

Ж.Р. Запукхляк¹, Л.І. Никируй¹, В.М. Рубіш², Г. Віш³, В.В. Прокопів¹,
М.О. Галушак⁴, І.М. Ліщинський¹, Л.О. Катанова¹, Р.С. Яворський¹

SCAPS моделювання гетероструктури ZnO/CdS/CdTe/CuO для застосування у фотоелектричних перетворювачах

¹Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника, Івано-Франківськ, Україна,
zhanna.zapukhlyak@gmail.com

²Ужгородська лабораторія Інституту реєстрації інформації НАН України, Ужгород, Україна

³Жешувський університет, Жешув, Польща,

⁴Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу, Івано-Франківськ, Україна

У середовищі комп'ютерних симуляцій фотоелектричних комірок SCAPS (Solar Cell Capacitance Simulator) виконано комплексне моделювання оптичних та фотоелектричних властивостей комірки на основі гетероструктури ZnO/CdS/CdTe/CuO. Обґрунтовано вибір високорезистивного прозорого (HRT) оксидного матеріалу - для використання у якості фронтального контакту. Досліджено вплив товщини плівки на ефективність кінцевої комірки. Ефективність розглядуваної фотоелектричної комірки склала 20,94%. Структуру фотоелектричної комірки обирали, виходячи із аналізу властивостей окремих шарів із товщиною. При цьому, додаючи кожен наступний шар, переглядалися властивості гетеросистеми. Таким чином, підібрано оптимальні товщини фотоелектричної гетеросистеми, які дозволяють отримати максимальну ефективність. Моделювання базувалося на основі експериментальних даних (товщина, оптичні характеристики, ширина забороненої зони) для кожної із півкових систем, отриманих методом фізичного осадження у вакуумі (PVD).

Ключові слова: тонкі плівки, фотоелектрика, телурид кадмію, гетероструктура ZnO/CdS/CdTe/CuO, сонячні елементи, моделювання SCAPS.

Подано до редакції 23.09.2020; прийнято до друку 15.12.2020.

Вступ

На початку XXI століття частка кремнієвих батарей становила понад 99,8%, а за останні 20 років вона зменшилася на 22,8% і продовжує стрімко зменшуватися. Натомість з'явилися фотоелектричні перетворювачі II-го покоління, що базуються на тонкоплівкових технологіях, які продемонстрували конкурентоспроможність поряд із кремнієвими аналогами. Тонкоплівкові сонячні панелі мають меншу вагу ~ на 20-25%, підвищену ефективність та набагато кращу функціональність.

Найбільш перспективними матеріалами, на основі яких можна отримати високоефективні

тонкоплівкові фотоелементи, є сполуки на основі напівпровідників II-VI, зокрема, CdTe, CdS [1-3].

Сонячні елементи на основі CdTe є одними із найбільш перспективних представників для перетворення фотоелектричної енергії [4,5], які можуть досягти максимального значення можливої теоретичної ефективності до 28% -30% [6] (рис. 1). Для підвищення ефективності тонкоплівкових фотоелектричних систем на основі вищезазначених матеріалів створюють гетероструктури [7], де CdTe є активною частиною сонячної батареї, у якій відбувається найбільша генерація та накопичення носіїв. А CdS є дуже добрим поглиначем сонячного спектру [8,9]. Однак, слід зазначити, що світло, поглинуте цим шаром, частково «втрачається», оскільки носії, генеровані в CdS, не акумулюються.

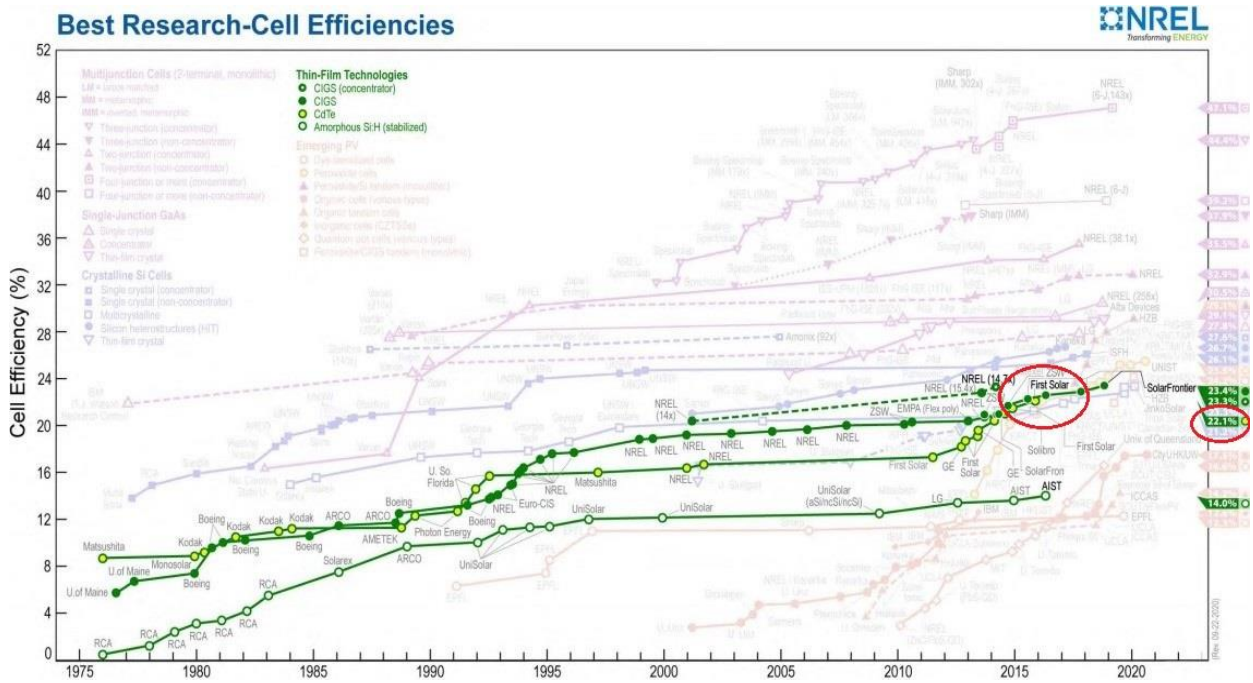


Рис. 1. Звіт NREL: Діаграма найкращих досліджень ефективності сонячних комірок [5].

