УДК 621.315.592 DOI https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-11

### Ростислав ЯВОРСЬКИЙ

доктор філософії зі спеціальності «Фізика та астрономія», доцент кафедри фізики і хімії твердого тіла, Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника, вул. Шевченка, 57, м. Івано-Франківськ, Україна, 76018 ORCID ID: https://orcid.org/0000-0001-5690-7486 SCOPUS-AUTHOR ID: 57193824044

# Андрій КАШУБА

доктор фізико-математичних наук, доцент кафедри загальної фізики, Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 12, м. Львів, Україна, 79000 ORCID ID: https://orcid.org/0000-0003-3650-3892 SCOPUS-AUTHOR ID: 57188864596

### Лілія ЯВОРСЬКА

аспірантка кафедри фізики і хімії твердого тіла, Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника, вул. Шевченка, 57, м. Івано-Франківськ, Україна, 76018 ORCID ID: https://orcid.org/0000-0003-3593-9934 SCOPUS-AUTHOR ID: 57221619996

# Оксана ЗАМУРУЄВА

кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри теоретичної та комп'ютерної фізики імені А.В. Свідзинського, Волинський національний університет імені Лесі Українки, просп. Волі, 13, м. Луцьк, Волинська обл., Україна, 43025 ORCID ID: https://orcid.org/0000-0003-0032-0613 SCOPUS-AUTHOR ID: 56181742100

Бібліографічний опис статті: Яворський, Р., Кашуба, А., Яворська, Л., Замуруєва, О. (2024). Моделювання впливу нановолокон CdS на властивості фотоелектричного перетворювача ІІ покоління. *Фізика та освітні технології*, 2, 79–89, doi: https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-11

# МОДЕЛЮВАННЯ ВПЛИВУ НАНОВОЛОКОН CdS НА ВЛАСТИВОСТІ ФОТОЕЛЕКТРИЧНОГО ПЕРЕТВОРЮВАЧА II ПОКОЛІННЯ

Робота присвячена дослідженню впливу нановолокон CdS на характеристики тонкоплівкових фотоелектричних перетворювачів другого покоління з гетероструктурою ITO/SnO<sub>2</sub>/nw-CdS/CdTe. Проведено моделювання за допомогою програмного забезпечення SCAPS, що дозволило визначити оптимальні параметри структури для досягнення максимальної ефективності. Розглянуто використання шару нановолокон CdS як буферного (віконного) шару, що забезпечує покращені оптичні властивості та підвищує коефіцієнт заповнення й ефективність перетворення.

Моделювання показало, що оптимальна товщина поглинаючого шару CdTe складає 3 мкм, буферного шару CdS – 120 нм, а верхнього провідного шару SnO<sub>2</sub> – 40 нм. Для цих параметрів ефективність фотоелектричного перетворювача досягає 13,33%, а фактор заповнення становить 77,39%. Застосування нановолокон CdS сприяє зменшенню рекомбінації носіїв заряду на межі розділу шарів, зменшенню втрат світла через відбиття, а також поліпшенню транспортування носіїв заряду. Внаслідок цього вдалося покращити спектральну реакцію квантової ефективності та знизити вплив дефектів на продуктивність пристрою.

Досліджено вплив густини дефектних станів на інтерфейсі пw-CdS/CdTe. Результати показують, що збільшення густини дефектів понад 10<sup>12</sup> см<sup>2</sup> призводить до значного зниження напруги холостого ходу, струму короткого замикання та, відповідно, ефективності. Було встановлено, що дефектні стани мають значний вплив на параметри пристрою, тому їх контроль є важливим для підвищення продуктивності.

Отримані результати демонструють переваги впровадження нановолокон CdS у тонкоплівкові сонячні елементи на основі гетеропереходу CdS/CdTe. Такий підхід дозволяє досягти високої ефективності та стабільності роботи сонячних елементів, що робить їх перспективними для масштабного виробництва.

Ключові слова: сонячний елемент, фотоелектричні параметри, густина міжфазних станів, нановолокона.

