ВЛИЯНИЕ НАНОЧАСТИЦ ИЗ МЕТАЛЛА, ПОЛУПРОВОДНИКА И ДИЭЛЕКТРИКА (Ag, ITO, TiO_2) В БУФЕРНОМ СЛОЕ CdS НА ЭФФЕКТИВНОСТЬ ТОНКОПЛЁНОЧНОГО СОЛНЕЧНОГО ЭЛЕМЕНТА CIGS

Атамуратов Атабек
Жумабаев Бехзод
Хаитбаев Элдорбек
Ургенчский государственный педагогический институт, Ургенч, Узбекистан
e-mail: eldorkhaitbaev@urdu.uz
https://doi.org/10.5281/zenodo.24056277

Введение

Уменьшение толщины поглощающего слоя $Cu(In,Ga)Se_2$ (CIGS) до 0,5 мкм снижает расход индия и галлия, но приводит к потерям фототока из-за неполного поглощения света. Один из способов управления светом – введение наночастиц в слои, прилегающие к поглотителю. Металлические наночастицы поддерживают локализованный поверхностный плазмонный резонанс и рассеивают свет в поглотитель [1, 2]. Вырожденные полупроводники (ITO) обладают плазмонными свойствами в ближнем ИК-диапазоне [3]. Диэлектрические частицы с высоким показателем преломления (TiO_2) работают как резонаторы Ми и обладают малыми собственными потерями [4]. В работе исследовано, как наночастицы одинаковой формы и размера из металла (Ag), полупроводника (ITO) и диэлектрика (TiO_2) влияют на поглощение, генерацию носителей заряда, плотность тока и эффективность солнечного элемента CIGS.

Методика моделирования

Моделирование выполнено в пакете Ansys Lumerical 2020 R2.4: оптическая часть – методом FDTD, электрическая – в модуле CHARGE. Структура элемента (сверху вниз): ZnO:(H,Al) 250 нм / i-ZnO 50 нм / CdS 70 нм / CIGS 500 нм / Mo. Базовая модель откалибрована по экспериментальной вольт-амперной характеристике элемента из работы [5]. Сферические наночастицы радиусом r = 30 нм расположены внутри слоя CdS на границе CdS/CIGS и образуют квадратную решётку с периодом 187,5 нм. Это соответствует 128 частицам на площади 3,0 × 1,5 мкм^2 и доле проекционного покрытия 8,04 %. Во всех трёх моделях с частицами форма, размер и положение частиц одинаковы, меняется только материал. Для Ag использованы данные Johnson–Christy [6], для ITO – данные [7], для TiO_2 – данные [8]. Данные ITO и TiO_2 аппроксимированы моделью «Sampled data» в диапазоне 300–1200 нм; отклонение аппроксимации не превышает 0,004 по n и 0,007 по k.

Расчёт FDTD проведён в трёхмерной постановке с периодическими граничными условиями по x, y и PML по z, при нормальном падении света спектра AM1.5G (300–1200 нм) и сетке 1,25 нм в слое CdS. Поглощение в слоях определено по разности потоков мощности, поглощение в частицах – по полю внутри частицы. Трёхмерные профили оптической генерации G в слоях ZnO, CdS и CIGS импортированы в CHARGE. Все электрические параметры (легирование, времена жизни, R_s = 2,25 Ом·см^2, R_{sh} = 1000 Ом·см^2) для четырёх моделей одинаковы.

Результаты и обсуждение

Поглощение. Спектры полного поглощения A = 1 − R − T, поглощения в CIGS и в самих частицах приведены на рис. 1. Для удобства сравнения поглощение переведено в эквивалентную

© Ushbu material Creative Commons Attribution 4.0 International (CC BY 4.0) litsenziyasi asosida tarqatiladi.