Рекордна ефективність 12,8% [10], що була отримана у 2011 році для лабораторних зразків тонкоплівкових сонячних елементів CdTe на скляних підкладках різко покращилась до 18,3% [11] у 2020 році, а для наземних сонячних елементів CdTe значення ефективності становлять 16,7% і 21,0% відповідно. Нещодавнє швидке збільшення ефективності сонячних комірок обумовлене посиленням струму короткого замикання (Jsc) в короткохвильових областях [12]. Компанія First Solar, (США) яка є найбільшим у світі виробником сонячних панелей сьогодні має найкращі промислові технології для виробництва сонячних комірок на основі CdTe на скляних підкладках [5].

Раніше повідомлялось про різноманітні дані щодо приладового моделювання сонячних елементів CdTe за допомогою програми SCAPS [13-15], в яких обговорювалось, як деякі параметри матеріалу впливають на характеристики тонкоплівкових сонячних елементів CdTe [16].

Автори цієї статті розробили просту, дешеву та відтворювану технологію отримання тонкоплівкових гетероструктур CdS/CdTe із заданою морфологією поверхні під час відкритого випаровування у вакуумі, що дозволяє отримати однорідність базового шару для кращого поглинання сонячного випромінювання та сприяє низькій вартості кінцевих структур [17, 18]. Для гетероструктури CdS/CdTe на скляній підкладці було отримано ефективність 15,8% [19].

Беручи до уваги, що тонкі плівки є відносно новими системами, їх дослідження може дати набагато ширші можливості для технологічного вдосконалення фотоелектричних перетворювачів енергії. Тому в цій роботі проведено чисельне моделювання гетероперехідних тонкоплівкових сонячних елементів на основі CdTe з багатшаровою структурою на скляних підкладках.

Відповідно до літературних джерел [20], виконано аналіз впливу прозорого провідного шару ZnO на ефективність кінцевої гетероструктури. Також, при моделюванні в середовищі SCAPS зроблена спроба підвищити ефективність структури ZnO/CdS/CdTe шляхом введення шару CuO, як заднього контакту, з метою обґрунтувати оптимальну товщину окремих шарів.

I. Експеримент та моделювання

Аналізувати певні вимірювання без побудови точної моделі практично неможливо, саме тому використання засобів комп'ютерного моделювання має ряд переваг.

Чисельне моделювання являє великий інтерес для розуміння впливу різних фізичних параметрів на ефективність фотоелектричних комірок, мінімізує витрати на виготовлення прототипів, дає можливість проектувати різні сонячні елементи на основі кристалічних, полікристалічних та аморфних матеріалів [21-22], а також дає можливість вивчати вплив кожного окремого шару комірки у випадку взаємозалежних параметрів.

Тому в даному дослідженні використано інструмент комп'ютерного моделювання SCAPS для чисельного аналізу характеристик розроблених тонкоплівкових гетероструктур.

SCAPS-1D - це графічна програма для моделювання сонячних елементів, розроблена на кафедрі електроніки та інформаційних систем (ELIS) Гентського університету в Бельгії професором Марком. Бургельманом разом із LabWindows/CVI of National Instruments [23]. Опис програми та алгоритми, які вона використовує, наведені в [24-28].

1.1. Електрична модель

SCAPS-1D – інтерактивна прикладна програма для Windows, написана в кодї С, В основному вона використовується для моделювання тонкоплівкових сонячних елементів на основі CdTe, CIS та CIGS і дає змогу розв'язувати одновимірні напівпровідникові рівняння, такі як:

а) *рівняння струму – густини* (які також називаються конститутивними рівняннями [29]): провідність струму містить дві складові, а саме дрейф-складову та дифузійну складову. Дрейф-компонента обумовлена електричним полем, а дифузійна – градієнтом носія-концентрації. Це наступні рівняння записані у вигляді:

$$J_n = q\mu_n n \varepsilon + qD_n \frac{dn}{dx} = q\mu_n \left(n \varepsilon + \frac{kT}{q} \frac{dn}{dx} \right) = \mu_n n \frac{dE_{Fn}}{dx} \quad (1)$$

$$J_p = q\mu_p p \varepsilon + qD_p \frac{dp}{dx} = q\mu_p \left(p \varepsilon + \frac{kT}{q} \frac{dp}{dx} \right) = \mu_p p \frac{dE_{Fp}}{dx} \quad (2)$$

де, ε – діелектрична проникність, μ_n, μ_p – рухливість електронів і дірок відповідно; J_n, J_p – густина струму електронів і дірок відповідно; D_n, D_p – коефіцієнт дифузії електронів і дірок, відповідно; E_{Fn}, E_{Fp} – квазірівень Фермі електронів і дірок, відповідно.

б) *рівняння неперервності*: у напівпровіднику існують різні механізми транспорту носіїв, тому рівняння неперервності враховує залежні від часу явища, такі як генерація, рекомбінація та інжекція низького рівня. Ефект дрейфу, дифузії, непрямой чи прямої теплової генерації чи рекомбінації призводить до зміни концентрації носіїв з часом. Чиста зміна концентрації носіїв – це різниця між генерацією та рекомбінацією, і доданий чистий струм, що протікає в зазначеній області та поза нею. Тобто, рівняння неперервності в основному є рівнянням збереження носіїв струму:

$$-\frac{\partial J_n}{\partial x} - U_n + G = \frac{\partial n}{\partial t} \quad (3)$$

$$-\frac{\partial J_p}{\partial x} - U_p + G = \frac{\partial p}{\partial t} \quad (4)$$

де, G – швидкість генерації, U_n, U_p , – поточна швидкість рекомбінації / генерації носіїв.