# Rostyslav YAVORSKYI

Doctor of Philosophy in the specialty "Physics and Astronomy", Associate Professor at the Department of Physics and Chemistry of Solids, Vasyl Stefanyk Precarpathian National University, 57 Shevchenko str., Ivano-Frankivsk, Ukraine, 76018 ORCID ID: https://orcid.org/0000-0001-5690-7486 SCOPUS-AUTHOR ID: 57193824044

## Andrii KASHUBA

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor at the Department of General Physics, Lviv Polytechnik National University, 12 S. Bandery str., Lviv, Ukraine, 79000 ORCID ID: https://orcid.org/0000-0003-3650-3892 SCOPUS-AUTHOR ID: 57188864596

### Lilia YAVORSKA

PhD Student, Vasyl Stefanyk Precarpathian National University, 57 Shevchenko str., Ivano-Frankivsk, Ukraine, 76018 ORCID ID: https://orcid.org/0000-0003-3593-9934 SCOPUS-AUTHOR ID: 57221619996

# Oksana ZAMURUEVA

PhD in Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor at the Department of Theoretical and Computer Physics named by A.V. Svidzynskyi, Lesya Ukrainka Volyn National University, 13 Volya Ave., Lutsk, Volyn region, Ukraine, 43025 ORCID ID: https://orcid.org/0000-0003-0032-0613 SCOPUS-AUTHOR ID: 56181742100

**To cite this article:** Yavorskyi, R., Kashuba, A., Yavorska, L., Zamurueva, O. (2024). Modeliuvannia vplyvu nanovolokon CdS na vlastyvosti fotoelektrychnoho peretvoriuvacha II pokolinnia [Modeling the Influence of CdS Nanowires on the Properties of a Second-Generation Photovoltaic Converter]. *Physics and Educational Technology*, 2, 79–89, doi: https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-11

# MODELING THE INFLUENCE OF CdS NANOWIRES ON THE PROPERTIES OF A SECOND-GENERATION PHOTOVOLTAIC CONVERTER

The article investigates the influence of CdS nanowires on the characteristics of second-generation thin-film photovoltaic converters based on the ITO/SnO<sub>2</sub>/nw-CdS/CdTe heterostructure. Modeling was performed using the SCAPS software, enabling the identification of optimal structural parameters to achieve maximum efficiency. The study highlights the use of a CdS nanowire layer as a buffer (window) layer, which provides enhanced optical properties and improves the fill factor and energy conversion efficiency.

The modeling revealed that the optimal thickness of the CdTe absorber layer is 3  $\mu$ m, the CdS buffer layer is 120 nm, and the SnO<sub>2</sub> conductive layer is 40 nm. For these parameters, the photovoltaic converter efficiency reaches 13.33%, with a fill factor of 77.39%. The application of CdS nanowires reduces carrier recombination at the layer interface, decreases light losses due to reflection, and enhances charge carrier transport. As a result, the spectral response of quantum efficiency improves, and the impact of defects on device performance diminishes.

The effect of interface defect density at the nw-CdS/CdTe boundary was also studied. Results show that increasing the defect density beyond 10<sup>12</sup> cm<sup>-2</sup> significantly reduces the open-circuit voltage, short-circuit current, and thus the overall efficiency. It was established that interface defect states critically affect device parameters, emphasizing the importance of their control to enhance performance.

The findings demonstrate the advantages of integrating CdS nanowires into thin-film solar cells based on the CdS/ CdTe heterojunction. This approach allows for achieving high efficiency and operational stability of solar cells, making them promising for large-scale production.

Key words: solar cell, photovoltaic parameters, interface state density, nanowires.

Вступ. Тонкоплівкові фотоелементи вважаються одними з найперспективніших сонячних елементів завдяки високій ефективності перетворення енергії, низькій вартості та зручності для масштабного виробництва. Для широкомасштабного застосування сонячної енергії, яка б конкурувала зі звичайним викопним паливом, дуже важливо, щоб фотоелектрична система забезпечувала стабільну та високу потужність протягом тривалого часу в екстремальних умовах експлуатації.

Найоптимальніші тонкоплівкові сонячні елементи — це телурид кадмію (CdTe), селенід міді-індію (CIGS) і аморфний кремній (a-Si) з ефективністю 18,3%, 20% і 12,3% відповідно (Wisz, 2018). Повідомлялося, що технологія CdTe приблизно на 30% дешевша за технологію CIGS і приблизно на 40% дешевша за технологію a-Si (Taesoo, 2017). Отже, за допомогою тонкоплівкових сонячних елементів на основі CdTe можна досягти найвищого співвідношення «ефективність/вартість». Матеріали для тонкоплівкових сонячних елементів в даний час є предметом багатьох досліджень дослідження. First Solar Corporation (найбільша компанія по виготовленні сонячних елементів на основі CdTe) повідомляла, що середня ефективність зросла з 12,9% у 2012 році до 16,6% у 2016 році для їхніх модулів CdTe (First Solar, 2017). На сьогоднішній день найвище значення ККД становить становить 21,3%. Найкраще значення ефективності для модулів CIGS становить 20,5% (Green, 2024). Також існує значне промислове виробництво на основі структур CdTe/CdS, яке значною мірою представлене американською корпорацією First Solar, що використовуються на найбільшій на сьогодні сонячній електростанції Agua Caliente Solar Project в Арізоні (Hiscock, 2012). Слід зазначити, що тонкоплівкова технологія на основі CdTe є першою технологією, яка дозволила знизити витрати на виробництво сонячної енергії до 0,57 \$/Wp (Scarpulla, 2023).