плотность тока (AM1.5G, 300–1200 нм), значения даны в табл. 1. Частицы Ag сильнее всего увеличивают полное поглощение (34,83 → 36,21 мА/см^2). Однако этот прирост приходится на слой CdS (3,88 → 5,52 мА/см^2), а поглощение в CIGS уменьшается (23,49 → 23,15 мА/см^2). Причина в плазмонном резонансе Ag около 530 нм (рис. 1в): поле концентрируется в окружающем частицу CdS. Частицы TiO_2 практически не поглощают и снижают отражение (11,63 → 11,26 мА/см^2), поэтому поглощение в CIGS растёт до 23,85 мА/см^2. Частицы ITO дают меньший прирост (23,69 мА/см^2), а их собственное поглощение быстро растёт при $\lambda > 1000$ нм из-за поглощения свободными носителями.

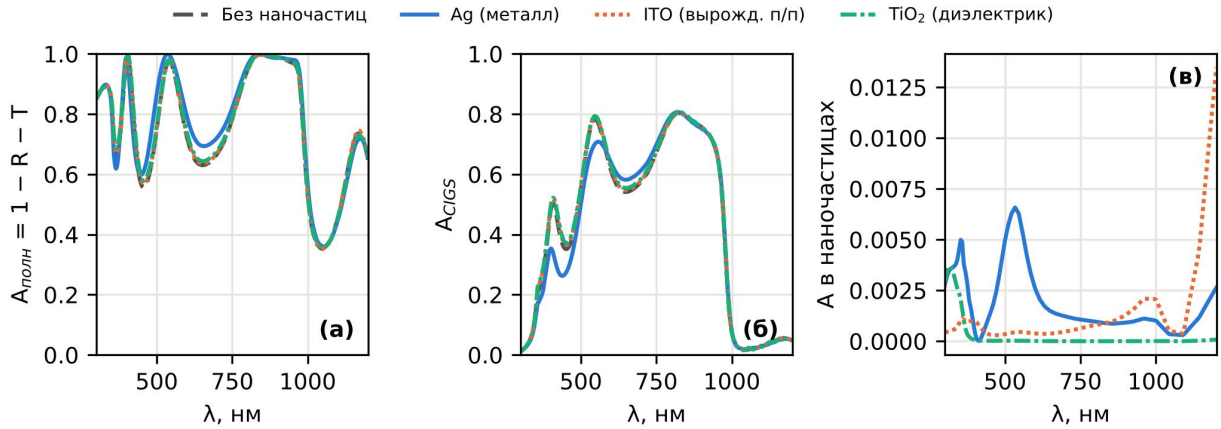

Рис. 1. Спектры (а) полного поглощения 1 − R − T, (б) поглощения в CIGS, (в) поглощения в наночастицах (FDTD).

Генерация носителей. Средние по сечению профили генерации приведены на рис. 2. Ag заметно увеличивает генерацию в CdS (рис. 2а; интеграл 3,81 → 5,21 мА/см^2) и уменьшает её в CIGS (23,29 → 22,93 мА/см^2). Для TiO_2 генерация в CIGS возрастает по всей глубине (23,64 мА/см^2, +0,35 мА/см^2), для ITO рост меньше (23,48 мА/см^2).