в) *рівняння Пуассона*: дає вихідну точку для отримання якісного розв'язку для електростатичних змінних у напівпровіднику. Воно, в основному, стосується розподілу електричного поля всередині приладу. Таке моделювання можна розглядати, як незалежний від часу аналіз, тому основне рівняння можна записати:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon_0 \varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = -q(p - n + N_D - N_A) \quad (5)$$

де ε – діелектрична проникність, q – елементарний заряд, $q(p - n + N_D - N_A) = \rho$ (густина заряду), вважаючи легуючі домішки повністю іонізованими; N_D, N_A – концентрація домішок донора та акцептора, відповідно. Разом із відповідними граничними умовами на інтерфейсах та контактах це призводить

до створення системи сполучених диференціальних рівнянь (ψ, n, p) або (ψ, E_{Fn}, E_{Fp}) .

Для рекомбінації на інтерфейсі SCAPS-1D використовує модель Rauwells Vanhoutte [24], що розглядає чотири смуги для станів інтерфейсу, тобто смуги провідності та валентності обох напівпровідників на інтерфейсі.

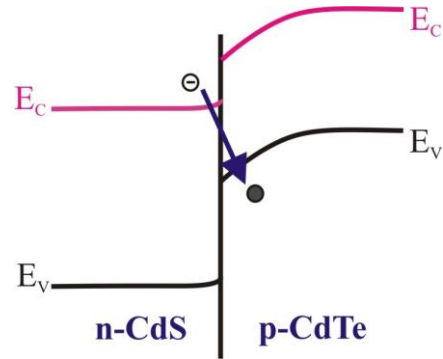


Рис. 2. Модель гетеропереходу CdS/CdTe [24].

Ця теорія розглядає рекомбінацію електронів одного напівпровідника з дірками іншого напівпровідника разом зі стандартною рекомбінацією електрон-дірка всередині одного і того ж напівпровідника (рис. 2). Тут найважливіший шлях рекомбінації – це рекомбінація «віконних електронів» з «поглинальними» дірками. Сумарний заряд в станах інтерфейсу дорівнює розриву діелектричного переміщення на інтерфейсі.

В SCAPS-1D передбачено, що квазірівні Фермі електронів і дірок перериваються на інтерфейсі, коли струм протікає через інтерфейс. Це враховується, включивши один додатковий вузол на інтерфейсі в числовий алгоритм. Електростатичний потенціал передбачається неперервним на інтерфейсах.

1.2. Оптична модель

Оптична характеристика тонких плівок дає інформацію про фізичні властивості, наприклад, ширину забороненої зони та оптично активні дефекти, тощо. Для ідентифікації тонких плівок CdTe, CdS та ZnO здійснюється спектральний розподіл оптичної прозорості [17]. У спектрах пропускання спостерігалась область основного поглинання. Спектри пропускання тонких плівок, отриманих на скляних підкладках різної товщини, виміряні в діапазоні довжин хвиль (180 – 1500) нм та (180 – 3200) нм показано на рис. 3,а.

На рис. 3,б наведено графіки $(\alpha h\nu)^2$ від $h\nu$, отриманих за формулою Таука [17]. Ширина забороненої зони оцінюється шляхом екстраполяції від перетину лінійної частини при $\alpha = 0$. Оптична ширина забороненої зони тонких плівок CdTe становила $\sim 1,48$ eV. Спектральна залежність поглинання для плівок CdS на графіку Таука показує наявність фундаментальної межі поглинання ($E_g = 2,38$ eV).

Що стосується тонких плівок ZnO, край поглинання має місце близько 350 нм для всіх зразків. Можна зауважити, що плівки демонструють