Тонкоплівкові сонячні елементи на основі гетеропереходу CdS/CdTe у яких шар поглинача телуриду кадмію має пряму заборонену зону 1,45 eB, а буферний шар CdS – 2,4 eB. Різниця в ширині забороненої зони є оптимальною. Завдяки цьому вартість виробництва сонячного елемента на основі CdTe досить низька. Недавні дослідження показують, що сонячний

елемент CdS/CdTe продемонстрував майже ідеальну спектральну характеристику квантової ефективності та високу надійність (Bertoncello, 2020). Проте, більшість процесів виготовлення тонкоплівкових сонячних елементів CdS/CdTe мають свої недоліки. Основними недоліками є: коротке замикання шару прозорого провідного оксиду (TCO) і шару CdTe, коли шар CdS дуже тонкий, і густина захоплення всередині шару CdTe, яка відповідає за короткий час життя неосновних носіїв (Yavorskyi, 2020). Зокрема формування шару CdS товщиною менше 100 нм для зменшення його поглинання створює серйозні труднощі, оскільки це, як правило, призводить до утворення точкових дірок у CdS. Ці точкові дірки можуть призвести до прямого контакту напівпровідника р-типу (CdTe або CIGS) із прозорим електродом (наприклад, ITO), таким чином утворюючи мікропереходи та мікрошунти та погіршуючи ефективність елемента.

У зв'язку з цим для підвищення ефективності розроблено конструктивну схему сонячного елемента на основі нановолокон nw-CdS/ CdTe (Dang, 2016). Добре відомо, що вплив нановолокон на оптичні властивості віконного шару CdS є важливим аспектом у розробці тонкоплівкових сонячних елементів. Нановолокна можуть суттєво покращити оптичні характеристики матеріалу, що, у свою чергу, підвищує ефективність перетворення сонячної енергії. Нановолокна CdS мають більшу поверхневу площу в порівнянні з традиційними плівками, що дозволяє більш ефективно поглинати світло. Це може призвести до зростання поглинальних характеристик у видимій області спектра оптимальній для роботи фотоперетворювача на основі CdTe (Hongmei, 2014). Іншим вагомим аспектом застосувань 2D наноматеріалів це можливість створювати мікроструктури, які покращують розсіювання світла в шарі CdS, що дозволяє збільшити шлях, який проходить світло через матеріал, і, відповідно, підвищити ймовірність його поглинання. Завдяки своїй структурі, нановолокна зменшують втрати світла, які виникають через відбиття на поверхні. Загалом, інтеграція нановолокон у віконний шар CdS може значно поліпшити його оптичні властивості, що позитивно вплине на ефективність тонкоплівкових сонячних елементів (Dang, 2016; Shuai, 2020).

У цій роботі теоретично показано вплив різних фізичних параметрів шарів CdS, nw-CdS, CdTe, SnO<sub>2</sub> та ITO на фотоелектричні параметри змодельованих сонячних елементів. Це дослідження показує, що включення нановолокон у буферний шар CdS є перспективним для високоефективних сонячних елементів із подвійним гетеропереходом CdS/CdTe.

Методологія досліджень. Фотоелелектричний перетворювач моделювався за допомогою програмного забезпечення SCAPS v.3.3.09 з урахуванням змінних параметрів, як описано в інших джерелах (Burgelman, 2004). Симуляційний пакет SCAPS (Solar Cell Capacitance Simulator) створений для модельних розрахунків тонкоплівкових сонячних елементів на основі напівпровідникових сполук (Burgelman, 2008; Verschraegen, 2007). Здатність SCAPS моделювати численні характеристики сонячних елементів, такі як структура пристрою, властивості матеріалу, оптичні властивості та фотоелектричні процеси, є однією з його важливих переваг. Завдяки цим можливостям дослідники можуть використовувати SCAPS для вивчення того, як різні параметри впливають на ефективність сонячних елементів, і визначення ідеальних значень для підвищення продуктивності.

