

Моделирование структуры оксидного солнечного элемента

А. В. Саенко, В. С. Климин, А. А. Рожко, С. П. Малюков

Проведено численное моделирование оксидного солнечного элемента на основе р–п гетероперехода $\text{Si}_2\text{O}/\text{TiO}_2$ для оптимизации его структуры и повышения эффективности преобразования энергии. Исследовано влияние толщин слоев, концентраций акцепторов и доноров в слоях Si_2O и TiO_2 , а также работы выхода из материала тыльного контакта на фотоэлектрические параметры солнечного элемента. Получено, что оптимальная толщина слоев Si_2O и TiO_2 составляет 1,5 мкм и 100 нм соответственно. Показано, что для получения высокой эффективности солнечного элемента концентрация акцепторов в слое Si_2O должна составлять 10^{16} см^{-3} , а концентрация доноров в слое TiO_2 должна быть 10^{19} см^{-3} . Получено, что работа выхода материала тыльного контакта должна быть не менее 4,9–5 эВ для достижения высоких значений эффективности. Наиболее подходящими материалами для контакта к Si_2O являются Ni, C и Si. Для солнечного элемента на основе р–п гетероперехода $\text{Si}_2\text{O}/\text{TiO}_2$ получена максимальная эффективность 10,21 % (плотность тока короткого замыкания 9,89 мА/см², напряжение холостого хода 1,38 В, фактор заполнения 74,81 %). Результаты могут быть использованы при разработке и формировании гетероструктур недорогих оксидных солнечных элементов.

Ключевые слова: солнечный элемент, численное моделирование, толщина слоев, концентрация доноров, концентрация акцепторов, тыльный контакт.

DOI: 10.51368/1996-0948-2022-4-54-63

Введение

В настоящее время активно ведутся исследования в области поиска недорогих материалов, простых технологий, более тонких и эффективных структур для применения в фотоэлектрических преобразователях. Для сол-

нечных элементов полупроводниковые материалы в первую очередь выбираются на основе их ширины запрещенной зоны, оптических свойств и диффузионной длины носителей заряда [1, 2]. Полупроводники на основе оксидов металлов представляют группу новых недорогих материалов с большим потенциалом для данного применения. Слои оксидных полупроводников обычно имеют толщину всего несколько микрометров, что намного тоньше, чем кристаллические пластины кремния толщиной в несколько сотен микрометров. Кроме того, оксидные полупроводники являются химически стабильными и безопасными для окружающей среды материалами, которые могут осаждаться при комнатной температуре на различные подложки, включая гибкие. Оксидные полупроводники широко используются в солнечных элементах нового поколения в качестве прозрачных проводящих фронтальных электродов (ITO, FTO) и электронных (TiO_2 ,

Саенко Александр Викторович, к.т.н., доцент.

E-mail: avsaenko@sfedu.ru

Климин Виктор Сергеевич, к.т.н., доцент.

E-mail: kliminvs@sfedu.ru

Рожко Андрей Алексеевич, аспирант.

E-mail: rozhko@sfedu.ru

Малюков Сергей Павлович, д.т.н., профессор,
чл.-корр. РАЕН.

E-mail: spmalyukov@sfedu.ru

Институт нанотехнологий, электроники
и приборостроения Южного федерального университета.
Россия, 347922, г. Таганрог, ул. Шевченко, 2.

Статья поступила в редакцию 01 июля 2022 г.

© Саенко А. В., Климин В. С., Рожко А. А.,
Малюков С. П., 2022

ZnO) или дырочных (Cu₂O, NiO) проводящих слоев [3–7]. Гетеропереходы на основе оксидных полупроводников, так называемые полностью оксидные солнечные элементы, в последнее время привлекают значительное внимание благодаря использованию недорогих полупроводниковых материалов и простых технологий производства.

Для высокоэффективных солнечных элементов требуется полупроводниковый материал *n*-типа с большой шириной запрещенной зоны (прозрачный оконный слой) для пропускания через него максимально возможной интенсивности солнечного света, и полупроводниковый материал *p*-типа с более узкой шириной запрещенной зоны (фотоактивный слой) для эффективного поглощения солнечного света. При этом эффективность поглощения солнечного излучения может быть увеличена путем формирования более толстого слоя *p*-типа, однако это может приводить к превышению диффузионной длины носителей заряда, их рекомбинации и снижению фотоэлектрических параметров солнечного элемента [1]. Следовательно, очень важным является определение оптимальных толщин слоев структуры солнечного элемента как для слоя *p*-типа, так и для слоя *n*-типа, для поглощения максимальной интенсивности света и преобразования её в электрическую энергию.

