

НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»
НАВЧАЛЬНО-НАУКОВИЙ ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
КАФЕДРА ПРИКЛАДНОЇ ФІЗИКИ

«На правах рукопису»

УДК 536.2, 543.5, 544.4

«До захисту допущено»

Завідувач кафедри

Г. Є. Монастирський

(підпис)

(ініціали, прізвище)

« _____ » _____ 2025 р.

Магістерська дисертація

зі спеціальності _____ 105 «Прикладна фізика та наноматеріали»

(код і назва)

на тему: **Моделювання характеристик тонкоплівкових GaAs і органічних D18:L8-VO сонячних елементів**

Виконала: студентка _____ 2 _____ курсу, групи **ФФ-31мн**

Сіряк Тетяна Вікторівна

(прізвище, ім'я, по батькові)

(підпис)

Науковий керівник _____ доцент, к.ф.-м.н., доц. Гільчук А. В.

(посада, науковий ступінь, вчене звання, прізвище та ініціали)

(підпис)

Консультант _____

(посада, науковий ступінь, вчене звання, прізвище та ініціали)

(підпис)

Рецензенти _____ с.н.с. Інституту фізики НАНУ Руденко Р. М.

(посада, науковий ступінь, вчене звання, прізвище та ініціали)

(підпис)

к.ф.-м.н., доц. каф ПФ, доц. Іванова В. В.

(посада, науковий ступінь, вчене звання, прізвище та ініціали)

(підпис)

Засвідчую, що у цій дипломній роботі немає запозичень з праць інших авторів без відповідних посилань.

Студент _____

(підпис)

Національний Технічний Університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
Навчально-науковий Фізико-технічний інститут
Кафедра прикладної фізики

Рівень вищої освіти — другий (магістерський)

Спеціальність 105 «Прикладна фізика та наноматеріали»

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Завідувач кафедри

Монастирський Г. Є.

(підпис)

(ініціали, прізвище)

« _____ » _____ 2025 р.

ЗАВДАННЯ
на магістерську дисертацію студентці

Сіряк Тетяні Вікторівні

(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема роботи: Моделювання характеристик тонкоплівкових GaAs і органічних D18:L8-BO сонячних елементів,
науковий керівник дисертації _____ доцент, к.ф.-м.н., доц. Гільчук А. В. _____,
(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання)

затверджені наказом по університету від « 20 » березня 2025 р № 1199-с

2. Термін подання студенткою роботи « 12 » травня 2025 р.
3. Об'єкт дослідження: Фотоелектричні процеси в багаточарових структурах сонячних комірок на основі D18:L8-BO та арсеніду галію.
4. Предмет дослідження: Набір параметрів сонячної комірки, що визначають найвищу ефективність для органічної D18:L8-BO та GaAs комірок.
5. Перелік завдань, які потрібно розробити: Опрацювати літературні джерела з теми фотоелектричних властивостей органічних та неорганічних сонячних елементів. Обрати матеріали, структуру та параметри моделі для GaAs-комірки та органічної комірки на основі D18:L8-BO. Побудувати фізичні та чисельні моделі сонячних елементів з урахуванням рекомбінації, переносу носіїв заряду, впливу температури та освітлення. Виконати моделювання з використанням програмного забезпечення *OghmaNano* для аналізу вольт-амперних характеристик, ефективності, заповнення та інших параметрів, виконати верифікацію моделі на основі наявних теоретичних даних.
6. Орієнтовний перелік ілюстративного матеріалу:

7 Орієнтовний перелік публікацій:

- Сіряк Т.В., Гільчук А.В. – Моделювання інфрачервоного світлодіода на основі GaAs з високою ефективністю / Сіряк Т.В., Гільчук А.В. // Теоретичні і прикладні проблеми фізики, математики та інформатики. – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2024. – С. 97 – 100
- Сіряк Т.В., Гільчук А.В. – Комп’ютерне моделювання характеристик органічного сонячного елемента з активним шаром D18:L8-BO / Сіряк Т.В., Гільчук А.В. // Теоретичні і прикладні проблеми фізики, математики та інформатики. – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2025. – С. 131 – 137

8 Консультанти розділів роботи

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання прийняв
2			
3			

9 Дата видачі завдання « 10 » жовтня 2023 р.

Календарний план

№ з/п	Назва етапів виконання магістерської дисертації	Термін виконання етапів проекту	Примітка
1.	Опрацювання літератури за темою	10.10.2023 - 30.12.2023	Виконано
2.	Написання літературного огляду	31.12.2023 - 24.02.2024	Виконано
3.	Підготовка статті та подання її до публікації	24.03.2024 - 24.04.2024	Виконано
4.	Обробка та аналіз частини результатів моделювання	06.08.2024 - 10.10.2024	Виконано
5.	Написання другого розділу магістерської дисертації	13.10.2024 - 29.12.2024	Виконано
6.	Написання третього розділу магістерської дисертації	01.12.2025 - 24.04.2025	Виконано
7.	Написання висновків	25.04.2025 - 01.05.2025	Виконано
8.	Підготовка статті та подання її до публікації	02.04.2024 - 05.04.2024	Виконано
9.	Подання роботи на рецензування	06.05.2025	Виконано
10.	Підготовка доповіді та презентації	07.05.2025 - 11.05.2025	Виконано
11.	Подання роботи до захисту	12.05.2025	

Студентка

Науковий керівник роботи

_____	Т. В. Сіряк
(підпис)	(ініціали, прізвище)
_____	А.В. Гільчук
(підпис)	(ініціали, прізвище)

РЕФЕРАТ

Пояснювальна записка магістерської дисертації за обсягом становить 73 сторінок, містить 6 рисунків та 17 таблиць. Для дослідження було використано 23 бібліографічних найменувань.

Актуальність теми. Зростання потреб у чистій енергії та обмеженість традиційних джерел зумовлюють необхідність розвитку сонячних технологій. Особливої уваги набувають органічні та GaAs-сонячні комірки завдяки високій ефективності, гнучкості та потенціалу для масштабування. Актуальність теми полягає у дослідженні й чисельному моделюванні таких комірок з метою оптимізації їх параметрів для підвищення ефективності.