Програмне середовище використовує розв'язок рівняння Пуассона та рівняння неперервності та метод дрейфу-дифузії для вільних електронів і вільних дірок (Burgelman, 2004). Тому він може враховувати вплив зміщення забороненої зони, рухливості носіїв, концентрація легування та ширину забороненої зони. Для проведення моделювання заданої структури сонячного елемента в середовищі SCAPS використовували світловий спектр AM 1,5 та потужність випромінювання 1000 Вт/м<sup>2</sup> при температурі 300 К. В якості переднього контактного шару використовувався шар ІТО та Мо як задній контакт.

Програмне середовище SCAPS використовувалось для моделювання J-V характеристик сонячного елемента на основі нановолокон CdS-nw/CdTe. Схема фотоелектричної комірки представлена на рисунку 1. На схемі представлено фотоперетворювач у 2D- і 3D-форматі, поглинаючим шаром якого є CdTe. В якості буферного шару (віконного шару) використано шар із нановолокон CdS.

Головний екран, який з'являється після запуску середовища SCAPS, виглядає як показано на рисунку 2. На панелі робочих характеристик задається температура (Т, К), напруга (U, V), частота (f, Hz) і кількість операцій. Послідовний опір, опір шунта, освітлення (темне/світле) вводяться на панелі запуску. Панель «Визначення сонячних елементів» з'являється після натискання кнопки «Поставити задачу» на панелі дій. За допомогою цієї панелі можна створювати, редагувати, зберігати та завантажувати файли параметрів сонячних елементів, як показано на рисунку 3.

Товщину шарів вводили за експериментальними даними. Властивості матеріалу шарів і контактів були вибрані з літератури (Nykyruy, 2019; Zapukhlyak, 2020; Massamba, 2020) і в деяких випадках, таких як густина станів, густина дефектів, швидкість поверхневої рекомбінації, об'ємний опір, ефективна густина стану і робота виходу металу, були оцінені та



Рис. 1. Схема фотоелектричного перетворювача на основі CdS-nw/CdTe

SCAPS 3.3.09 Action Panel				- 🗆 ×
Working point     \$300.00       Temperature (K)     \$300.00       Voltage (V)     \$0.0000       Frequency (Hz)     \$1.000E+6       Number of points     \$5	Series res	Shunt resistance           Shunt resistance           yes           Rs         Ohm.cm^2         Rsh         1.00E+30           S/cm^2         Gsh         0.00E+0	Action list Load Action List Save Action List	All SCAPS settings
Illumination:     Dark     Lit       Analytical model for spectrum     Spectrum file name:     illumin       Spectrum file	Specific         Specific           Spectrum from file         Illumina           hated from left         Illumina           AM1_5         Shortwavel (nm)           Long wavel (nm)         40           Transmission (%)         10	y illumination spectrum, then calculate G( Incident (or bia light power (WVm G 1 sun spe 30.0 10.0 after cut-off 0.00 after ND 0.00	x) Directly specify G(x) Analytical model G(x) model Co Ideal Light Current Transmission of att Ideal Light Curren	or G(x) G(x) from file Instant generation G In G(x) (mA/cm2) 20 0000 enuation filter (%) 100.00 Lin cell (mA/cm2) 0.0000
Action Part	V1 (V) \$0.0000 V1 (V) \$0.0000 f1 (Hz) \$1.000E+2 WL1 (nm) \$300.00	V2 (V) ♀0.8000 V2 (V) ♀0.8000 f2 (Hz) ♀1.000E+6 WL2 (nm) ♀900.00	number of points \$41 \$ \$81 \$ \$21 \$ \$61 \$	0.0200 increment (V) 0.0200 increment (V) 5 points per decade 10.00 increment (nm)
Set problem Calculate: single shot Calculate: batch Calculate: recorder Calculate: curve fitting	loaded definition file: Continue Batch setup Record set-up Curve fit set-up	Stop Results of EB G,R AC Record Curvefitt	CdTe-CdS-mw-Sn02-ITOdef calculations -V C-V C-f QE er results	OK Save all simulations Clear all simulations SCAPS info
Execute script	Script set-up	Script graphs	Script variables	Quit

Рис. 2. Головний екран програмного середовища SCAPS



Рис. 3. Вигляд вікна для задання і редагування кожного з шарів фотоелектричного елемента

налаштовано для того, щоб крива відповідала експериментальній кривій І-V при 300К. Тут варто зазначити, що параметри зберігалися однаковими для всіх температур.