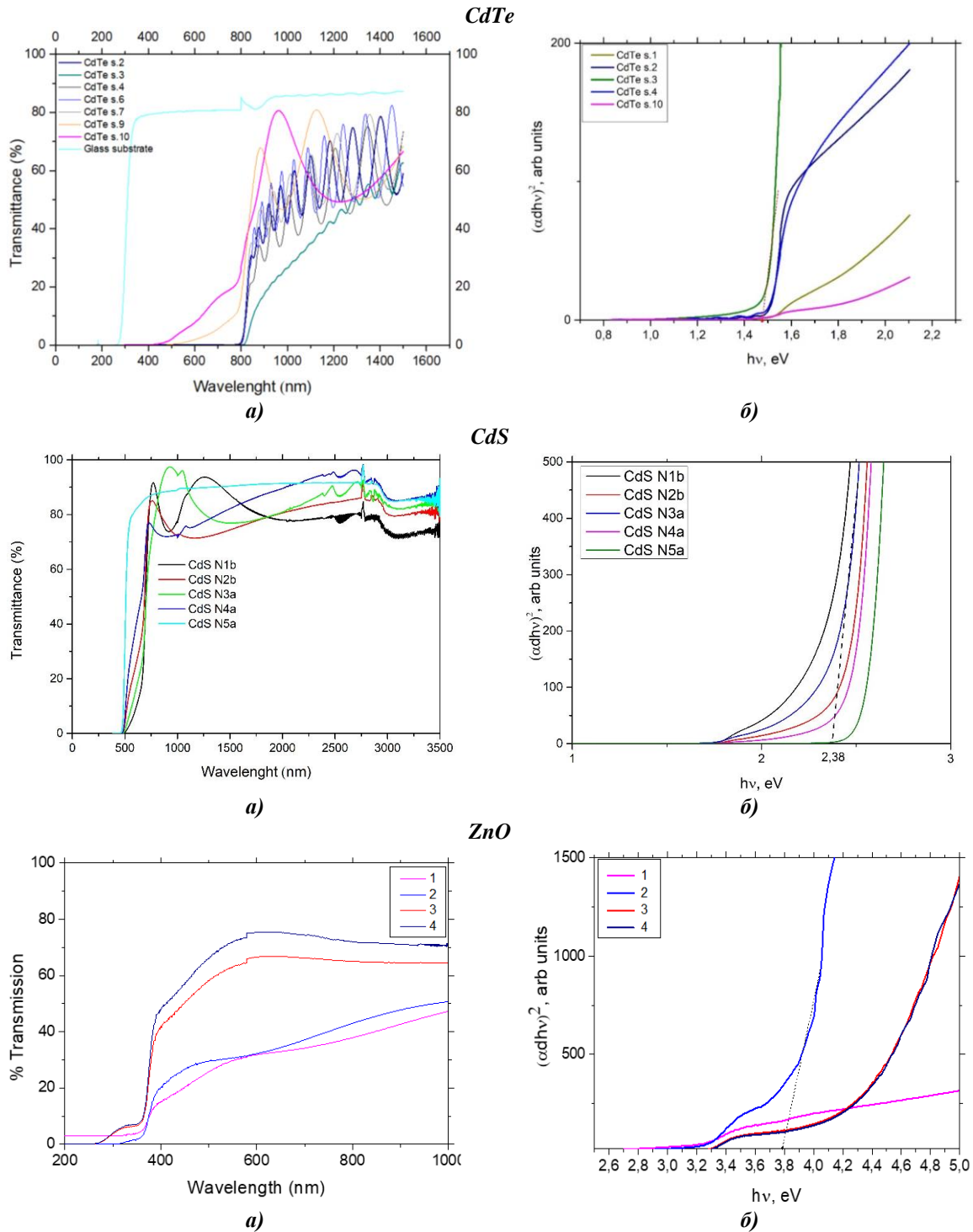


Рис. 3. Оптичне пропускання (а) і ширина забороненої зони (б) тонких плівок (CdTe, CdS, ZnO)/скло.

прозорість у видимому діапазоні середнього пропускання, який лежить між 30% і 70%. Збільшення ширини забороненої зони зі збільшенням температури підкладки пояснюється, як зсув електронної густини Бурштайна.

Ширина забороненої зони плівок ZnO становить ~ 3,8 еВ. Використовуючи отримані експериментальні дані ширини забороненої зони кожного шару при конкретній товщині плівки, проведено моделювання фотоелектричної комірки в середовищі SCAPS при освітленості сонячним

спектром з падаючою потужністю випромінювання $P = 1000 \text{ Вт/м}^2$ при температурі 300 К.

1.3. Моделювання

У цій частині роботи здійснювалася перевірка, як введення кожного нового шару впливає на ефективність кінцевої комірки. При цьому користувалися наступним принципом: кожен наступний шар гетероструктури додавали, не змінюючи найкращого значення, яке отримано для товщини попереднього шару.

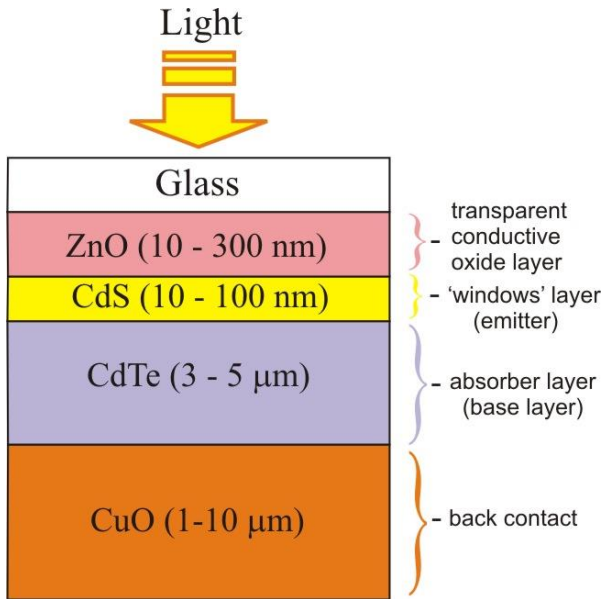


Рис. 4. Будова сонячного елемента на основі CdTe для кінцевого моделювання готових пристроїв.

Таблиця 1

Параметри матеріалів використані для моделювання у середовищі SCAPS [19, 20, 30-36].

Параметр	Значення			
	CuO	CdTe	CdS	ZnO
Товщина, мкм	1,0-10,0	3,0-5,0	0,01-0,1	0,01-0,3
Ширина забороненої зони, еВ (експ.)	1,51	1,45	2,4	3,3
Спорідненість до електрона, еВ	4,07	3,9	4,0	4,6
Діелектрична проникність (відн.)	18,1	9,4	10,0	9,0
Ефективна густина станів зони провідності, см^{-3}	$2,2 \cdot 10^{19}$	$8,0 \cdot 10^{17}$	$2,2 \cdot 10^{18}$	$2,2 \cdot 10^{18}$
Ефективна густина станів валентної зони, см^{-3}	$5,5 \cdot 10^{20}$	$1,8 \cdot 10^{19}$	$1,8 \cdot 10^{19}$	$1,8 \cdot 10^{19}$
Рухливість електронів, $\text{см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$	$1,0 \cdot 10^2$	$3,2 \cdot 10^2$	$1,0 \cdot 10^2$	$1,0 \cdot 10^2$
Рухливість дірок, $\text{см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$	0,1	40	25	25
Теплова швидкість електронів (см/с)	$1,0 \cdot 10^7$	$1,0 \cdot 10^7$	$1,0 \cdot 10^7$	$1,0 \cdot 10^7$
Теплова швидкість дірок (см/с)	$1,0 \cdot 10^7$	$1,0 \cdot 10^7$	$1,0 \cdot 10^7$	$1,0 \cdot 10^7$
$N_D, \text{см}^{-3}$		0	$1,1 \cdot 10^{18}$	$1,1 \cdot 10^{18}$
$N_A, \text{см}^{-3}$	$1,0 \cdot 10^{16}$	$2,0 \cdot 10^{14}$	0	0

Структура пристрою сонячного елемента на основі CdTe, яка використовувалась в кінцевому

моделюванні, складалася із шару ZnO (TCO), «віконного» шару CdS, шару поглинача CdTe та нижнього контакту CuO, зображена на рис. 4. Така модель – це спрощення структури фактичної комірки. Властивості матеріалу для кожного шару наведено у табл. 1.