Мета і задачі дослідження. Метою роботи є чисельне дослідження роботи органічних та неорганічних напівпровідникових сонячних елементів; аналіз впливу параметрів елементів і температури на їх фотоелектричні характеристики; визначення оптимальних умов, що забезпечують найвищу ефективність пристрою. Для досягнення мети було визначено такі завдання:

- Розробити багат шарові моделі сонячних елементів на основі GaAs та D18:L8-BO у середовищі *OghmaNano*.
- Провести верифікацію моделей за теоретичними даними для підтвердження достовірності результатів.
- Проаналізувати вплив товщини активного шару, концентрації домішок, температури й освітленості на параметри V_{OC} , J_{SC} , FF та PCE.
- Побудувати вольт-амперні характеристики для оцінки фотоелектричної продуктивності комірок у різних режимах роботи.
- Виконати порівняльний аналіз органічних та неорганічних структур для визначення переваг та обмежень кожної з технологій.

Об'єкт дослідження. Сонячні елементи на основі арсеніду галію (GaAs) та органічного матеріалу D18:L8-BO.

Предмет дослідження. Фотоелектричні характеристики та фізико-технологічні параметри багат шарових сонячних елементів; методи чисельного моделювання процесів поглинання, перенесення та рекомбінації носіїв заряду.

Методи дослідження. Для дослідження застосовано чисельне моделювання в середовищі *OghmaNano* з використанням методів розв'язання стаціонарних задач переносу заряду та фотогенерації. Проведено варіаційний аналіз основних параметрів пристрою: товщини шарів, концентрації легування, температури та інтенсивності освітлення. Для аналізу отриманих характеристик використано методи побудови J–V характеристик, обчислення фотоелектричних параметрів (J_{SC} , V_{OC} , FF, PCE) та графічної інтерпретації результатів у середовищі *Python*.

Наукова новизна одержаних результатів. Проведено порівняльне чисельне моделювання двох типів сонячних елементів — органічного (на основі D18:L8-BO) та неорганічного (на основі GaAs) — в єдиному програмному забезпеченні *OghmaNano* із варіацією технологічних параметрів. Запропоновано узагальнений підхід до аналізу температурної стабільності, оптичних втрат та впливу концентрації легування на ключові фотоелектричні характеристики. Встановлено оптимальні діапазони параметрів, що забезпечують максимальну ефективність пристроїв у різних умовах експлуатації.

Практичне значення одержаних результатів. Розроблені моделі та результати чисельного моделювання можуть бути використані для оптимізації структури та параметрів як органічних, так і неорганічних (GaAs) сонячних елементів на етапі їхнього проектування. Отримані залежності дозволяють прогнозувати ефективність пристроїв за різних умов експлуатації, що є важливим для створення мобільних, гнучких та високопродуктивних фотоелектричних систем. Методика також може бути адаптована для дослідження інших типів сонячних елементів.

Апробація результатів дисертації. Основні положення та результати дисертаційної роботи були апробовані на XXII Всеукраїнській науково-

практичній конференції студентів, аспірантів та молодих вчених „Теоретичні і прикладні проблеми фізики, математики та інформатики” (Київ, 2024) та на XXIII Всеукраїнській науково-практичній конференції студентів, аспірантів та молодих вчених „Теоретичні і прикладні проблеми фізики, математики та інформатики” (Київ, 2024).

Публікації. Результати дисертації опубліковано в матеріалах наступних конференцій:

- Siryak T., Gilchuk A., *Modeling of a high efficiency GaAs-based infrared LED*. In: Theoretical and Applied Problems of Physics, Mathematics and Informatics: Proceedings of the XXIII All-Ukrainian Scientific-Practical Conference of Students, Postgraduates and Young Scientists, Kyiv, May 14–17, 2025. KPI named after Igor Sikorsky, Kyiv, 2024.
- Siryak T., Gilchuk A., *Simulation of Multilayer Structures of Solar Cells Based on GaAs and D18:L8-BO*. In: Theoretical and Applied Problems of Physics, Mathematics and Informatics: Proceedings of the XXIII All-Ukrainian Scientific-Practical Conference of Students, Postgraduates and Young Scientists, Kyiv, May 2025. Kyiv: KPI named after Igor Sikorsky, 2025.

Ключові слова: чисельне моделювання, D18:L8-BO, арсенід галію, вольт-амперна характеристика, рекомбінація.

SUMMARY

The explanatory note of the master's thesis contains 73 pages, includes 6 figures and 17 tables. A total of 23 bibliographic sources were used during the research.

Relevance of the topic. The growing demand for clean energy and the limitations of traditional sources necessitate the development of solar energy technologies. Organic and GaAs-based solar cells are receiving increased attention due to their high efficiency, flexibility, and scalability potential. The relevance of the topic lies in the study and numerical modeling of such cells to optimize their parameters for improved energy conversion performance.

Purpose and objectives of the study. The aim of this work is to conduct numerical research of the physical processes that determine the efficiency of converting solar energy into electricity in semiconductor and organic solar cells; to analyze the influence of material parameters and operating conditions on photovoltaic performance; and to establish optimal parameter values ensuring maximum device efficiency. To achieve this goal, the following objectives were defined:

- Develop multilayer models of solar cells based on GaAs and D18:L8-BO in the *OghmaNano* simulation environment.
- Validate the developed models using theoretical data to confirm result accuracy.
- Analyze the influence of active layer thickness, doping concentration, temperature, and illumination on the parameters V_{OC} , J_{SC} , FF, and PCE.
- Build current–voltage characteristics to evaluate photovoltaic performance under different operating modes.
- Perform a comparative analysis of organic and inorganic structures to determine the advantages and limitations of each technology.

Object of study. Solar cells based on gallium arsenide (GaAs) and the organic material D18:L8-BO.

Subject of study. Photovoltaic characteristics and physico-technological parameters of multilayer solar cells; numerical modeling methods of light absorption, charge transport, and recombination processes.

Research methods. The research employed numerical modeling in the *OghmaNano* environment using methods for solving steady-state charge transport and photogeneration problems. A parametric analysis was carried out on the key device parameters: layer thickness, doping concentration, temperature, and illumination intensity. The obtained results were analyzed through J–V curve generation, calculation of photovoltaic parameters (J_{SC} , V_{OC} , FF, PCE), and visualization using *Python* tools.

Scientific novelty of the obtained results. A comparative numerical modeling of two types of solar cells — organic (based on D18:L8-BO) and inorganic (based on GaAs) — was performed using a unified simulation environment *OghmaNano* with variation of technological parameters. A generalized approach was proposed for analyzing temperature stability, optical losses, and the influence of doping concentration on key photovoltaic characteristics. Optimal parameter ranges were established to ensure maximum efficiency of devices under different operating conditions.

Practical significance of the obtained results. The developed models and simulation results can be used to optimize the structure and parameters of both organic and inorganic (GaAs) solar cells at the design stage. The identified dependencies allow forecasting the device performance under various operational conditions, which is important for the development of mobile, flexible, and high-efficiency photovoltaic systems. The proposed methodology can also be adapted for the study of other types of solar cells.