В последнее время большое внимание уделяется тонким пленкам диоксида титана (TiO₂), которые являются нетоксичными, имеют высокий показатель преломления, хорошую долговременную стабильность. Кроме того, благодаря широкой запрещенной зоне (3,2 эВ) TiO₂ прозрачен в видимой и инфракрасной области спектра и поглощает ультрафиолетовую область спектра, что делает его перспективным для оптических применений [8]. В качестве фотоэлектрического материала *p*-типа с более узкой запрещенной зоной широко исследуется оксид меди (Cu₂O) с шириной запрещенной зоны 2,17 эВ, отличающийся не токсичностью, низкой стоимостью, высокой подвижностью дырок (до 110 см²/Вс), относительно высоким коэффициентом поглощения солнечного света и низким электронным сродством (3,2 эВ) [9–11]. Это делает Cu₂O хорошим материалом *p*-типа для переноса дырок и перспективным материалом для

поглощения солнечного света. Кроме того, *p–n* гетеропереход Cu₂O/TiO₂ обладает необходимым расположением энергетических зон для эффективного разделения и переноса носителей заряда [2]. Однако на сегодняшний день солнечные элементы с гетеропереходом TiO₂/Cu₂O показывают эффективность всего порядка 2 % и пока не могут конкурировать с традиционными кремниевыми солнечными элементами [12]. Численное моделирование тонкопленочных солнечных элементов является важным методом теоретического исследования их принципов работы, а также поиска возможных путей улучшения их фотоэлектрических параметров.

В настоящей работе создана модель полностью оксидного солнечного элемента на основе *p–n* гетероперехода Cu₂O/TiO₂ в программе численного моделирования SCAPS-1D. Проведено исследование влияния толщин и концентраций доноров и акцепторов в слоях *n*- и *p*-типа, а также работы выхода из материала тыльного контакта на фотоэлектрические параметры солнечного элемента.

Структура устройства и параметры моделирования

Для теоретического исследования структур солнечных элементов широко используются различные программы численного моделирования, такие как AMPS-1D, SCAPS-1D, PC1D, AFORS-HET и другие.

SCAPS-1D является программой одномерного численного моделирования структур солнечных элементов и широко используется для прогнозирования плотности тока короткого замыкания ($J_{кз}$), напряжения холостого хода ($V_{хх}$), фактор заполнения (FF) и эффективности (η) при стандартном освещении (AM1.5G, 100 мВт/см², 300 К) [13]. В основу SCAPS-1D положена нестационарная диффузионно-дрейфовая система уравнений полупроводника, в которую входят уравнения непрерывности и уравнение Пуассона [14–17]:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\mu_n \left(-n \frac{\partial \phi}{\partial x} + \varphi_i \frac{\partial n}{\partial x} \right) \right] + G - R = \frac{\partial n}{\partial t}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\mu_p \left(p \frac{\partial \phi}{\partial x} + \varphi_i \frac{\partial p}{\partial x} \right) \right] + G - R = \frac{\partial p}{\partial t}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) = \frac{q}{\varepsilon_0} (n - p - N_D + N_A), \quad (3)$$

где n , p – концентрация электронов и дырок; μ_n , μ_p – подвижности электронов и дырок; φ – электрический потенциал; φ_t – температурный потенциал; q – элементарный заряд; ε – относительная диэлектрическая проницаемость; ε_0 – диэлектрическая постоянная; G – скорость оптической генерации электронно-дырочных пар; R – скорость рекомбинации электронно-дырочных пар; N_D , N_A – концентрация донорной и акцепторной легирующей примеси.

При моделировании рассматривался солнечный элемент (рис. 1), состоящий из p - n гетероперехода и двух контактов: фронтальный контакт (ИТО), прозрачный оконный слой n -типа (TiO_2), фотоактивный слой p -типа (Cu_2O) и тыльный контакт ($\text{Ni}/\text{Au}/\text{Ag}/\text{C}/\text{Cu}/\text{Al}$). Основные физические параметры материалов, используемые при моделировании структуры солнечного элемента, приведены в таблице [10, 16–22]. Для полупроводниковых слоев эффективное сечение захвата электронов и дырок дефектом принималось равным $2 \times 10^{-14} \text{ см}^2$, а тепловая скорость носителей заряда 10^7 см/с . Природа дефектов в оксидных полупроводниках существенно отличается от обычных полупроводников (Si , Ge). Даже без внешнего введения примесей оксидные полупроводники проявляют заметную проводимость n - или p -типа, что определяется низкими энергиями образования внутренних дефектов нестехиометрии – анионными (кислородными) или катионными (металлов) вакансиями [23]. При моделировании принималось, что основными дефектами в слое TiO_2 являются

вакансии кислорода, которые также являются донорами, а основными дефектами в слое Cu_2O являются вакансии меди, которые являются акцепторами. Концентрация дефектов на границе раздела $\text{Cu}_2\text{O}/\text{TiO}_2$ задавалась равной 10^{10} см^{-2} , а эффективное сечение захвата электронов и дырок дефектом принималось равным 10^{-19} см^2 . Коэффициент поглощения для каждого слоя составлял 10^5 см^{-1} при стандартном спектре плотности потока фотонов AM1.5G. Тип дефектов кристаллической решетки (центров рекомбинации) задавался нейтральным, а их локальный энергетический уровень устанавливался в центре запрещенной зоны, поэтому механизм рекомбинации описывался согласно теории Шокли-Рида-Холла [19]. Работа выхода из фронтального контакта (ИТО) составляла 4,4 эВ. Величина последовательного сопротивления составляла $1 \text{ Ом} \times \text{см}^2$, а шунтирующего $10^6 \text{ Ом} \times \text{см}^2$ [17].