Тут слід зазначити, що SCAPS приймає лише параметри тонкого шару, шар нановолокон CdS був представлений як тонкий шар із високим коефіцієнтом поглинання (9,6х10<sup>5</sup>). Як зазначалося (Dang, 2014; Shuai, 2020), доведено, що шар нановолокон CdS покращує пропускання світла через віконний шар і покращує поглинання та генерацію носіїв у поглиначі.

Оптична ширина забороненої зони, коефіцієнт поглинання, концентрація носіїв та

Таблиця 1

1 1						
Параметри	ITO	i-SnO <sub>2</sub>	n-CdS-nw	p-CdTe		
Товщина, нм	150*	40*	120*	3000*		
Ширина забороненої зони, еВ	3,65	3,6	3,490	1,5		
Спорідненість до електрона, еВ	4,8	4,4	4,0	4,28		
Діелектрична проникність (відн.)	8,9	9,0	9,0	10,3		
Ефективна густина станів зони провідності, см-3	5,2.1018	$2,2\cdot 10^{19}$	8·10 <sup>19</sup>	9,2.10 17		
Ефективна густина станів валентної зони, см-3	1,0.1018	1,8.1019	8·10 <sup>18</sup>	5,2.1018		
Теплова швидкість електронів (см/с)	2,0.107	1,0.107	1,0.107	1,0.107		
Теплова швидкість дірок (см/с)	1,0.107	1,0.107	1,0.107	1,0.107		
Рухливість електронів, см <sup>2</sup> /(В·с)	1,0.101	1,0.102	1,0·10 <sup>2</sup>	3,2·10 <sup>2</sup>		
Рухливість дірок, см <sup>2</sup> /(В·с)	1,0.101	2,5·10 <sup>1</sup>	2,5·10 <sup>1</sup>	4,0·10 <sup>1</sup>		
N <sub>D</sub> , cm <sup>-3</sup>	1,0.1015	1,0.1015	1,15.1017*	0		
N <sub>A</sub> , cm <sup>-3</sup>	0	1,0.1015	0	1,0.1016*		
Коефіцієнт радіаційної рекомбінації (см3/с)	2,3.10-11	2,3.10-9	2,3.10-9	2,3.10-9		

Параметри моделювання використані для сонячних елементів з нановолокнами n-CdS-nw/p-CdTe при 300 К

Примітка: \* – змінні параметри.

Таблиця 2 Параметри дефектів на інтерфейсі, що використовуються при моделюванні

Параметри	Інтерфейс CdS-nw/CdTe	
Тип дефекту	Акцепторний	
Поперечний переріз захоплення електронів (см <sup>2</sup> )	1.10-13	
Поперечний переріз захоплення дірок (см <sup>2</sup> )	1.10-13	
Енергетичне положення дефекту Е <sub>t</sub>	Вище E <sub>v</sub> CdTe	
Рівень енергії щодо еталонного (еВ)	0,100	
Загальна густина (см <sup>-2</sup> )	1,6.1012	

інші вхідні параметри, які використані при моделюванні структури сонячного елемента, використовувались з дослідницьких робіт (Yavorskyi, 2020; Nykyruy, 2019; Ahmmed, 2020), 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.

# Обговорення результатів.

Дизайн пристрою. Схематична струксонячного тура елемента. шо складається 3 планарного CdS, i процес транспортуванняносіївзарядупоказані нарисунках 4 а) і в) відповідно. На рисунку 4 б) і г) показано структуру сонячного елемента nw-CdS. На рисунку 4 г) показано процес транспортування носіїв сонячного елемента nw-CdS/ CdTe (Hongmei, 2015). Виготовлений пристрій складається з нановолокон CdS, вбудованих у прозору матрицю з анодованого оксиду алюмінію (AAO).

Використання матриці ААО і нановолокон CdS у сонячних елементах CdS/CdTe призвело до кращого пропускання падаючого світла, що збільшує струм короткого замикання. Напруга холостого ходу була покращена завдяки зменшенню рекомбінації поверхні розділу та зменшенню ефективного зворотного струму насичення, що стало результатом зменшення площі розділу між нановолокнами CdS та полікристалічним CdTe. Крім того, сонячні елементи nw-CdS/CdTe показали майже ідеальну спектральну реакцію квантової ефективності, а їх надійність була покращена приблизно в 3 рази. Нановолоконні сонячні елементи CdS/CdTe, вирощені через мембрану ААО, можуть покращити здатність до поглинання та генерації носіїв завдяки регулюванню пропускання світла віконного шару та одночасно отримали значні переваги щодо надійності.