Thesis presentation. The main results and conclusions of the thesis were presented at the XXII All-Ukrainian Scientific-Practical Conference of Students, Postgraduates, and Young Scientists "Theoretical and Applied Problems of Physics,

Mathematics and Informatics” (Kyiv, 2024) and at the XXIII conference of the same title (Kyiv, 2025).

Publications. The research results were published in the proceedings of the following conferences:

- Siryak T., Gilchuk A., *Modeling of a High-Efficiency GaAs-Based Infrared LED*. In: Theoretical and Applied Problems of Physics, Mathematics and Informatics: Proceedings of the XXIII All-Ukrainian Scientific-Practical Conference of Students, Postgraduates and Young Scientists, Kyiv, May 14–17, 2025. KPI named after Igor Sikorsky, Kyiv, 2024.
- Siryak T., Gilchuk A., *Simulation of Multilayer Structures of Solar Cells Based on GaAs and D18:L8-BO*. In: Theoretical and Applied Problems of Physics, Mathematics and Informatics: Proceedings of the XXIII All-Ukrainian Scientific-Practical Conference of Students, Postgraduates and Young Scientists, Kyiv, May 2025. Kyiv: KPI named after Igor Sikorsky, 2025.

Key words: *numerical simulation, D18:L8-BO, gallium arsenide, current-voltage characteristic, recombination.*

ЗМІСТ

ВСТУП	9
РОЗДІЛ 1. Огляд літератури	11
1.1. Розвиток технологій сонячних елементів	11
1.2. Порівняння різних типів сонячних елементів	13
1.2.1. Кремнієві сонячні елементи – класичний підхід.	14
1.2.2. Арсенід-галієві (GaAs) сонячні елементи.	16
1.2.3. Перовськітні сонячні елементи – нова ера фотоелектрики .	17
1.2.4. Органічні сонячні елементи – шлях до гнучкої електроніки .	19
1.3. Опис та порівняння програмного забезпечення для моделювання сонячних елементів	21
1.3.1. COMSOL Multiphysics – кінцево-елементне моделювання сонячних елементів	21
1.3.2. OghmaNano – опенсорний софт для органічних та тонко- плівкових сонячних елементів	23
1.4. Принцип роботи органічного сонячного елементу.	26
1.4.1. Матеріали для органічних тонкоплівкових сонячних еле- ментів	28
1.4.2. Енергетична структура органічних молекул (HOMO, LUMO, Eg)	31
1.5. Висновки до розділу 1	34
РОЗДІЛ 2. Матеріали та методи досліджень	36
2.1. Математична модель	38
2.1.1. Сонячний елемент на основі GaAs	38
2.1.2. Сонячний елемент на основі D18:L8-BO	40
2.2. Комп'ютерна модель	43
2.2.1. Сонячний елемент на основі GaAs	45
2.2.2. Сонячний елемент на основі D18:L8-BO	47

2.3. Висновки до розділу 2	50
РОЗДІЛ 3. Результати досліджень та їх обговорення.	52
3.1. Сонячний елемент на основі GaAs.	52
3.1.1. Верифікація моделі сонячної комірки	52
3.1.2. Оптимізація товщини емітерного та поглинаючого шарів. . .	54
3.1.3. Аналіз впливу температури на фотоелектричні характери- стики.	58
3.2. Органічний сонячний елемент на основі D18:L8-BO	60
3.2.1. Верифікація моделі органічної сонячної комірки	60
3.2.2. Оптимізація товщини активного шару	63
3.2.3. Аналіз впливу мобільності носіїв на ефективність пристрою	64
3.2.4. Аналіз впливу температури на фотоелектричні характери- стики.	65
3.3. Висновки до розділу 3	66
ВИСНОВКИ.	70
ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ	72

ВСТУП

У сучасному світі, що стрімко переходить до цифровізації, зростають не лише технологічні потреби суспільства, а й вимоги до джерел енергії, які живлять ці технології. Глобальні енергетичні виклики сьогодення вимагають переходу від традиційних викопних ресурсів до відновлюваних, чистих і довготривалих джерел енергії. Одним із найбільш перспективних напрямів у цій галузі є використання сонячної енергії — невичерпного ресурсу, який доступний у більшості регіонів світу.

Одним із найважливіших завдань у сфері сонячної енергетики є підвищення ефективності фотоперетворення при збереженні низької собівартості виробництва. У цьому контексті дослідники активно вивчають нові типи сонячних комірок: зокрема, на основі вискоефективного неорганічного матеріалу GaAs (арсеніду галію), а також сучасні органічні структури, як-от на основі D18:L8-BO. Кожен із цих підходів має свої унікальні переваги: GaAs забезпечує високу ефективність і стійкість до температур, а органічні комірки вирізняються гнучкістю, дешевизною та екологічністю [1].

У даній роботі було проведено моделювання сонячних комірок двох типів: неорганічних на основі GaAs та органічних на основі D18:L8-BO. Для кожного типу було реалізовано серію симуляцій із варіацією ключових технологічних параметрів: товщини активного шару, температури експлуатації, інтенсивності освітлення, концентрації домішок тощо. За допомогою програмного середовища OghmaNano були змодельовані ВАХ (вольт-амперні характеристики), визначено основні фотоелектричні параметри комірок: J_{SC} , V_{OC} , FF, PCE, EQE. Результати супроводжувались побудовою графіків та таблиць для візуалізації залежностей.

У роботі також було реалізовано ряд тестів на чутливість для аналізу впливу температури, поверхневої рекомбінації, структури антирефлекторного покриття, а також мобільності зарядів на ефективність органічної комірки. Для

кожного варіанту було отримано відповідні J-V криві, на основі яких проведено аналіз продуктивності пристроїв у різних режимах освітлення, включаючи темновий режим.

Мета роботи — дослідження та моделювання фотоелектричних властивостей органічних і неорганічних сонячних комірок, визначення впливу геометричних, електрофізичних і зовнішніх параметрів на ефективність перетворення енергії та оптимізація конфігурацій для досягнення максимального PCE.

Завдання роботи — провести аналіз сучасних типів сонячних елементів на основі GaAs та D18:L8-BO, з урахуванням їхніх фізичних властивостей; реалізувати моделювання комірки GaAs у програмному середовищі OghmaNano, дослідити вплив товщини шару, концентрації домішок, температури та інтенсивності випромінювання, наявності антирефлектного покриття; змоделювати органічну сонячну комірку D18:L8-BO в середовищі OghmaNano з варіацією товщини активного шару, температури, мобільності зарядів та інтенсивності випромінювання; провести тестування в темряві та за різної інтенсивності освітлення, сформулювати вольт-амперні характеристики для кожного сценарію; побудувати графіки залежностей основних характеристик (V_{oc} , J_{sc} , FF, PCE) від параметрів моделювання; порівняти отримані результати і надати рекомендації для підвищення ефективності сонячних елементів обох типів.