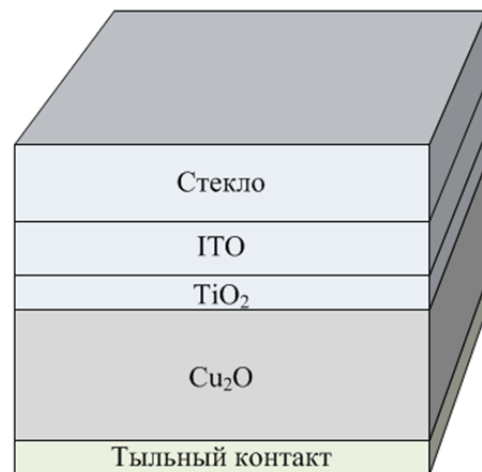


Рис. 1. Схематическое изображение моделируемой структуры оксидного солнечного элемента

Таблица

Физические параметры материалов структуры оксидного солнечного элемента

Параметры	TiO_2	Cu_2O
Толщина, нм	50–500	100–3000
N_A , см^{-3}	–	10^{14} – 10^{19}
N_D , см^{-3}	10^{14} – 10^{19}	–
E_g , эВ	3,2	2,17
χ , эВ	4,0	3,2
ε	9	7,11
N_C/N_V , см^{-3}	$2,2 \times 10^{18}/1,8 \times 10^{19}$	$2,0 \times 10^{17}/1,1 \times 10^{19}$
μ_n/μ_p , $\text{см}^2/(\text{В с})$	20/10	80/80

Результаты моделирования

Основным фактором, влияющим на фотоэлектрические параметры оксидного солнечного элемента, является толщина фотоактивного слоя Cu_2O , поскольку она осуществляет поглощение солнечного излучения и генерацию электронно-дырочных пар. Электрическое поле, создаваемое на границе раздела $p-n$ гетероперехода $\text{Cu}_2\text{O}/\text{TiO}_2$, способствует разделению электронно-дырочных пар, благодаря чему электроны инжектируются в TiO_2 , а дырки остаются в Cu_2O . Для исследования влияния толщины слоя Cu_2O на фотоэлектрические параметры солнечного элемента проведено моделирование при изменении толщины в диапазоне от 100 нм до 3 мкм, толщине слоя TiO_2 равной 50 нм, концентрации доноров в TiO_2 равной 10^{16} см^{-3} , концентрации акцепторов в Cu_2O равной 10^{17} см^{-3} и остальных параметрах, приведенных в табл. 1.

Из рис. 2 видно, что эффективность солнечного элемента резко возрастает (с 1,29 % до 6,44 %) при увеличении толщины слоя Cu_2O до 1 мкм, а затем медленно приближается к пределу до 1,5 мкм (эффективность 6,54 %). При увеличении толщины слоя Cu_2O поглощается большее количество фотонов с

длиной волны до границы поглощения вблизи 600 нм, что приводит к генерации большего количества избыточных носителей заряда и, соответственно, возрастанию плотности тока короткого замыкания с $2,52 \text{ мА/см}^2$ до $7,19 \text{ мА/см}^2$ (рис. 2). Увеличение толщины слоя Cu_2O до примерно 2 мкм также приводит к возрастанию напряжения холостого хода, а затем незначительному уменьшению, что связано с увеличением плотности темнового тока насыщения (J_0) за счет возрастания рекомбинации фотогенерированных носителей заряда. Это можно объяснить зависимостью напряжения холостого хода (V_{OC}) от плотности темнового тока насыщения и фотогенерируемой плотности тока короткого замыкания (J_{SC}) [16–19]:

$$V_{\text{OC}} = \frac{AkT}{q} \ln \left(\frac{J_{\text{SC}}}{J_0} + 1 \right), \quad (4)$$

где A – коэффициент идеальности диода; kT/q – температурный потенциал. Напряжение холостого хода ограничивается величиной плотности темнового тока насыщения, которая возрастает при увеличении толщины слоя Cu_2O . Таким образом, оптимальная толщина фотоактивного слоя Cu_2O составляет порядка 1,5 мкм.

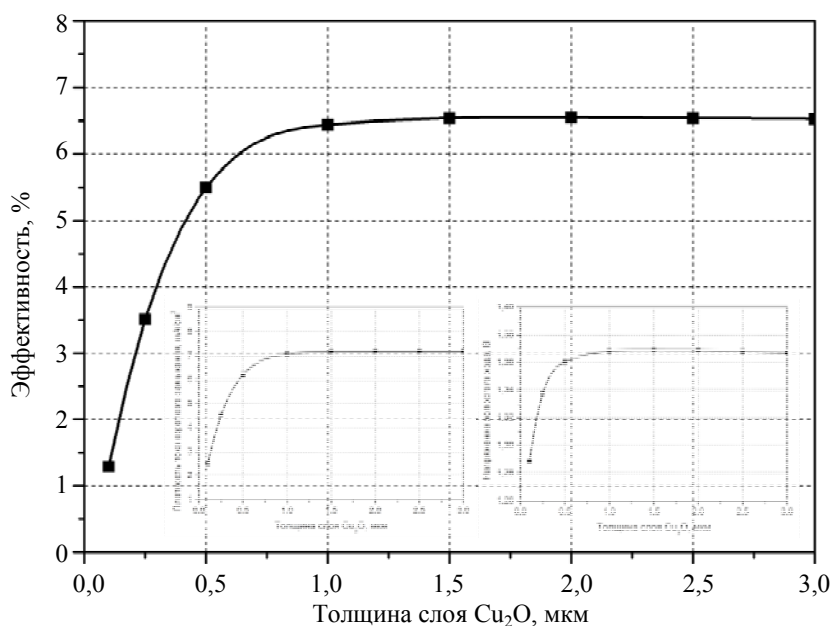


Рис. 2. Зависимости эффективности, плотности тока короткого замыкания и напряжения холостого хода солнечного элемента от толщины слоя Cu_2O