# Визначення оптимальної товщини шарів.

СdTe є активною частиною сонячного елемента, де відбувається найбільша генерація та накопичення носіїв (рис. 4). При моделюванні товщина цього шару спочатку змінювалася від 0,5 мкм до 12,0 мкм з кроком 0,5 мкм, а потім була встановлена на d = 3 мкм, тоді як інші параметри залишалися постійними.

Визначено, що при товщині поглинаючого шару телуриду кадмію d = 3 мкм ефективність досягає максимального значення 12,78% (рис. 5),



Рис. 4. а) Схематична структура сонячного елемента CdS/CdTe з вертикальним пакетом нановолокон, де світло-блакитний колір позначає AAO з незначним поглинанням, б) Схематична структура планарної сонячної батареї CdS/CdTe, в) Транспортування електронів і дірок через зменшений інтерфейс переходу в сонячному елементі nw CdS/CdTe, г) Транспорт електронів і дірок через інтерфейс переходу в звичайному планарному сонячному елементі CdS/CdTe [18]

а коефіцієнт заповнення FF зростає зі збільшенням товщини і досягає значення FF=75,81%. При збільшенні товщини шару ефективність і фактор заповнення виходить на насичення і суттєво не змінюється.



Рис. 5. Зміна ефективності η та FF як функція товщини поглинаючого шару CdTe

Оптимізацію сонячного елемента з гетеропереходом nw-CdS/CdTe було змодельовано на основі перерахованих вище властивостей поглинаючого та віконного шару у таблиці 1. При моделюванні товщина віконного шару варіювалась від 10,0 нм до 150,0 нм з кроком 10 нм, і була встановлена на d = 120 нм. Для цієї товщини спостерігалась найвища ефективність  $\eta = 13,16\%$  і фактор заповнення FF = 76,18. При збільшенні товщини шару спостерігається не значне зростання фотоелектричних параметрів і вихід на насичення (рис. 6).

Що стосується верхнього провідного шару  $SnO_2$  моделювання проводилось для товщини від 10 нм до 150 нм з кроком 10 нм. Встановлено, що оптимальна товщина шару становить 40 нм, при якій ефективність  $\eta = 13,33\%$ , а FF=77,39. Подальше підвищення товщини призводить до зниження фотоелектричних параметрів (рис. 7).



Рис. 6. Зміна ефективності η та FF як функція товщини віконного шару nw-CdS/CdTe



Рис. 7. Зміна ефективності η та FF як функція товщини провідного шару SnO,/nw-CdS/CdTe

Вплив густини стану інтерфейсу. Заряд  $Q_{it}$  у пастках на межі розділу існує в межах забороненої зони через розривання періодичної структури решітки на поверхні кристала (Burgelman, 2004).  $Q_{it}$  може бути дуже високим, оскільки густина йонів на межі розділу може бути досить високою, порядку  $10^{15}$  іонів на см<sup>2</sup>. Подібно до об'ємних домішок, інтерфейсна пастка вважається донором, коли вона нейтральна (заповнена електронами) і може стати позитивно зарядженою, віддавши електрон. Інтерфейсна пастка вважається акцептором, коли нейтральна (порожня) і може стати негативно зарядженою, приймаючи електрон.

Щоб вивчити вплив густини міжфазних станів на вольт-амперній характеристиці, густина міжфазних станів (N<sub>it</sub>) між шарами nw-CdS і CdTe змінювалися в моделюванні в діапазоні від 5,88х10<sup>11</sup> до 6,2х10<sup>13</sup> см<sup>-2</sup>. Цей діапазон пов'язаний із змодельованими кривими J-V, отриманими за допомогою SCAPS-1D без збою конвергенції. У цій моделі тип дефекту стану межі розділу розглядається як акцептор з однорівневим розподілом енергії. Рисунок 8 показує змодельовані J-V характеристики сонячного елементу для діапазону густин міжфазних станів.