РОЗДІЛ 1.

ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

1.1. Розвиток технологій сонячних елементів

Зростання світового споживання енергії та необхідність зменшення залежності від викопних палив та посилення екологічних викликів спричинили активний розвиток відновлюваної енергетики. Одним із найперспективніших напрямів є використання сонячних елементів, які дозволяють перетворювати енергію сонячного випромінювання у постійний електричний струм. Вони не лише сприяють зниженню викидів парникових газів, а й забезпечують енергетичну незалежність та можливість використання у віддалених регіонах, де традиційні джерела електроенергії недоступні.

Розвиток сонячної енергетики став можливим завдяки вдосконаленню напівпровідникових матеріалів і конструкцій фотоелектричних пристроїв. Залежно від використовуваного матеріалу, сонячні елементи відрізняються за ефективністю, вартістю виробництва, стабільністю та можливостями застосування. Кремнієві сонячні панелі залишаються домінуючими на ринку завдяки їхній високій стабільності та відносно зрілим технологіям виготовлення, проте вони мають обмежену ефективність та потребують великих ресурсів для виробництва.

Альтернативні технології, такі як арсенід-галієві (GaAs), перовськітні та органічні сонячні елементи, розширюють можливості використання фотоелектричних пристроїв. GaAs-комірки демонструють вищу ефективність у порівнянні з кремнієвими, проте їхнє масове застосування обмежене через високу вартість виробництва. Перовськітні матеріали мають потенціал для досягнення ефективності понад 30%, але проблема їхньої стабільності залишається актуальною. Органічні сонячні елементи, завдяки можливості низьковартісного

виробництва, легкості та гнучкості, відкривають перспективи для створення нових форм фотоелектричних пристроїв, проте їхня ефективність поки що поступається традиційним матеріалам [2; 3].

Основний принцип роботи сонячних елементів базується на внутрішньому фотоелектричному ефекті. При поглинанні фотона з енергією, що перевищує ширину забороненої зони (E_g) матеріалу, електрон переходить із валентної зони у зону провідності, утворюючи пару електрон-дірка. Енергія фотонів, що можуть бути поглинуті матеріалом, визначається за законом Планка:

$$E = \frac{hc}{\lambda} \quad (1.1)$$

де h – стала Планка (6.626×10^{-34} Дж·с), c – швидкість світла (3.00×10^8 м/с), λ – довжина хвилі падаючого світла.

Ширина забороненої зони матеріалу визначає його спектральну чутливість. Для кремнію ($E_g = 1.12$ еВ) ефективне поглинання відбувається у діапазоні 300–1100 нм, а для GaAs ($E_g = 1.42$ еВ) – у діапазоні 300–870 нм.

Коефіцієнт корисної дії (η) сонячного елемента визначається за співвідношенням:

$$\eta = \frac{P_{\max}}{P_{\text{сонця}}} \quad (1.2)$$

де $P_{\max}$ – максимальна потужність, що може бути отримана від елемента, а $P_{\text{сонця}}$ – потужність падаючого сонячного випромінювання, стандартне значення якого становить 1000 Вт/м².

Згідно з даними NREL (National Renewable Energy Laboratory), ефективність сучасних сонячних елементів може досягати таких значень [4]:

- Кремнієві монокристалічні – 26.8%.
- GaAs-комірки – 29.1%.
- Перовськітні комірки – 25.7%.
- Органічні сонячні елементи – 19.2%.

Сучасні дослідження спрямовані на розширення можливостей сонячних технологій, зокрема на підвищення ефективності перетворення енергії, збільшення терміну служби матеріалів та зниження вартості виробництва. Особлива увага приділяється тонкоплівковим та органічним фотоелектричним пристроям, які можуть відкрити нові можливості для інтеграції сонячних технологій у повсякденне життя [5; 6].

1.2. Порівняння різних типів сонячних елементів

Різні типи сонячних елементів мають унікальні фізико-хімічні властивості, які визначають їхню ефективність, вартість виробництва та можливі сфери застосування. Кремнієві комірки залишаються основним рішенням для комерційних та побутових електростанцій завдяки поєднанню стабільності та добре розвиненої технології виготовлення. Напівпровідникові матеріали III-V групи, зокрема арсенід галію (GaAs), забезпечують найвищі показники ефективності, що робить їх незамінними для космічних технологій та високотехнологічних додатків.

Перовськітні сонячні елементи демонструють високий потенціал завдяки дешевизні та легкості виготовлення, проте їхня стабільність поки що обмежує широке комерційне застосування. Органічні та тонкоплівкові сонячні елементи пропонують новий підхід до фотоелектрики завдяки можливості виробництва гнучких, легких і напівпрозорих панелей, що відкриває перспективи для інтеграції в архітектуру та носимі пристрої.

При оцінці ефективності різних технологій слід враховувати, що всі типи сонячних елементів демонструють поступове зростання ККД з часом. Більш традиційні технології, такі як кремнієві та III-V напівпровідники, досягли свого сучасного рівня після десятиліть досліджень. Водночас, порівняно нові технології, зокрема органічні та перовськітні комірки, ще перебувають на

етапі активного розвитку, тому їхня ефективність значно зростає з кожним роком, детально розвиток технології наведено ??fig:1.1. Протягом останнього десятиліття ефективність органічних сонячних елементів зросла більш ніж удвічі, а перовськітні комірки вперше перевищили поріг у 25% лише у 2020-х роках [7].