Для исследования влияния толщины TiO_2 на фотоэлектрические параметры солнечного элемента проведено моделирование при изменении толщины в диапазоне от 50 нм до 500 нм, толщине слоя Cu_2O равной 1,5 мкм, концентрации доноров в TiO_2 равной 10^{16} см^{-3} , концентрации акцепторов в Cu_2O равной 10^{17} см^{-3} (табл. 1). Из рис. 3 видно, что увеличение толщины слоя TiO_2 от 50 нм до 500 нм приводит сначала к возрастанию, а затем к снижению эффективности солнечного элемента. Это связано с неглубоким проникновением ультрафиолетового света в слой TiO_2 и увеличением плотности темного тока насыщения (J_0) за счет возрастания рекомбинации носителей заряда, согласно выражению (4). Следовательно, максимальная эффективность оксидного солнечного элемента соответствует оптимальной толщине TiO_2 порядка 100 нм.

Важным фактором, влияющим на фотоэлектрические параметры оксидного солнечного элемента, является концентрация акцепторов (вакансий меди) и доноров (кислородных вакансий) в слоях оксидных полупроводников p - (Cu_2O) и n -типа (TiO_2) проводимости, которые также являются точечными дефектами (дефекты по Шоттки). При этом большая концентрация дефектов может приводить к более высокой скорости рекомбинации носителей заряда и снижению эффективности солнечного элемента. Для исследования влияния концентраций акцепторов и доноров на фотоэлектрические параметры солнечного элемента проведено моделирование при концентрации акцепторов и доноров от 10^{14} см^{-3} до 10^{19} см^{-3} , толщине слоя TiO_2 равной 100 нм, толщине слоя Cu_2O равной 1,5 мкм и остальных параметрах, приведенных в табл. 1.

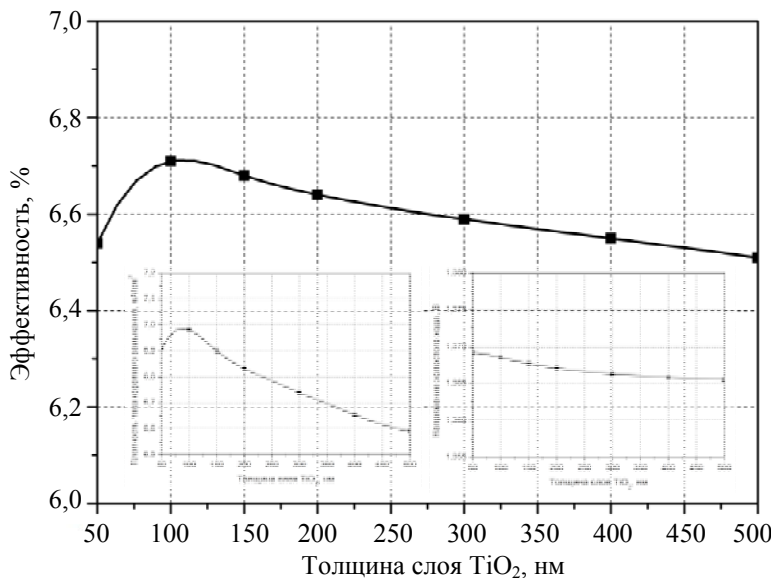


Рис. 3. Зависимости эффективности, плотности тока короткого замыкания и напряжения холостого хода солнечного элемента от толщины слоя TiO_2

Рекомбинация Шокли-Рида-Холла через локальные уровни, создаваемые дефектами кристаллической решетки, является основным механизмом в солнечных элементах. Скорость рекомбинации (R) Шокли-Рида-Холла определяется по формулам [16–18]:

$$R = \frac{n \times p - n_i^2}{\tau_n \left(n + N_c e^{\frac{-E_c + E_t}{kT}} \right) + \tau_p \left(p + N_v e^{\frac{-E_t + E_v}{kT}} \right)}, \quad (5)$$

$$\tau_{n,p} = \frac{1}{\sigma_{n,p} \times v_{n,p} \times N_t}, \quad (6)$$

где τ_n, τ_p – времена жизни электронов и дырок; $\sigma_{n,p}$ – эффективное сечение захвата электронов и дырок дефектом; E_c, E_v – энергетические уровни дна зоны проводимости и потолка валентной зоны; E_t – локальный энергетический уровень, создаваемый дефектами; $v_{n,p}$ – тепловая скорость электронов и дырок; N_t – концентрация дефектов (акцепторов или доноров).

Диффузионная длина ($L_{n,p}$) электронов и дырок в оксидном полупроводнике определяется с помощью уравнения [16, 17]:

$$(7) L_{n,p} = \sqrt{D_{n,p} \times \tau_{n,p}}, \quad (7)$$

$$D_{n,p} = \frac{kT}{q} \mu_{n,p}, \quad (8)$$

где $D_{n,p}$ – коэффициент диффузии электронов и дырок. Следовательно, с увеличением концентрации дефектов (доноров или акцепторов) в оксидном полупроводнике время жизни и диффузионная длина носителей заряда уменьшаются, а скорость рекомбинации увеличивается.

