar cells of the wxAMPS program obtained photovoltaic parameters (density short circuit current J_{SC} , open circuit voltage V_{OC} , fill factor FF and efficiency η) of heterojunction photoelectric converters ZnO/Si, ZnO/GaAs, ZnO/CIGS, TiO₂/Si, TiO₂/GaAs, TiO₂/CIGS. The values for the input parameters of the layers of heterostructures are taken from literary sources and numerical data. The measurement of the parameters of the solar cells was carried out during the radiation spectrum corresponding to AM1.5 and the integral density of the radiation flow of 1000 W/m². The



temperature was 300 K. The maximum performance value of 24.84 % was obtained for the ZnO/GaAs structure. The minimum efficiency (12.29 %) is obtained for the ZnO/Si structure. The temperature dependences of the efficiency of the studied photoconverters are calculated. The temperature range was 280-330 K. It was confirmed that the voltage of the photocell is inversely proportional to the temperature, but the current was directly proportional. Changing the short circuit current and open circuit voltage leads to a change in the filling coefficient and efficiency of solar cells. An increase in the current of the solar cell associated with the excitation of a large number of electron-free pairs for the selected temperature range is ~ 0.02 mA/cm². Changing the efficiency of photoconverters based on the ZnO/Si and TiO₂/Si heterostructures with a temperature change is 3.31 % and 3.43 %, respectively. For the remaining considered structures, the change in efficiency does not exceed 2.7 %.

Key words: solar cell, heterojunction, semiconductors, computer modeling, wxAMPS.