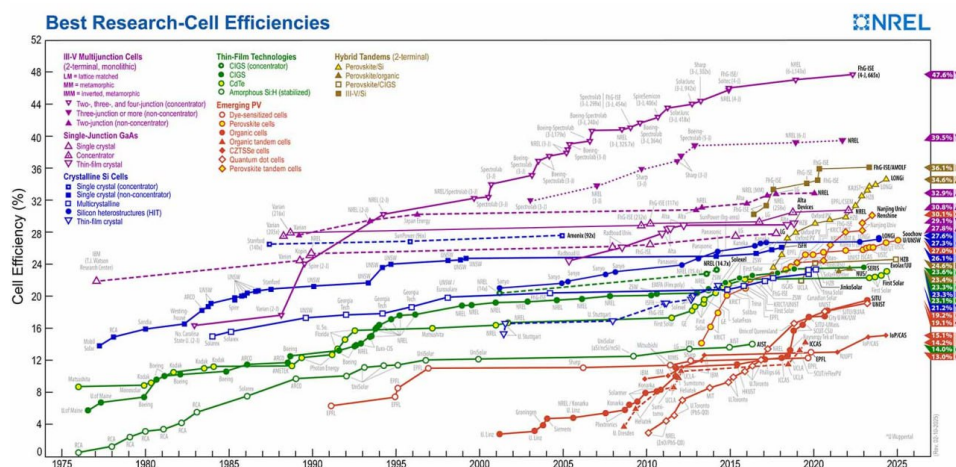


Рис. 1.1. Ріст ефективності комірок з плином часу [8].

У цьому підрозділі розглянуто основні типи сонячних елементів, їхні переваги, обмеження та області застосування, що дозволить сформуванати більш об'єктивне уявлення про поточний стан технології та перспективи її розвитку.

1.2.1. Кремнієві сонячні елементи – класичний підхід

Кремнієві сонячні елементи є найпоширенішою технологією у фотоелектриці та становлять основу сучасного ринку сонячних панелей. Це зумовлено поєднанням високої стабільності, довговічності та добре розвиненої промислової бази виробництва. Завдяки масштабному виготовленню кремнієвих пластин, технологія значно здешевилася за останні десятиліття, а розвиток методів пасивації та покращення якості матеріалу дозволили підвищити ефективність до рекордних значень. На 2023 рік кремнієві сонячні елементи займають понад 95% ринку фотоелектричних пристроїв [9].

Принцип роботи кремнієвих комірок базується на утворенні р-п переходу, в якому під дією сонячного випромінювання генеруються електронно-діркові пари. При цьому ефективність перетворення енергії значною мірою визначається шириною забороненої зони кремнію, що становить 1.12 еВ. Це забезпечує ефективне поглинання випромінювання у спектральному діапазоні 300–1100 нм, що відповідає значній частині сонячного спектра. Однак низький коефіцієнт поглинання в ближньому інфрачервоному діапазоні вимагає використання відносно товстих шарів матеріалу (150–200 мкм), що збільшує матеріальні витрати та енергоємність виробництва [10].

Однією з головних переваг кремнієвих сонячних елементів є їхня стабільність, що забезпечує тривалий термін експлуатації (20–30 років) без суттєвого зниження ефективності. Крім того, технологія виготовлення кремнієвих панелей добре відпрацьована, що дозволяє зменшувати собівартість виробництва завдяки масовому виготовленню. Висока квантова ефективність у видимому діапазоні також робить ці елементи ефективними для стандартних умов освітлення.

Проте кремнієві фотоеlementи мають ряд фізичних обмежень. Одним із головних є теоретична межа ефективності одноперехідних кремнієвих комірок, яка становить приблизно 29.4% відповідно до межі Шоклі-Квайссера. Це обмеження пояснюється тим, що частина фотонів із енергією, нижчою за ширину забороненої зони, не може генерувати електронно-діркові пари, тоді як фотони з надлишком енергії спричиняють нагрів матеріалу замість ефективного утворення зарядів.

Ще однією проблемою є втрати енергії через рекомбінацію носіїв заряду, що особливо проявляється у багатокристалічних кремнієвих панелях. Для зменшення цих втрат застосовують технології пасивації дефектів поверхні, зокрема методи атомно-шарового осадження (ALD) і осадження за допомогою плазмохімічного осадження з парової фази (PECVD). Використання тексту-

рованих поверхонь також сприяє зниженню відбиття світла та покращенню поглинання фотонів.

На сьогодні найкращі лабораторні зразки монокристалічного кремнію досягли ефективності 26.8%, що наближається до його граничного значення [4]. Це свідчить про те, що можливості подальшого вдосконалення традиційних кремнієвих сонячних елементів обмежені, а майбутній розвиток технології зосереджений на комбінованих структурах.

Хоча кремнієві сонячні елементи залишаються "золотим стандартом" у фотоелектриці, їхня технологія поступово досягає фізичних меж. Подальший розвиток зосереджений на підвищенні довговічності, зниженні виробничих витрат і інтеграції з новими матеріалами для подолання фундаментальних обмежень ефективності.

1.2.2. Арсенід-галієві (GaAs) сонячні елементи

Арсенід галію (GaAs) є одним із найперспективніших матеріалів для створення високоефективних сонячних елементів завдяки своїм унікальним напівпровідниковим властивостям. Висока рухливість носіїв заряду, великий коефіцієнт поглинання світла та радіаційна стійкість роблять GaAs ключовим матеріалом для аерокосмічних застосувань і концентраторних фотоелектричних систем.

Ширина забороненої зони GaAs становить 1.42 eV, що є оптимальним значенням для ефективного поглинання сонячного випромінювання в діапазоні 300–870 нм. Завдяки високому коефіцієнту поглинання світла GaAs дозволяє виготовляти сонячні елементи з товщиною активного шару всього 1–2 мкм, що значно менше, ніж у кремнієвих панелях (150–200 мкм) [11]. Висока рухливість електронів ($\mu_e \approx 8500 \text{ cm}^2/\text{Vs}$) та дірок ($\mu_h \approx 400 \text{ cm}^2/\text{Vs}$) у 10–100 разів

перевищує аналогічні значення для кремнію, що знижує внутрішні опірні втрати та підвищує ефективність пристрою [10].

Однак, незважаючи на ці переваги, широке застосування GaAs у фотоелектриці обмежене через високу вартість виробництва та складність масштабування технології. Основні методи вирощування високоякісних GaAs-плівок, такі як LP-MOCVD (низькотемпературне металорганічне хімічне осадження з парової фази) та PE-CVD (плазмо-хімічне осадження), вимагають складного обладнання та дорогих вихідних матеріалів [12]. Додатково, GaAs-чипи важко вирощувати на великих підкладках через значну кількість структурних дефектів, що знижує вихід придатної продукції.

У бакалаврській роботі було проведено чисельне моделювання процесу росту тонких плівок GaAs методами LP-MOCVD та PE-CVD, що дозволило оцінити вплив параметрів осадження на якість матеріалу [13]. Додатково, у публікації [14] було виконано моделювання інфрачервоного світлодіода на основі GaAs, що підтвердило високу ефективність цього матеріалу для оптоелектроніки. Логічним продовженням цих досліджень було створення чисельної моделі сонячного елемента GaAs,

Однією з ключових областей застосування GaAs-сонячних елементів є космічні апарати, де вони демонструють високу стійкість до радіації та екстремальних температурних умов. Завдяки низькому рівню радіаційно-індукованих дефектів GaAs-комірки можуть зберігати понад 90% початкової ефективності навіть після тривалого перебування в космосі, що робить їх основним вибором для супутникових енергетичних систем [15].