На рисунку 5 показано змодельовані вольт-амперні криві, із значеннями  $V_{oc}$ ,  $J_{sc}$ , FF та ефективності при різних густинах стану розділу. Струм рекомбінації інтерфейсу збільшує темновий струм насичення сонячного елемента та знижує ефективність комірки. Таким чином, це зменшує струм короткого замикання і, отже, ефективність сонячного елемента (Burgelman, 2004; Burgelman 2008). Як видно з рисунка 8,  $V_{oc}$  і  $J_{sc}$  зменшуються зі збільшенням загальної густини станів розділу, і, таким чином, ефективність знижується.

Висновки. Проведено дослідження фотоелектричної комірки ITO/SnO<sub>2</sub>/nw-CdS/CdTe на основі шару із нановолокон nw-CdS за допомогою програмного середовища SCAPS 3.3.09. Результати моделювання показують, що введення шару nw-CdS значно покращує вихідні параметри, а отже, і ефективність фотоелектричної комірки. Ефективність перетворення енергії (РСЕ) сонячного елемента ITO/SnO<sub>2</sub>/ nw-CdS/CdTe становить приблизно 13,33%, а фактор заповнення сягає значення FF = 77,39. Встановлено, що сонячні елементи на основі нановолокон nw-CdS/CdTe, можуть покращити здатність до поглинання та генерації носіїв завдяки регулюванню пропускання світла віконного шару та одночасно отримати значні переваги щодо надійності. Показано вплив густини дефектних станів змінювалася від 5,88 x10<sup>11</sup> см<sup>-2</sup> до 6,2 x10<sup>13</sup> см<sup>-2</sup>, де положення дефектного стану враховувалося на рівні Е. з гаусовим енергетичним розподілом. Можна помітити, що збільшення рівня дефектного стану головним чином впливає на напругу холостого ходу і струм короткого замикання, шо викликає падіння ефективності пристрою. Отже, густина дефектних станів може бути розрахована до 10<sup>12</sup> см<sup>-2</sup>, оскільки поза цим рівнем ефективність сонячного елемента ITO/SnO<sub>2</sub>/nw-CdS/CdTe значно погіршується.





Рис. 8. Змодельовані J-V характеристики при 300 К для N<sub>it</sub>: a) 5,88 х10<sup>11</sup> см<sup>-2</sup>, б) 5,98 х10<sup>11</sup> см<sup>-2</sup>, в) 6,2 х10<sup>11</sup> см<sup>-2</sup>, г) 7,2 х10<sup>11</sup> см<sup>-2</sup>, д) 9,2 х10<sup>11</sup> см<sup>-2</sup>, е) 1,2 х10<sup>11</sup> см<sup>-2</sup>, є) 6,2 х10<sup>12</sup> см<sup>-2</sup>, ж) 9,2 х10<sup>11</sup> см<sup>-2</sup>, 3) 1,2 х10<sup>13</sup> см<sup>-2</sup>, и) 6,2 х10<sup>13</sup> см<sup>-2</sup>

### ЛІТЕРАТУРА:

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* 2018. 8(4). P. 2367–2384.

2. Lee, Taesoo D., and Abasifreke U. Ebong. A review of thin film solar cell technologies and challenges. *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 2017. 70. P. 1286–1297.

3. Green M. A. et al. Solar cell efficiency tables. Progress in Photovoltaics: *Research and Applications*. 2024. T. 32.(7). P. 425–441.

4. Hiscock G., Earth Wars: the Battle for Global Resources. John Wiley & Sons, Singapore, 2012.

5. Scarpulla, Michael A., et al. CdTe-based thin film photovoltaics: Recent advances, current challenges and future prospects. *Solar Energy Materials and Solar Cells* 2023. V.255. P.112289.

6. Bertoncello, Matteo, et al. Influence of CdTe solar cell properties on stability at high temperatures. *Microelectronics Reliability* 2020. V. 114. P.113847.

7. 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.

8. Dang H., Singh V. P., Guduru S., Hastings J. T. Embedded nanowire window layers for enhanced quantum efficiency in window absorber type solar cells like CdS/CdTe. *Solar Energy Materials and Solar Cells* 2016. V.144. P. 641–651.

9. Dang, Hongmei, et al. Cadmium sulfide nanowire arrays for window layer applications in solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells* 2014. V.126. P. 184–191.

10. Guo, Shuai, et al. Tunable optical loss and multi-band photodetection based on tin doped CdS nanowire. *Journal of Alloys and Compounds* 2020. V. 835. P. 155330.

11. Burgelman M., Verschraegen J., Degrave S., Nollet P. Modeling thin-film PV devices. *Prog. Photovoltaics Res. Appl.* 2004. V12 (2-3). P. 143–153.