На рис. 4 показано, что увеличение концентрации акцепторов в фотоактивном слое Cu_2O от 10^{14} см^{-3} до 10^{16} см^{-3} приводит к увеличению эффективности солнечного элемента с 7,1 % до 8,78 %, а дальнейшее увеличение концентрации акцепторов до 10^{19} см^{-3} приводит к снижению эффективности до 0,49 %. Увеличение эффективности солнечного элемента до 10^{16} см^{-3} связано с тем, что энергетический уровень Ферми в слое Cu_2O снижается и приводит к возрастанию напряжения холо-

стого хода с 1,28 В до 1,36 В, а возрастающая скорость рекомбинации, согласно выражениям (5) и (6), не приводит к значительному снижению концентрации носителей заряда. Так плотность тока короткого замыкания уменьшается незначительно с $10,85 \text{ мА/см}^2$ до $9,73 \text{ мА/см}^2$. Дальнейшее возрастание концентрации акцепторов (больше 10^{17} см^{-3}) приводит к существенному уменьшению плотности тока короткого замыкания до $0,65 \text{ мА/см}^2$, что связано с увеличением скорости рекомбинации носителей заряда в слое Cu_2O , и снижению эффективности солнечного элемента до 0,49 %. Таким образом, оптимальная концентрация акцепторов в слое Cu_2O должна составлять 10^{16} см^{-3} , что позволяет получить максимальную эффективность 8,78 % (плотности тока короткого замыкания $9,73 \text{ мА/см}^2$, напряжения холостого хода 1,36 В, фактор заполнения 66,35 %).

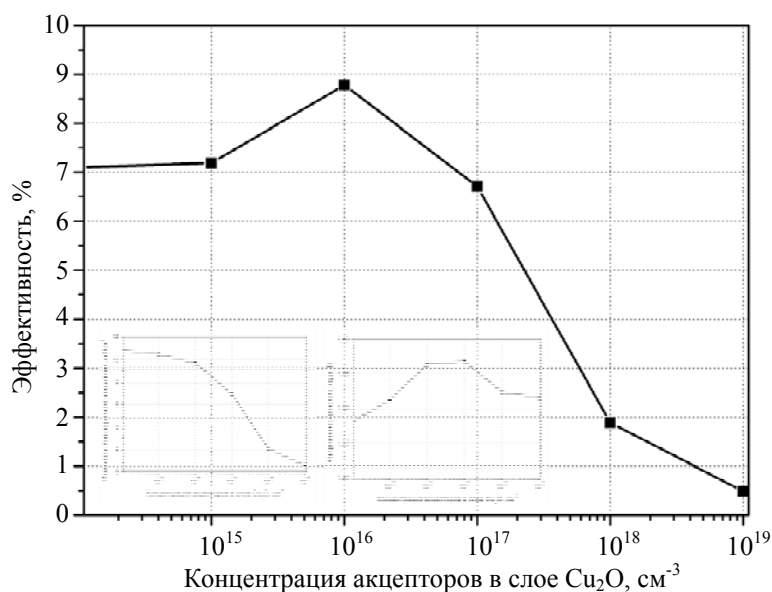


Рис. 4. Зависимости эффективности, плотности тока короткого замыкания и напряжения холостого хода от концентрации акцепторов в слое Cu_2O

Из рис. 5 видно, что увеличение концентрации доноров в слое TiO_2 от 10^{14} см^{-3} до 10^{19} см^{-3} приводит к возрастанию эффективности оксидного солнечного элемента до 10,16 %, что связано со смещением энергетического уровня Ферми в слое TiO_2 (возрастанием напряжения холостого хода до 1,37 эВ) и небольшими рекомбинационными потерями в слое TiO_2 (плотность тока короткого замыкания $9,71\text{--}9,89 \text{ мА/см}^2$) из-за малой толщины (100 нм), высокой подвижности и диффузионной длины носителей заряда. Таким образом, оптимальная концентрация доноров в слое

TiO_2 должна составлять 10^{19} см^{-3} . Исследование работы выхода из материала тыльного контакта является существенной задачей для снижения стоимости солнечного элемента и замены дорогостоящего контакта из золота (Au). В качестве данного контакта необходимо использовать материал с определенной работой выхода для получения омического контакта со слоем Cu_2O . На рис. 6 показана зависимость эффективности солнечного элемента от работы выхода из материала тыльного контакта. В качестве материала тыльного контакта рассматривались Ni (5,15 эВ), Au

(5,1), С (5 эВ), Cu (4,9), Ag (4,7) и Al (4,3 эВ) [24]. При моделировании использовались полученные оптимальные параметры для толщин, концентраций дефектов, концентраций доноров и акцепторов в слоях TiO_2 и Cu_2O . Получено, что возрастание работы выхода приводит к значительному увеличению напряжения холостого хода с 0,76 В до 1,38 В. Ток

короткого замыкания при этом практически не изменяется ($9,52\text{--}9,89 \text{ мА/см}^2$). Эффективность солнечного элемента увеличивается примерно до работы выхода 5 эВ из-за уменьшения потенциального барьера Шоттки на межфазной границе Cu_2O /металл, что способствует более эффективному переносу дырок к тыльному контакту (рис. 6).