1.2.3. Перовськітні сонячні елементи – нова ера фотоелектрики

Перовськітні сонячні елементи (PSC) є однією з найперспективніших фотоелектричних технологій завдяки високій ефективності та низькій вартості

виробництва. Ці пристрої базуються на кристалічних матеріалах із загальною формулою ABX_3 , де А – органічний або неорганічний катіон (наприклад, метиламоній $CH_3NH_3^+$ або цезій Cs^+), В – металевий катіон (Pb^{2+} , Sn^{2+}), а Х – галогенний аніон (I^- , Br^- , Cl^-) [16].

Головною перевагою PSC є висока ефективність: сучасні лабораторні зразки демонструють ККД до 26.1%, що робить їх конкурентоспроможними з кремнієвими та GaAs-комірками [4]. На відміну від кремнію, який потребує високотемпературного виробництва, перовськітні шари можна осаджувати за кімнатної температури методами спіноутингу або хімічного осадження з розчину, що значно знижує виробничі витрати [17].

Важливою особливістю перовськітів є їхня висока гнучкість: завдяки тонкоплівковій структурі та можливості нанесення на легкі й прозорі підкладки вони можуть бути використані для створення гнучких і напівпрозорих сонячних елементів. Це відкриває нові можливості для інтеграції в архітектуру, мобільні пристрої та носиму електроніку.

Попри ці переваги, комерціалізація PSC залишається обмеженою через низку проблем, основними з яких є:

1. Низька стабільність і деградація під впливом вологи, кисню та температури. Органічні катіони (наприклад, метиламоній) легко деградують у присутності вологи, що спричиняє руйнування кристалічної структури. Дослідження показують, що вологість понад 50% може знизити ККД PSC більш ніж на 30% за декілька днів [16]. Для подолання цієї проблеми розробляються стабільніші неорганічні перовськіти ($CsPbI_3$, $CsPbBr_3$) та герметичні захисні покриття.

2. Міграція іонів усередині перовськітної решітки, що з часом погіршує продуктивність. Йонна рухливість Pb^{2+} і I^- призводить до утворення внутрішніх дефектів і поступового зменшення ефективності [18]. Використання стабільніших металів (Sn^{2+} замість Pb^{2+}) може частково зменшити цю проблему.

3. Наявність токсичних елементів (свинцю, Pb, що обмежує екологічну безпеку. Розробляються альтернативні свинцеві та безсвинцеві перовськіти (Sn, Bi), проте їх ефективність поки що нижча.

Через ці фактори дослідники активно працюють над стабілізацією PSC, і прогнозується, що у найближчі роки стабільність цих пристроїв може бути значно покращена завдяки комбінованим підходам (модифікація кристалічної структури, оптимізація покриттів, багат шарові гібридні комірки).

Перовськітні матеріали також активно досліджуються у поєднанні з іншими фотоелектричними технологіями. Зокрема, тандемні комірки "перовськіт-кремній" вже досягли ККД 31.3% у лабораторних умовах [4]. Такі пристрої дозволяють комбінувати переваги обох матеріалів, забезпечуючи високу ефективність за збереження доступної вартості виробництва.

Хоча перовськітні сонячні елементи мають значний потенціал, їхні проблеми зі стабільністю поки що ускладнюють повноцінну комерціалізацію. У цьому контексті органічні сонячні елементи можуть стати як альтернативою, так і доповненням до PSC. Органічні сонячні елементи мають схожі переваги – легкість, гнучкість, низьку вартість виробництва – але відзначаються кращою стабільністю за певних умов. Подальші дослідження спрямовані на пошук гібридних структур, які могли б поєднувати переваги перовськітних і органічних матеріалів у нових поколіннях сонячних елементів.

1.2.4. Органічні сонячні елементи – шлях до гнучкої електроніки

Органічні сонячні елементи (OSC) є перспективною технологією для мобільних, носимих та інтегрованих фотоелектричних пристроїв завдяки унікальним фізико-хімічним властивостям органічних напівпровідників. Вони складаються з тонких шарів органічних полімерів або малих молекул, здатних поглинати сонячне світло і перетворювати його на електричний струм.

Основною перевагою OSC є їхня гнучкість, що дозволяє виготовляти напівпрозорі сонячні панелі, наносити їх на пластик, текстиль або скло, а також створювати пристрої для носимої електроніки [2]. Важливою перевагою є також можливість виробництва методом рулонного друку, що значно зменшує собівартість порівняно з кремнієвими або GaAs-комірками [5]. Крім того, вони мають меншу вагу, що робить їх особливо привабливими для застосувань в авіації, космічній галузі та для портативних пристроїв [3]. Оскільки органічні матеріали не містять токсичних важких металів, таких як свинець, який є у складі багатьох перовськітних фотоелементів, їх виробництво вважається екологічно безпечнішим [19].

Попри ці переваги, технологія органічних фотоелементів ще не досягла рівня ефективності кремнієвих чи GaAs-комірок. Сучасні лабораторні зразки OSC мають ККД у межах 18-19%, що поступається традиційним кремнієвим коміркам (близько 25%) та GaAs-пристроєм (до 29%) [4]. Однак варто зазначити, що ця технологія є значно молодшою, і її ефективність швидко зростає – для порівняння, у 2010 році OSC мали ККД лише 7-8%. Однією з головних проблем є їхній короткий термін служби, оскільки органічні полімери схильні до фотохімічної деградації під впливом ультрафіолетового випромінювання, вологи та кисню. Для розв'язання цієї проблеми активно розробляються методи енкапсуляції та нові стабільніші матеріали, такі як Y6-донори [19]. Ще однією особливістю органічних фотоелементів є механізм перенесення заряду, який відрізняється від традиційних неорганічних напівпровідників. Органічні матеріали мають екситонну природу поглинання світла: фотоактивні шари генерують зв'язані електрон-діркові пари (екситони), які потребують додаткової енергії для розділення [6].