Для проведення моделювання більшість вхідних параметрів брали на основі відомих літературних значень [19, 20, 30-36] або обчислені експериментально і показані в таблиці 1.

Основний екран, який з'являється після запуску програми, показано на рис. 5. Інформаційна панель містить ряд операцій, і користувач може отримати результати моделювання у вигляді наступних характеристик: I-V, C-V, C-f, Q(λ), електричне поле, зонні діаграми, густина розподілу носіїв, струми часткової рекомбінації. У програмному середовищі SCAPS встановлюють параметри матеріалів та вихідну робочу точку: температуру, напругу, частоту та освітленість.



Рис.5. Інформаційна панель запуску SCAPS.

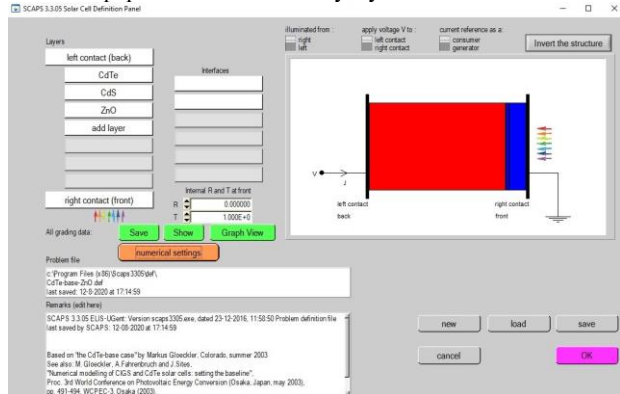


Рис. 6. Панель визначення структури сонячної комірки.

Рис. 6 демонструє панель для визначення структури сонячних елементів, де задають конкретні параметри для кожного шару. В програмі можна додавати у структуру пристрою до семи шарів,

У даному контексті, для характеристики тонкоплівкових гетероструктур була використана залежність J-V. Це найпоширеніший інструмент для характеристики сонячних елементів. На додаток до змодельованих кривих J-V, SCAPS одночасно показує таблицю значень, серед яких можна знайти і значення ефективності, при різних товщинах змінного шару, тоді як товщина інших шарів

залишається фіксованою. Зокрема, ефективність η отримана згідно рівняння:

$$\eta = \frac{I_{sc} \cdot V_{oc} \cdot FF}{P_{in}} \quad (6)$$

Ефективність перетворення сонячного випромінювання в фотоелектричну енергію визначається через ширину забороненої зони досліджуваної гетероструктури. Програма SCAPS дозволяє побудувати відповідні зонні діаграми.

II. Результати та обговорення

На рис. 7 наведено результати моделювання для гетероструктури CdS/CdTe. Оптимальна товщина шару CdTe складала 3 мкм і залишалась незмінною впродовж зміни параметрів моделювання, тоді як товщину шару CdS змінювали в діапазоні 10-100 нм. Отримано значення ефективності 15,87% (з врахуванням дефектів структури) і 18,08% (бездефектна структура), що добре узгоджується з [18].

У [18] досліджено вплив технологічних факторів осадження методом PVD на оптичні характеристики плівок. Крім того, для системи CdTe/CdS було визначено оптимальні товщини для досягнення максимальної ефективності такої гетеросистеми у якості фотоелектричної комірки. Відповідно, структура комірки типу CdTe/CdS була взята за базу. Далі поступово до обраної моделі додавали ZnO (TCO) шар та задній контактний шар.

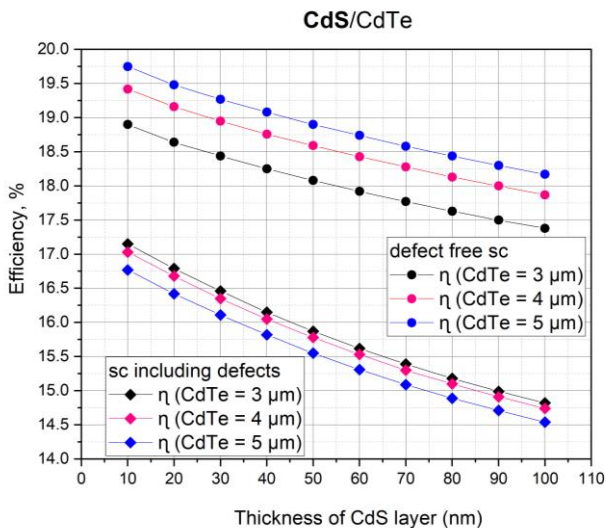


Рис. 7. Зміна величини ефективності η для гетеропереходу CdS/CdTe як функції товщини віконного шару CdS ($d_{CdS} = 10-100$ нм).

Наступним кроком було введення провідного шару ZnO та перевірка покращеної ефективності нової гетероструктури.

Виконано моделювання для гетероструктури ZnO/CdS/CdTe, де товщини шарів CdTe та CdS були незмінними та встановлені, відповідно, 3 мкм та 50 нм, тоді як товщина шару ZnO варіювалась в діапазоні 10-300 нм. Результати моделювання

наведено на рис. 8, де визначено найкращі значення ефективності такої системи: 15,15% та 18,68% (з та без дефектів, відповідно).

Більшою мірою, ефективність кінцевої структури ZnO/CdS/CdTe залежить від добре підібраних між собою товщин шарів CdS та CdTe.