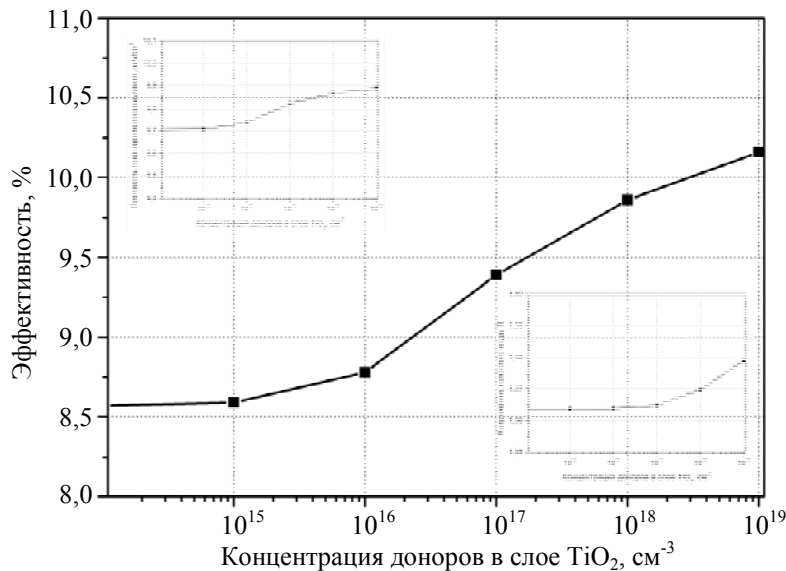


Рис. 5. Зависимости эффективности, плотности тока короткого замыкания и напряжения холостого хода от концентрации доноров в слое TiO_2

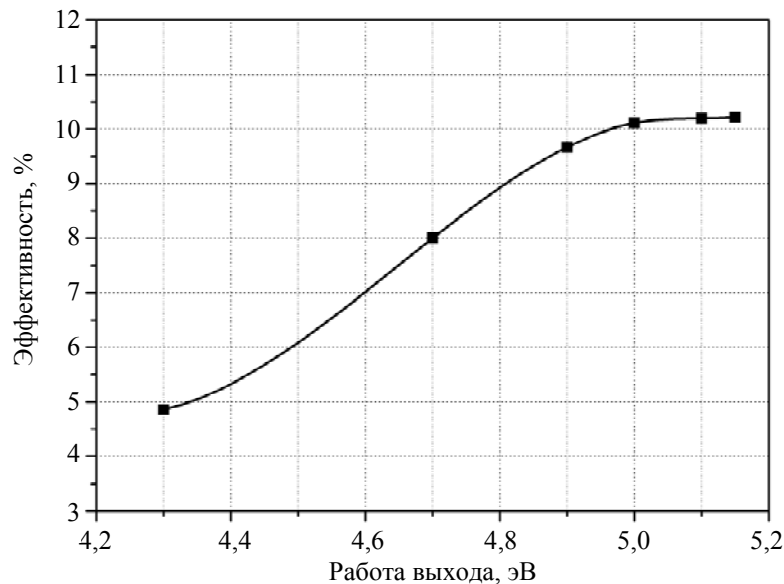


Рис. 6. Зависимость эффективности солнечного элемента от работы выхода из материала тыльного контакта

Таким образом, работа выхода тыльного контакта должна не менее 4,9–5 эВ, что необходимо для достижения высоких фотоэлектрических параметров оксидного солнечного элемента. Наиболее подходящими материалами для тыльного контакта к Cu_2O являются Ni, С и Cu. При этом получена максимальная эффективность солнечного элемента со структурой $\text{ITO/TiO}_2/\text{Cu}_2\text{O/Ni}$ равная 10,21 %

(плотность тока короткого замыкания $9,89 \text{ мА/см}^2$, напряжение холостого хода 1,38 В, фактор заполнения 74,81 %).

Заключение

В работе проведено численное моделирование оксидного солнечного элемента на основе p – n гетероперехода $\text{Cu}_2\text{O/TiO}_2$ в про-

грамме SCAPS-1D. Проведено исследование влияния толщин слоев, концентраций акцепторов и доноров в слоях Cu_2O и TiO_2 , а также работы выхода из материала тыльного контакта на фотоэлектрические параметры солнечного элемента. Получено, что оптимальная толщина слоев Cu_2O и TiO_2 составляет 1,5 мкм и 100 нм соответственно. Показано, что для получения высокой эффективности солнечного элемента концентрация акцепторов в слое Cu_2O должна составлять 10^{16} см^{-3} , а концентрация доноров в слое TiO_2 должна быть 10^{19} см^{-3} .