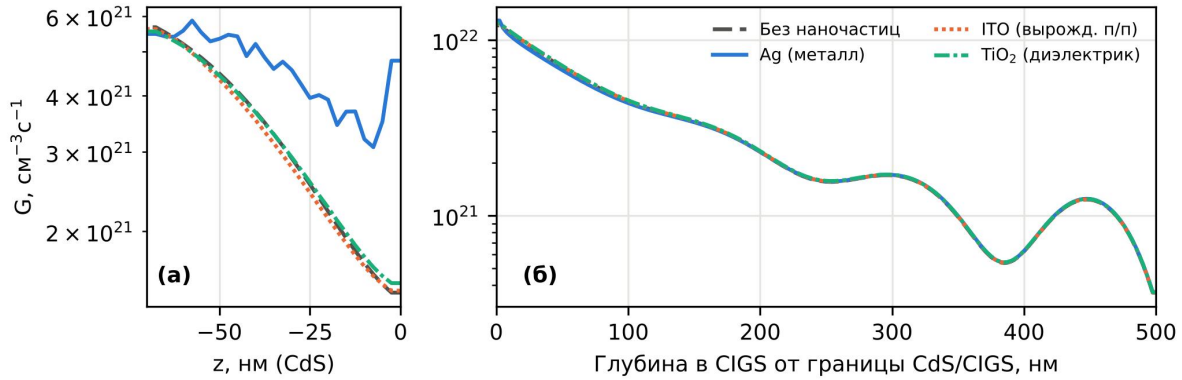

Рис. 2. Средняя по сечению скорость оптической генерации: (а) в слое CdS (z = 0 – граница CdS/CIGS), (б) в CIGS по глубине.

Плотность тока и эффективность. ВАХ, рассчитанные в CHARGE, приведены на рис. 3, параметры – в табл. 1. Все три типа частиц увеличивают J_{sc}: на +0,34 (Ag), +0,24 (ITO) и +0,47 мА/см^2 (TiO_2). V_{oc} и FF меняются незначительно. Эффективность возрастает с 16,01 % до 16,17 %

© Ushbu material Creative Commons Attribution 4.0 International (CC BY 4.0) litsenziyasi asosida tarqatiladi.

(Ag, +1,0 % отн.), 16,12 % (ITO, +0,7 % отн.) и 16,24 % (TiO_2, +1,5 % отн.). Для Ag прирост тока обусловлен носителями, генерированными в CdS. В модели они частично собираются, но в реальном буферном слое с высокой рекомбинацией этот вклад может быть меньше, поэтому оценка для Ag является верхней. Для TiO_2 прирост связан с увеличением генерации именно в поглотителе CIGS и поэтому является более надёжным.

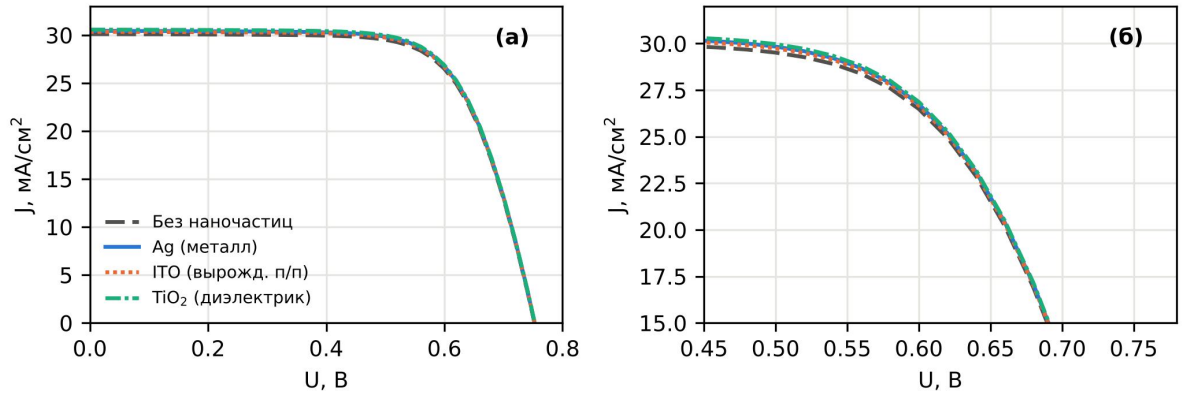

Рис. 3. Вольт-амперные характеристики (CHARGE, AM1.5G, 100 мВт/см^2): (а) полный вид, (б) область максимальной мощности. Данные: Fig3a_JV_characteristics.txt, Fig3b_IV_characteristics.txt.