Використання високоопірного провідного шару (high-resistive transparent HRT) між TCO та віконним шаром CdS підвищує ефективність, обмеживши ефект нерівномірності [35]. Серед матеріалів, що також використовуються, як шар HRT, часто зустрічаються також нелегований оксид олова (i-SnO₂) або оксид цинку (i-ZnO). У 80-х роках були цікаві дослідження щодо шару заднього контакту (back surface field (BSF)) та його впливу на ефективність сонячних елементів [37].

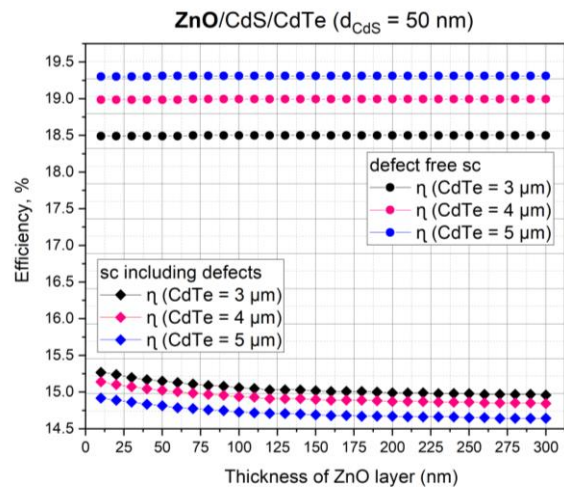


Рис. 8. Зміна величини ефективності η для гетеропереходу ZnO/CdS/CdTe як функції товщини шару прозорого провідного оксиду ZnO ($d_{ZnO}=10-300$ нм).

Велика ширина забороненої зони матеріалу використовується як бар'єр для відштовхування носіїв при гетеропереході CdTe/BSF для мінімізації втрат носіїв на зворотному контакті. Більше того, це понижує рекомбінацію носіїв на зворотному контакті і, тим самим, покращує ефективність комірки. У цьому ж контексті дослідження показали, що використання шару дірково-транспортно-електронного блокування (HT-EBL) відіграє ту ж роль, що і шар (BSF). Це також сприяє підвищенню ефективності сонячного елемента. Перспективним матеріалом, що використовується як шар HT-EBL у сонячних елементах CdTe, є оксид купруму (Cu₂O і CuO), що має велику заборонену зону у діапазоні (2,1 – 2,61) eV та ~1,51 eV і провідність р-типу [38,39]. CuO і Cu₂O характеризуються як нетоксичні матеріали, які легкодоступні, недорогі і мають високий коефіцієнт поглинання у видимому діапазоні [40]. J. Türck та ін. провели експериментальні дослідження та отримали добрі результати для р-і-п CdTe сонячного елемента, використовуючи оксид міді як зворотний контакт з ефективністю перетворення 15,21% [41]. Ці результати свідчать про те, що матеріали CuO і Cu₂O може бути використані

для підвищення ефективності сонячних елементів CdTe.

Наступним матеріалом використовувався оксид міді CuO із шириною забороненої зони $\sim 1,51$ еВ. Товщина заднього контакту варіювалась.

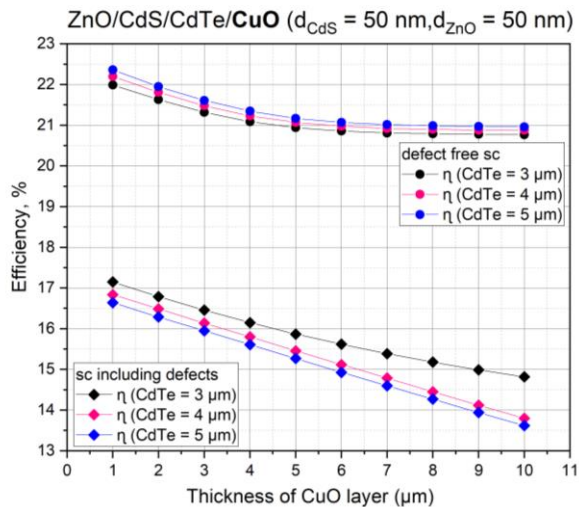


Рис. 9. Зміна величини ефективності η для гетеропереходу ZnO/CdS/CdTe/CuO як функції товщини контактної шару CuO ($d_{CuO}=1-10 \mu m$).

Встановлено, що матеріал заднього контакту впливає на ефективність кінцевої комірки, а дослідження матеріалу Cu₂O як матеріалу заднього контакту показало, що даний матеріал несуттєво підвищує ефективність кінцевої комірки через різницю енергій забороненої зони на переході між шарами CdTe/Cu₂O [39]. Відповідно, було прийнято рішення про нанесення шару CuO.

Результати моделювання гетероструктури ZnO/CdS/CdTe/CuO наведено на рис. 9. Товщини шарів CdTe, CdS та ZnO встановлені 3 мкм, 50 нм та 50 нм відповідно, тоді як товщину контактної шару CuO змінювали в межах 1-10 мкм з кроком 1 мкм.

Найвищі значення ефективності були зафіксовані при застосуванні матеріалу CuO із товщиною заднього контакту 5 мкм та становили $\sim 20,94$ %.

Висновки

1. Проведено чисельне моделювання ефективності фотоелектричної комірки із варіюванням товщини окремих шарів, використовуючи програмне забезпечення SCAPS з метою аналізу властивостей напівпровідників, що впливають на ефективність сонячних елементів на основі CdTe.

2. Отримано значення фотоелектричної ефективності для гетероструктурних тонкоплівкових сонячних елементів ZnO/CdS/CdTe та ZnO/CdS/CdTe/CuO 19,22% та 20,94%, відповідно. Для такої гетероструктури оптимальні товщини шарів склали 3 мкм, 50 нм, 50 нм та 5 мкм, відповідно.

3. Серед властивостей тонких плівок результати моделювання дозволили зробити припущення, що товщина віконного шару та шару поглиначи більш суттєво впливають на значення густини струму короткого замикання та ефективність сонячних елементів на основі CdTe.