Хоча органічні сонячні елементи мають певні обмеження, вони швидко розвиваються. У 2023 році досягнуто рекордного ККД у 19.2%, а прогнозується, що в найближчі 5-10 років OSC зможуть перевищити 22-24% за рахунок нових матеріалів, покращених донорно-акцепторних пар та інженерії інтерфейсів

[4]. Органічні сонячні елементи мають ключову роль у розробці гібридних фотоелектричних пристроїв, таких як тандемні OSC-перовськітні комірки, що поєднують переваги обох технологій і вже демонструють ККД понад 23%. Крім того, ця технологія має значний потенціал у фотовольтаїці для носимої електроніки, створенні напівпрозорих сонячних панелей для мобільних пристроїв та інтеграції у текстиль. Також розглядається можливість використання OSC у біомедичних застосуваннях, зокрема для живлення імплантів та біосенсорів. Таким чином, органічні сонячні елементи є не просто альтернативною фотоелектричною технологією, а перспективним напрямком для розвитку мобільних, інтегрованих та екологічних рішень.

1.3. Опис та порівняння програмного забезпечення для моделювання сонячних елементів

Моделювання сонячних елементів є ключовим етапом у їх розробці, оскільки дозволяє аналізувати електронні, теплові та оптичні процеси без необхідності виготовлення фізичних зразків. У цьому дослідженні розглянуто два програмні середовища: COMSOL Multiphysics, яке є універсальним комерційним інструментом для кінцево-елементного моделювання, та OghmaNano, що спеціалізується на органічних і тонкоплівкових сонячних елементах та є відкритим програмним забезпеченням.

1.3.1. COMSOL Multiphysics – кінцево-елементне моделювання сонячних елементів

COMSOL Multiphysics є комерційним програмним забезпеченням, що використовує метод кінцевих елементів (FEM) для розв'язання складних фізичних рівнянь. Це дозволяє проводити моделювання багат шарових сонячних еле-

ментів у двовимірному просторі з урахуванням електричних, оптичних та теплових ефектів.

Моделювання базується на розв'язанні рівнянь, які описують процеси перенесення заряду у напівпровідникових структурах.

Рівняння Пуассона описує розподіл електростатичного потенціалу V у структурі:

$$\nabla \cdot (\varepsilon \nabla V) = -\rho \quad (1.3)$$

де ε – діелектрична проникність матеріалу, а об'ємний заряд визначається як:

$$\rho = q(p - n + N_D^+ - N_A^-) \quad (1.4)$$

Рівняння дрейф-дифузії для перенесення заряду виражаються так:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \nabla \cdot (D_n \nabla n - \mu_n n \nabla V) + G - R \quad (1.5)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \nabla \cdot (D_p \nabla p + \mu_p p \nabla V) + G - R \quad (1.6)$$

де D_n, D_p – коефіцієнти дифузії електронів і дірок, μ_n, μ_p – рухливості носіїв, G – швидкість генерації носіїв під дією світла, R – швидкість рекомбінації.

Модель рекомбінації Shockley-Read-Hall (SRH) враховує рекомбінацію через пастки:

$$R_{SRH} = \frac{np - n_i^2}{\tau_p(n + n_t) + \tau_n(p + p_t)} \quad (1.7)$$

де n_i – власна концентрація носіїв, τ_n, τ_p – часи життя електронів і дірок, n_t, p_t – концентрації пасток.

Для розрахунку поглинання світла у сонячних елементах використовується рівняння Максвелла:

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) - k_0^2 \varepsilon_r \mathbf{E} = 0 \quad (1.8)$$

де $\mathbf{E}$ – електричне поле світлової хвилі, k_0 – хвильове число, ε_r – відносна діелектрична проникність матеріалу.

Нагрівання напівпровідникової структури враховується рівнянням теплопровідності:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) + Q \quad (1.9)$$

де T – температура, ρ – густина матеріалу, C_p – теплоємність, k – теплопровідність, Q – джерело тепла (джоулевий нагрів або поглинання світла).

COMSOL дозволяє розв'язувати рівняння Пуассона, дрейф-дифузії та Shockley-Read-Hall, інтегруючи електричні, оптичні та теплові ефекти в одній моделі. Він підтримує моделювання багатошарових структур у двовимірному просторі. Однак використання COMSOL вимагає значних обчислювальних ресурсів, а також не має вбудованих моделей екситонного перенесення для органічних сонячних елементів. Також проблемою є те, що дане програмне забезпечення є комерційним і відсутнє у відкритому доступі.

Таким чином, COMSOL є ефективним інструментом для класичних напівпровідникових сонячних елементів, але його застосування для органічних матеріалів потребує додаткових модифікацій моделей.

1.3.2. OghmaNano – опенсорсний софт для органічних та тонкоплівкових сонячних елементів

OghmaNano є відкритим програмним забезпеченням, розробленим для моделювання органічних і тонкоплівкових сонячних елементів. Його ключова особливість — використання методу кінцевих різниць (FDM), який забезпечує

ефективний чисельний розв'язок рівнянь, що описують перенесення носіїв заряду та екситонні процеси.

На відміну від COMSOL, який використовує метод кінцевих елементів (FEM), OghmaNano зосереджений на 1D і 2D-моделюванні, що дозволяє ефективно аналізувати багат шарові структури без необхідності розрахунково затратного 3D-моделювання. Це особливо корисно для органічних сонячних елементів (OSC), оскільки в них домінують екситонні ефекти, які ефективно описуються у двовимірних системах.

Програмне забезпечення дозволяє моделювати як органічні, так і неорганічні матеріали, включно з GaAs. Завдяки коректній реалізації рівнянь Пуассона, дрейф-дифузії та Shockley-Read-Hall, OghmaNano здатний точно відтворювати поведінку GaAs-комірок, забезпечуючи коректний розрахунок перенесення носіїв та рекомбінаційних процесів. Для органічних матеріалів він працює ще краще, оскільки враховує кінетику екситонів та специфіку переносу заряду в полімерних і молекулярних напівпровідниках.

Основні рівняння, що розв'язуються в OghmaNano:

1. Рівняння Пуассона

$$\nabla \cdot (\epsilon \nabla \varphi) = -\rho$$

Це рівняння визначає електростатичний потенціал усередині сонячного елемента, де ϵ — діелектрична проникність матеріалу, φ — електричний потенціал, а ρ — об'ємний заряд, що включає внески електронів, дірок та іонізованих домішок.

2. Рівняння неперервності для електронів і дірок (дрейф-дифузійні рівняння):

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot J_n + G - R$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \nabla \cdot J_p + G - R$$

Де n і p — концентрації електронів і дірок відповідно, J_n і J_p — струми електронів і дірок, G — швидкість генерації носіїв під дією світла, R — швидкість рекомбінації.