Получено, что работа выхода материала тыльного контакта должна быть не менее 4,9–5 эВ для достижения высоких значений эффективности. Для контакта к Cu_2O наиболее подходящими являются Ni, C и Cu. Получена максимальная эффективность солнечного элемента на основе $p-n$ гетероперехода $\text{Cu}_2\text{O}/\text{TiO}_2$ равная 10,21 %. Результаты могут быть использованы при разработке и формировании гетероструктур недорогих оксидных солнечных элементов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-29-03041 мк, а также гранта Правительства РФ (Соглашение № 075-15-2022-1123)

ЛИТЕРАТУРА

1. Amador Perez-Tomas // Advanced Materials Interfaces. 2019. Vol. 6. P. 1900471.
2. Sawicka-Chudy P., Sibinski M., Pawelek R., Wisz G., Cieniek B., Potera P., Szczepan P., Adamiak S., Cholewa M., Glowa L. // AIP Advances. 2019. Vol. 9. P. 055206.
3. Pavan Michele, Ruhle Sven, Ginsburg Adam, Keller David A., Barad Hannah-Noa, Sberna Paolo M., Nunes Daniela, Martins Rodrigo, Anderson Assaf Y., Zaban Arie, Fortunato Elvira // Solar Energy Materials and Solar Cells. 2015. Vol. 132. P. 549.
4. Mouchou R. T., Jen T. C., Laseinde O. T., Uko-ba K. O. // Materials Today: Proceedings. 2021. Vol. 38. P. 835.
5. Vakulov Z., Khakhulin D., Zamburg E., Mi-khaylichenko A., Smirnov V. A., Tominov R., Klimin V. S., Ageev O. A. // Materials. 2021. Vol. 14. P. 4854.
6. Thanh Tai Nguyen, Malkeshkumar Patel, Sangho Kim, Rameez Ahmad Mir, Junsin Yi, Vinh-Ai Dao, Joondong Kim // Journal of Power Sources. 2021. Vol. 481. P. 228865.
7. Wisz G., Sawicka-Chudy P., Sibinski M., Starowicz Z., Plocha D., Goral A., Bester M., Cholewa M., Wozny J., Sosna-Glebsk A. // Opto-Electronics Review. 2021. Vol. 29. P. 97.
8. Liu Mingzhen, Johnston Michael B., Snaith Henry J. // Nature. 2013. Vol. 501. P. 393.
9. Kudryashov D. A., Gudovskikh A. S., Babichev A. V., Filimonov A. V., Mozharov A. M., Agekyan V. F., Borisov E. V., Serov A. Yu., Filosofov N. G. // Semiconductors. 2017. Vol. 51. P. 11.
10. Саенко А. В., Малюков С. П., Палий А. В., Гончаров Е. В. // Прикладная физика. 2021. № 2. С. 45.
11. Lingyan Lin, Linqin Jiang, Ping Li, Baodian Fan, Yu Qiu // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 2019. Vol. 124. P. 205.
12. Mittiga A., Salza E., Sarto F., Tucci M., Vasanthi R. // Applied Physics Letters. 2006. Vol. 88. P. 163502.
13. Burgelman M., Nollet P., Degraeve S. // Thin Solid Films. 2000. Vol. 361–362. P. 527.
14. Minemoto T., Murata M. // J. of Appl. Phys. 2014. Vol. 116. P. 054505.
15. Himanshu Dixit, Deepak Punetha, Saurabh Kumar Pandey // International Journal for Light and Electron Optics. 2019. Vol. 179. P. 969.
16. Maľukov S. P., Sayenko A. V., Ivanova A. V. // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. 2016. Vol. 151. P. 012033.
17. Саенко А. В., Малюков С. П., Рожко А. А. // Прикладная физика. 2022. № 1. С. 19.
18. Takashi Minemoto, Yu Kawano, Takahito Nishimura, Jakapan Chantana // Optical Materials. 2019. Vol. 92. P. 60.
19. Patel Piyush K. // Scintific Reports. 2021. Vol. 11. P. 3082.
20. Abdelaziz S., Zekry A., Shaker A., Abouelatta M. // Optical Materials. 2020. Vol. 101. P. 109738.
21. Neelima Singh, Alpana Agarwal, Mohit Agarwal // Solar Energy. 2020. Vol. 208. P. 399.
22. Yu Kawano, Jakapan Chantana, Takahito Nishimura, Takashi Minemoto // Solar Energy Materials and Solar Cells. 2020. Vol. 205. P. 110252.
23. Stefanovich G. B., Pergament A. L., Boriskov P. P., Kuroptev V. A., Stefanovich T. G. // Semiconductors. 2016. Vol. 50. P. 639.
24. Behrouznejad F., Shahbazi S., Taghavinia N., Wud Hui-Ping, Eric Wei-Guang Diao // Journal of Materials Chemistry A. 2016. Vol. 4. P. 13488.

Modeling the structure of an oxide solar cell

A. V. Saenko, V. S. Klimin, A. A. Rozhko, and S. P. Malyukov

Institute of Nanotechnologies, Electronics and Equipment Engineering,
Southern Federal University
2 Shevchenko st., Taganrog, 347922, Russia
E-mail: avsaenko@sfnedu.ru