Таблица 1. Оптические (эквивалентные токи, мА/см^2, AM1.5G) и электрические параметры.

Модель	$J_{A,полн}$	$J_{A,CIGS}$	$J_{A,CdS}$	J_R	$J_{G,CIGS}$	J_{sc}, мА/см^2	V_{oc}, мВ	FF, %	КПД, %
Без частиц	34,83	23,49	3,88	11,63	23,29	30,10	752,4	70,68	16,01
Ag	36,21	23,15	5,52	10,24	22,93	30,44	752,8	70,56	16,17
ITO	34,98	23,69	3,79	11,48	23,48	30,34	752,7	70,60	16,12
TiO_2	35,20	23,85	3,89	11,26	23,64	30,57	753,0	70,55	16,24

Заключение

Методами FDTD и CHARGE (Ansys Lumerical) исследовано влияние сферических наночастиц (r = 30 нм) из металла, вырожденного полупроводника и диэлектрика в слое CdS на характеристики солнечного элемента CIGS толщиной 500 нм. Все три типа частиц повышают эффективность по сравнению с элементом без частиц (16,01 %): TiO_2 – до 16,24 %, Ag – до 16,17 %, ITO – до 16,12 %. Механизмы при этом различны. Частицы Ag за счёт плазмонного резонанса увеличивают поглощение и генерацию преимущественно в CdS, а поглощение в CIGS уменьшают. Диэлектрические частицы TiO_2 без собственных потерь снижают отражение и увеличивают генерацию в поглотителе CIGS. Поэтому TiO_2 является наиболее перспективным материалом для данной конструкции. Абсолютный прирост КПД невелик (≤ 0,24 %); при шаге напряжения 20 мВ различия в V_{oc} и FF находятся на пределе разрешения расчёта.

Литература

1. Atwater H.A., Polman A. Plasmonics for improved photovoltaic devices // Nature Materials. 2010. Vol. 9. P. 205–213.

© Ushbu material Creative Commons Attribution 4.0 International (CC BY 4.0) litsenziyasi asosida tarqatiladi.

2. Catchpole K.R., Polman A. Plasmonic solar cells // Optics Express. 2008. Vol. 16. P. 21793–21800.
3. Naik G.V., Shalaev V.M., Boltasseva A. Alternative plasmonic materials: beyond gold and silver // Advanced Materials. 2013. Vol. 25. P. 3264–3294.
4. Spinelli P., Verschuuren M.A., Polman A. Broadband omnidirectional antireflection coating based on subwavelength surface Mie resonators // Nature Communications. 2012. Vol. 3. Art. 692. DOI: 10.1038/ncomms1691.
5. Li W., Xu S., Dai Y., Ma P., Feng Y., Li W., Luo H., Yang C. Improvement of the crystallinity and efficiency of wide-gap CIGS thin film solar cells with reduced thickness // Materials Letters. 2019. Vol. 244. P. 43–46.
6. Johnson P.B., Christy R.W. Optical constants of the noble metals // Physical Review B. 1972. Vol. 6. P. 4370–4379.
7. Minenkov A. et al. Monitoring the electrochemical failure of indium tin oxide electrodes via operando ellipsometry // ACS Applied Materials & Interfaces. 2024. Vol. 16. P. 9517–9531.
8. Siefke T. et al. Materials pushing the application limits of wire grid polarizers further into the deep ultraviolet spectral range // Advanced Optical Materials. 2016. Vol. 4. P. 1780–1786.
9. Юсупов А., Садуллаев С., Нуруллаев Н., Атамуратов А.Э., Жумабоев Б.К. Зависимость параметров солнечного элемента на основе GaAs от толщины антиотражающих слоёв MgF и TiO_x // Современные проблемы физики полупроводников (СПФП-2019). Нукус, 2019.

© Ushbu material Creative Commons Attribution 4.0 International (CC BY 4.0) litsenziyasi asosida tarqatiladi.