Запхляк Ж.Р. – аспірантка кафедри фізики і хімії твердого тіла;

Никируй Л.І. – к.ф.-м.н., проф. кафедри фізики і хімії твердого тіла;

Рубіш В.М. – д.ф.-м.н., професор, завідувач Ужгородської лабораторії матеріалів оптоелектроніки та фотоніки;

Віш Г. – Ph.D., професор кафедри експериментальної фізики;

Прокопів В.В. – к.ф.-м.н., професор, завідувач кафедри фізики і хімії твердого тіла;

Галушак М.О. – д.ф.-м.н., професор, завідувач кафедри фізики;

Ліщинський І.М. – к.ф.-м.н., доц., завідувач кафедри фізики і методики викладання;

Катанова Л.О. – студентка фізико-технічного факультету;

Яворський Р.С. – доктор філософії, науковий співробітник кафедри фізики і хімії твердого тіла.

- [1] B.K. Ghosh, I. Saad, K.T.K. Teo, and S.K. Ghosh, *Optik* 206, 164278 (2020) (<https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2020.164278>).
- [2] G. Wisz, L.I. Nykyruy, V.M. Yakubiv, I.I. Hryhoruk, R.S. Yavorskyi, *International Journal of Renewable Energy Research* 8(4), 2367 (2018).
- [3] R.Y. Petrus, H.A. Ilchuk, A.I. Kashuba, et al., *Journal of Applied Spectroscopy* 87(1), 35 (2020) (<https://doi.org/10.1007/s10812-020-00959-7>).
- [4] J.M. Kephart, R.M. Geisthardt et al., *Prog. Photovolt: Res. Appl.* 23, 1484 (2015) (<https://doi.org/10.1002/ppp.2578>).
- [5] Web-source: <https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html>.
- [6] S. Marjani, S. Khosroabadi, and M. Sabaghi, *Optics & Photonics Journal* 6(2), 15 (2016) (<http://dx.doi.org/10.4236/opj.2016.62003>).
- [7] S.G. Kumar, K.K. Rao, *Energy & Environmental Science* 7(1), 45 (2014) (<https://doi.org/10.1039/C3EE41981A>).
- [8] E. Colegrove, R. Banai, C. Blissett, C. Buurma, J. Ellsworth, *Journal of Electronic Materials* 41, 2833 (2012) (<https://doi.org/10.1007/s11664-012-2100-z>).
- [9] A.B. Danylov, H.A. Ilchuk, R.Yu. Petrus, *Acta Physica Polonica A* 133(4), 981 (2018).