12. Burgelman M., Marlein J. Analysis of graded band gap solar cells with SCAPS, Proc. Of the 23rd Eur. *Photovolt. Sol. Energy Conf., Valencia* 2008. pp. 2151–2155.

13. Verschraegen J., Burgelman M. Numerical modeling of intra-band tunneling for heterojunction solar cells in SCAPS. *Thin Solid Films* 2007. V.515 (15) V. 6276–6279.

14. 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.

15. 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.

16. Seck, Serigne Massamba, et al. Study of efficiencies CdTe/CdS photovoltaic solar cell according to electrical properties by scaps simulation. *Natural Resources* 2020. P.47.

17. Ahmmed 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.

18. Hongmei Dang, Nanostructured Semiconductor Device Design in Solar Cells", Ph.D. Thesis, University of Kentucky 2015. P. 77.

#### **REFERENCES:**

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

2. Lee, Taesoo D., and Abasifreke U. (2017). Ebong. A review of thin film solar cell technologies and challenges. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 70. P. 1286–1297.

3. Green M. A. et al. (2024). Solar cell efficiency tables. Progress in Photovoltaics: *Research and Applications*. T. 32.(7). P. 425–441.

4. Hiscock, G. (2012). Earth Wars: the Battle for Global Resources. John Wiley & Sons, Singapore.

5. Scarpulla, Michael A., et al. (2023). CdTe-based thin film photovoltaics: Recent advances, current challenges and future prospects. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, V.255. P.112289.

6. Bertoncello, Matteo, et al. (2020). Influence of CdTe solar cell properties on stability at high temperatures. *Microelectronics Reliability*, V. 114. P.113847.

7. Yavorskyi, R. (2020). Features of optical properties of high stable CdTe photovoltaic absorber layer. *Physics and Chemistry of Solid State*, Vol. 21, No. 2. P. 243–253.

8. Dang, H., Singh, V. P., Guduru, S., & Hastings J. T. (2016). Embedded nanowire window layers for enhanced quantum efficiency in window absorber type solar cells like CdS/CdTe. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, V.144. P. 641–651.

9. Dang, Hongmei, et al. (2014). Cadmium sulfide nanowire arrays for window layer applications in solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, V.126. P. 184–191.

10. Guo, Shuai, et al. (2020). Tunable optical loss and multi-band photodetection based on tin doped CdS nanowire. *Journal of Alloys and Compounds*, V. 835. P. 155330.

11. Burgelman, M., Verschraegen, J., Degrave, S., & Nollet, P. (2004). Modeling thin-film PV devices. *Prog. Photovoltaics Res. Appl.* V12 (2-3). P. 143–153.

12. Burgelman, M., & Marlein, J. (2008). Analysis of graded band gap solar cells with SCAPS, Proc. Of the 23rd Eur. *Photovolt. Sol. Energy Conf., Valencia*, pp. 2151–2155.

13. Verschraegen, J., & Burgelman, M. (2007). Numerical modeling of intra-band tunneling for heterojunction solar cells in SCAPS. *Thin Solid Films*, V.515 (15) V. 6276–6279.

14. Nykyruy, L. I., Yavorskyi, R. S., Zapukhlyak, Z. R., Wisz, G., & Potera, P. (2019). Evaluation of CdS/CdTe thin film solar cells: SCAPS thickness simulation and analysis of optical properties. *Optical Materials*. Vol. 92. P. 319–329.

15. Zapukhlyak, Z. R., Nykyruy, L. I., Wisz, G., Rubish, V. M., Prokopiv, V. V., Halushchak, M. O., & Yavorskyi, R. S. (2020). SCAPS modelling of ZnO/CdS/CdTe/CuO photovoltaic heterosystem. *Physics and Chemistry of Solid State*. Vol. 21(4). P. 660–668.

16. Seck, Serigne Massamba, et al. (2020). Study of efficiencies CdTe/CdS photovoltaic solar cell according to electrical properties by scaps simulation. *Natural Resources*, P.47.

17. Ahmmed, S., Aktar, A., Rahman, M.F., Hossain, J., & Ismail, A.B.M. (2020b). A numerical simulation of high efficiency CdS/CdTe based solar cells using NiO HTL and ZnO TCO. *Optik (Stuttg)*. Vol.223. P.165625.

18. Hongmei Dang (2015). Nanostructured Semiconductor Device Design in Solar Cells", Ph.D. Thesis, University of Kentucky, P. 77.