Received July 01, 2022

The article discusses numerical simulation of an oxide solar cell based on a $\text{Cu}_2\text{O}/\text{TiO}_2$ p–n heterojunction was carried out to optimize its structure and increase the efficiency of energy conversion. The influence of layer thicknesses, concentrations of acceptors and donors in Cu_2O and TiO_2 layers, as well as the work function of the back contact material on the photoelectric parameters of the solar cell is studied. It was found that the optimal thickness of Cu_2O and TiO_2 layers is 1.5 μm and 100 nm, respectively. It is shown that to obtain a high efficiency of a solar cell, the concentration of acceptors in the Cu_2O layer should be 10^{16} cm^{-3} , and the concentration of donors in the TiO_2 layer should be 10^{19} cm^{-3} . It has been found that the work function of the back contact material must be at least 4.9–5 eV in order to achieve high efficiency values. The most suitable contact materials for Cu_2O are Ni, C and Cu. For a solar cell based on a $\text{Cu}_2\text{O}/\text{TiO}_2$ p-n heterojunction, a maximum efficiency of 10.21 % was obtained (short circuit current density 9.89 mA/cm², open circuit voltage 1.38 V, fill factor 74.81 %). The results can be used in the development and formation of heterostructures of inexpensive oxide solar cells.

Keywords: solar cell, numerical modeling, layer thickness, donor concentration, acceptor concentration, back contact.

DOI: 10.51368/1996-0948-2022-4-54-63

REFERENCES

1. Amador Perez-Tomas, *Advanced Materials Interfaces* **6**, 1900471 (2019).
2. P. Sawicka-Chudy, M. Sibinski, R. Pawelek, G. Wisz, B. Cieniek, P. Potera, P. Szczepan, S. Adamiak, M. Cholewa, and L. Glowa, *AIP Advances* **9**, 055206 (2019).
3. Michele Pavan, Sven Ruhle, Adam Ginsburg, David A. Keller, Hannah-Noa Barad, Paolo M. Sberna, Daniela Nunes, Rodrigo Martins, Assaf Y. Anderson, Arie Zaban, Elvira Fortunato, *Solar Energy Materials and Solar Cells* **132**, 549 (2015).
4. R. T. Mouchou, T. C. Jen, O. T. Laseinde, and K. O. Ukoba, *Materials Today: Proceedings* **38**, 835 (2021).
5. Z. Vakulov, D. Khakhulin, E. Zamburg, A. Mikhaylichenko, V. A. Smirnov, R. Tominov, V. S. Klimin, and O. A. Ageev, *Materials* **14**, 4854 (2021).
6. Thanh Tai Nguyen, Malkeshkumar Patel, Sangho Kim, Rameez Ahmad Mir, Junsin Yi, Vinh-Ai Dao, and Joondong Kim, *Journal of Power Sources* **481**, 228865 (2021).
7. G. Wisz, P. Sawicka-Chudy, M. Sibinski, Z. Starowicz, D. Plocha, A. Goral, M. Bester, M. Cholewa, J. Wozny, and A. Sosna-Glebsk, *Opto-Electronics Review* **29**, 97 (2021).
8. Mingzhen Liu, Michael B. Johnston, and Henry J. Snaith, *Nature* **501**, 393 (2013).
9. D. A. Kudryashov, A. S. Gudovskikh, A. V. Babichev, A. V. Filimonov, A. M. Mozharov, V. F. Agekyan, E. V. Borisov, A. Yu. Serov, and N. G. Filosofov, *Semiconductors* **51**, 11 (2017).

10. A. V. Sayenko, S. P. Malyukov, A. V. Palii, and E. V. Goncharov, *Applied Physics*, No. 2, 45 (2021) [in Russian].
11. Lingyan Lin, Linqin Jiang, Ping Li, Baodian Fan, and Yu Qiu, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **124**, 205 (2019).
12. A. Mittiga, E. Salza, F. Sarto, M. Tucci, and R. Vasanthi, *Applied Physics Letters* **88**, 163502 (2006).
13. M. Burgelman, P. Nollet, and S. Degrave, *Thin Solid Films* **361–362**, 527 (2000).
14. T. Minemoto and M. Murata, *J. of Appl. Phys.* **116**, 054505 (2014).
15. Himanshu Dixit, Deepak Punetha, and Saurabh Kumar Pandey, *International Journal for Light and Electron Optics* **179**, 969 (2019).
16. S. P. Malyukov, A. V. Sayenko, A. V. Ivanova, *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering* **151**, 012033 (2016).
17. A. V. Saenko, S. P. Malyukov, and A. A. Rozhko, *Applied Physics* **1**, 19 (2022) [in Russian].
18. Takashi Minemoto, Yu Kawano, Takahito Nishimura, and Jakapan Chantana, *Optical Materials* **92**, 60 (2019).
19. Piyush K. Patel, *Scientific Reports* **11**, 3082 (2021).
20. S. Abdelaziz, A. Zekry, A. Shaker, and M. Abouelatta, *Optical Materials* **101**, 109738 (2020).
21. Neelima Singh, Alpana Agarwal, and Mohit Agarwal, *Solar Energy* **208**, 399 (2020).
22. Yu Kawano, Jakapan Chantana, Takahito Nishimura, and Takashi Minemoto, *Solar Energy Materials and Solar Cells* **205**, 110252 (2020).
23. G. B. Stefanovich, A. L. Pergament, P. P. Boriskov, V. A. Kuroptev, and T. G. Stefanovich, *Semiconductors* **50**, 639 (2016).
24. F. Behrouznejad, S. Shahbazi, N. Taghavinia, Hui-Ping Wud, and Eric Wei-Guang Diau, *Journal of Materials Chemistry A* **4**, 13488 (2016).