- [10] M.A. Green, K. Emery, Y. Hishikawa, W. Warta, *Progress in photovoltaics* 19(1), 84 (2011) (<https://doi.org/10.1002/pip.1088>).
- [11] M.A. Green, E.D. Dunlop, J. Hohl-Ebinger, M. Yoshita, N. Kopidakis, X. Hao, *Progress in Photovoltaics: Research and Applications* 28(7), 629 (2020) (<https://doi.org/10.1002/pip.3303>).
- [12] R. Naba, Paudela, Y. F. Yan, *Applied Physics Letters* 105, 183510 (2014) (<https://doi.org/10.1063/1.4901532>).
- [13] F. Anwar, S. Afrin, S.S. Satter, R. Mahbub, S.M. Ulah, *Journal of Renewable Energy Research* 7(2), 885 (2017).
- [14] A. Haddout, A. Raidou, M. Fahoume, *Optoelectronics Letters* 14, 98 (2018) (<https://doi.org/10.1007/s11801-018-7229-4>).
- [15] S.M. Seck, E.N. Ndiaye, M. Fall, S. Charvet, *Natural Resources* 11(4), 147 (2020) (<https://doi.org/10.4236/nr.2020.114009>).
- [16] O. Shoewu, G. Anuforonini, O. Duduyemi, *Review of Information Engineering & Applications* 3(1), 1 (2016) (<https://doi.org/10.18488/journal.79/2016.3.1/79.1.1.10>).
- [17] R. Yavorskyi, et al., *Applied Nanoscience* 9(5), 715 (2019) (<https://doi.org/10.1007/s13204-018-0872-z>).
- [18] R. Yavorskyi, *Physics and Chemistry of Solid State* 21(2), 243 (2020) (<https://doi.org/10.15330/pcss.21.2.243-253>).
- [19] L.I. Nykyruy, R.S. Yavorskyi, Z.R. Zapukhlyak, 666 sz, and P. Potera, *Optical Materials* 92, 319 (2019) (<https://doi.org/10.1016/j.optmat.2019.04.029>).
- [20] L. Nykyrui, Y. Saliy, R. Yavorskyi, Y. Yavorskyi, V. Schenderovsky, G. Wisz, & S. Górný, CdTe vapor phase condensates on (100) Si and glass for solar cells. In 2017 IEEE 7th International Conference Nanomaterials: Application & Properties (NAP) 01PCSI26-1, IEEE (2017) (<https://doi.org/10.1109/NAP.2017.8190161>).
- [21] A. Morales-Acevedo, N. Hernández-Como, G. Casados-Cruz, *Mater. Sci. Eng. B* 177(16), 1430 (2012) (<https://doi.org/10.1016/j.mseb.2012.01.010>).
- [22] D. Wang, H. Cui, G. Su, *Sol. Energy* 120, 505 (2015) (<https://doi.org/10.1016/j.solener.2015.07.051>).
- [23] M. Burgelman, J. Verschraegen, S. Degrave, P. Nollet, *Prog. Photovoltaics Res. Appl.* 12(2-3), 143 (2004) (<https://doi.org/10.1002/pip.524>).
- [24] M. Burgelman, P. Nollet, S. Degrave, *Thin Solid Films* 361, 527 (2000) ([https://doi.org/10.1016/S0040-6090\(99\)00825-1](https://doi.org/10.1016/S0040-6090(99)00825-1)).
- [25] M. Burgelman, J. Marlein, Analysis of graded band gap solar cells with SCAPS, Proc. Of the 23rd Eur. Photovolt. Sol. Energy Conf., Valencia, 2151–2155 (2008) (<https://doi.org/1854/LU-678258>).
- [26] J. Verschraegen, M. Burgelman, *Thin Solid Films* 515(15), 6276 (2007) (<https://doi.org/10.1016/j.tsf.2006.12.049>).
- [27] S. Degrave, M. Burgelman, P. Nollet, Modelling of polycrystalline thin film solar cells: new features in SCAPS version 2.3, Proc. Of 3rd World Conf. on Photovolt. Energy Convers, vol 1, 487–490 (2003) (ISBN:4-9901816-0-3).
- [28] M. Gloeckler, A.L. Fahrenbruch, J.R. Sites, Numerical modeling of CIGS and CdTe solar cells: setting the baseline, Proc. Of 3rd World Conf. on Photovolt. Energy Convers, vol 1, 491–494 (2003).
- [29] G. Heal, Reflections – the Economics of Renewable Energy in the United States, Review of Environmental Economics and Policy. Oxford University Press for Association of Environmental and Resource Economists 4(1), 139-154 (2010). (<https://www.nber.org/papers/w15081.pdf>).
- [30] M. Gloeckler, A. L. Fahrenbruch, J. R. Sites, Numerical modeling of CIGS and CdTe solar cells: setting the baseline. Proc. of 3rd World Conf. on Photovolt. Energy Convers., 1, 491-494 (2003).
- [31] H. Zerfaoui, D. Dib, M. Rahmani, K. Benyelloul, C. Mebarkia, Study by simulation of the SnO₂ and ZnO anti-reflection layers in n-SiC/p-SiC solar cells. In AIP Conf. Proc., 1758(1), 030029 (2016) (<https://doi.org/10.1063/1.4959425>).
- [32] C. Dumitrache, N. Olariu, E. St. Lakatos, G. Mantescu, L. Olteanu, M. Badea, *Electrotehnica Electronica Automatica* 61(1), 25 (2013).
- [33] S. Khosroabadi, S. H. Keshmiri, *Opt. Expr.* 22(103), A921 (2014) (<https://doi.org/10.1364/OE.22.00A921>).
- [34] N. Amin, K. Sopian, M. Konagai, *Sol. Energy Mater. and Sol. Cells* 91(13), 1202 (2007) (<https://doi.org/10.1016/j.solmat.2007.04.006>).
- [35] P. Sawicka-Chudy, Z. Starowicz, G. Wisz, R. Yavorskyi, Z. Zapukhlyak, M. Bester, M. Sibiński, M. Cholewa, *Materials Research Express* 6(8), 085918 (2019) (<https://doi.org/10.1088/2053-1591/ab22aa>).
- [36] G.A. Il'chuk, V.V. Kusnezh, V.Y. Rud', et el., *Semiconductors* 44(3), 318 (2010) (<https://doi.org/10.1134/S1063782610030085>).
- [37] J. Türck, H.J. Nonnenmacher, P.M. Connor, S. Siol, B. Siepchen, J.P. Heimfarth, A. Klein, W. Jaegermann, *Prog. Photovoltaics Res. Appl.* 24, 1229 (2016) (<https://doi.org/10.1002/pip.2782>).
- [38] G. Wisz, P. Sawicka-Chudy, P. Potera, M. Sibiński, R. Yavorskyi, Ł. Głowa, B. Cieniek, M. Cholewa, *Molecular Crystals and Liquid Crystals* 672(1), 81 (2018) (<https://doi.org/10.1080/15421406.2018.1542110>).
- [39] P. Sawicka-Chudy, M. Sibiński, E. Rybak-Wilusz, M. Cholewa, G. Wisz, R. Yavorskyi, *AIP Advances* 10(1), 010701 (2020) (<https://doi.org/10.1063/1.5125433>).
- [40] P.D. DeMoulin, M.S. Lundstrom, *IEEE Trans. Electron. Dev.*, 36, 897 (1989) (<https://doi.org/10.1109/16.299671>).

- [41] W. Zhang, Y. Li, S. Zhu, F. Wang, Surf. Coat. Technol. 182(2-3), 192 (2004) (<https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2003.08.050>).

Zapukhlyak Z.R.¹, Nykyruy L.I.¹, Rubish V.M.², Wisz G.³, Prokopiv V.V.¹, Galushchak M.O.⁴, Lishchynskyy I.M.¹, Katanova L.O.¹, Yavorskyi R.S.¹

SCAPS simulation of ZnO/CdS/CdTe/CuO heterostructure for photovoltaic application

¹Vasyl Stefanyk Precarpathian National University, Ivano-Frankivsk, Ukraine, zhanna.zapukhlyak@gmail.com

²Uzhgorod Laboratory of Institute for Information Recording of NAS of Ukraine, Uzhgorod, Ukraine

³Rzeszow University, Rzeszow, Poland,

⁴Ivano-Frankivsk National Technical University of Oil and Gas, Ivano-Frankivsk, Ukraine

In the computer simulations environment of photoelectric cells SCAPS (Solar Cell Capacitance Simulator) complex modeling of optical and photoelectric properties of the cell based on the heterostructure ZnO/CdS/CdTe/CuO was performed. The choice of highly resistive transparent (HRT) oxide material - for use as a front contact is justified. The influence of film thickness on the efficiency of the final cell is investigated. The efficiency of the considered photovoltaic cell was 20.94%. The structure of the photovoltaic cell was chosen based on the analysis of the properties of individual layers with a certain thickness from a pre-selected range. In this case the properties of the heterosystem were reviewed each time with adding each subsequent layer. Thus, the optimal thicknesses for the photoelectric heterosystem are selected, which allow to obtain the maximum efficiency. The simulation was based on experimental data (thickness, optical characteristics, band gap) for each of the films obtained by physical vapor deposition (PVD).

Key words: thin films, photoelectricity, cadmium telluride, ZnO/CdS/CdTe/CuO heterostructure, solar cells, SCAPS modeling.