3. Формула струму для носіїв заряду:

$$J_n = q\mu_n nE + qD_n \nabla n$$

$$J_p = q\mu_p pE - qD_p \nabla p$$

Де μ_n , μ_p — рухливості електронів і дірок, D_n , D_p — коефіцієнти дифузії, $E = -\nabla\varphi$ — електричне поле.

4. Shockley-Read-Hall (SRH) рекомбінація:

$$R_{SRH} = \frac{np - n_i^2}{\tau_p(n + n_t) + \tau_n(p + p_t)}$$

Де τ_p , τ_n — часи життя носіїв заряду, n_t , p_t — концентрації пасток у напівпровіднику, n_i — власна концентрація носіїв.

5. Рівняння для екситонних процесів (важливе для органічних матеріалів):

$$\frac{\partial X}{\partial t} = G_X - R_X - \nabla \cdot J_X$$

Де X — концентрація екситонів, G_X — швидкість їх генерації, R_X — швидкість дисоціації та рекомбінації, J_X — потік екситонів.

Метод кінцевих різниць (FDM) простіший у реалізації, ніж метод кінцевих елементів (FEM), оскільки він оперує дискретизацією простору за регулярною сіткою, що полегшує формулювання чисельних схем. Водночас FEM є більш гнучким і точним для складних геометрій, але для типових сонячних елементів (як OSC або GaAs) обчислювальна ефективність FDM робить його кращим вибором [20].

OghmaNano також має перевагу в продуктивності: розрахунки виконуються швидше за рахунок оптимізованих алгоритмів обробки сітки, що дозволяє моделювати широкий діапазон параметрів і матеріалів без значного навантаження на обчислювальні ресурси. Це робить його особливо привабливим для моделювання нових типів сонячних елементів, де необхідно швидко оцінювати зміну ефективності при варіації товщини шарів, типів матеріалів або концентрації домішок.

Таблиця 1.1

Порівняння COMSOL та OghmaNano для моделювання сонячних елементів [21]

Програмне забезпечення	Розмірність	Чисельний метод	Основна сфера застосування	Тип моделювання
COMSOL	1D/2D/3D	Метод кінцевих елементів (FEM)	Універсальне, мультифізичні задачі	Електроніка, теплофізика, оптика
OghmaNano	1D/2D	Метод кінцевих різниць (FDM)	Органічні та тандемні сонячні елементи	Екситонні ефекти, дрейф-дифузія, напівпровідники

Таким чином, OghmaNano є потужним інструментом для моделювання як органічних, так і GaAs-сонячних комірок. Він ефективно вирішує необхідні рівняння, забезпечуючи точний аналіз переносу заряду та рекомбінаційних процесів. Завдяки своїй швидкості й простоті, він є ідеальним вибором для дослідження нових матеріалів і структур, де важливо швидко оцінити ефективність сонячного елемента.

1.4. Принцип роботи органічного сонячного елемента

Органічні сонячні комірки функціонують за принципом перетворення енергії фотонів у електричну енергію за допомогою органічних напівпровідникових матеріалів. Ключовими фізичними процесами, які забезпечують генерацію електричного струму в органічних комірках, є поглинання світла, утворення екситонів, розділення заряду, транспортування носіїв заряду та їх збирання

на електродах. Принципова схема сонячного органічного елементу наведена на рис. 1.2.

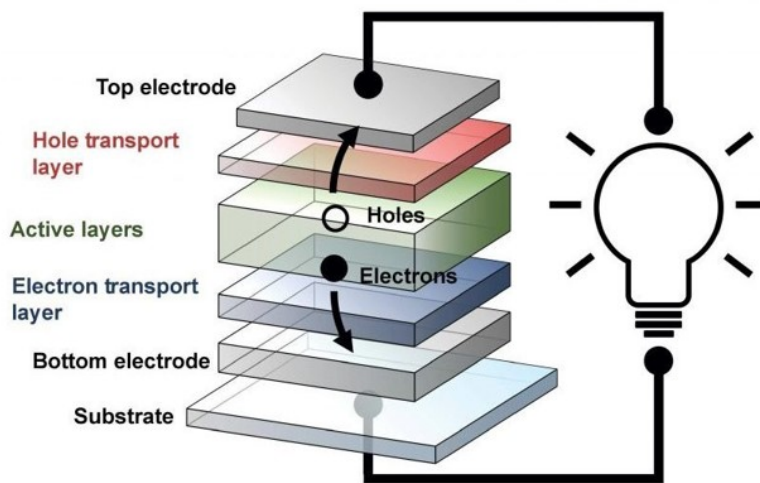


Рис. 1.2. Схема органічного сонячного елементу.

Після поглинання світла органічним матеріалом відбувається генерація збудженого стану — екситону, який являє собою зв'язану пару електрона та дірки. На відміну від неорганічних напівпровідників, де фотони одразу створюють вільні носії заряду, в органічних матеріалах спочатку утворюються саме екситони через низьку діелектричну проникність. Для подальшого перетворення в електричний струм ці екситони повинні бути ефективно розділені.

Розділення заряду відбувається на межі між донорним і акцепторним компонентами активного шару. Електрон переходить у матеріал з нижчим рівнем енергії, утворюючи пару вільних носіїв заряду — електрона і дірки. Ці носії потім транспортуються до відповідних електродів через шари, які забезпечують селективний транспорт електронів і дірок.

Ефективність процесу залежить від кількох факторів: довжини дифузії екситонів, енергії розділення, рухливості носіїв заряду та швидкості рекомбінації. Під час транспортування частина носіїв може рекомбінувати, що знижує вихідну потужність пристрою. У разі досягнення електродів, носії заряду створюють електричний струм у зовнішньому колі.

Таким чином, робота органічної сонячної комірки ґрунтується на послідовності процесів, кожен з яких критично впливає на загальну ефективність: від фотогенерації до збирання носіїв заряду. Ефективне управління екситонною динамікою, зменшення втрат на рекомбінацію та підвищення селективності шарів транспортування є ключовими завданнями для оптимізації роботи OSC.

1.4.1. Матеріали для органічних тонкоплівкових сонячних елементів

Ефективність органічних тонкоплівкових сонячних елементів (ОТСЕ) безпосередньо залежить від вибору матеріалів для активного шару. Основними компонентами є донорні та акцепторні матеріали, які утворюють донорно-акцепторний гетероперехід, необхідний для ефективного розділення носіїв заряду.

Значний прогрес у розробці органічних сонячних елементів став можливим завдяки удосконаленню полімерних донорів та фулеренових акцепторів, що дозволяє підвищити коефіцієнт перетворення енергії (PCE) до понад 14%. Одним із найуспішніших поєднань у сучасних дослідженнях є донор D18 та акцептор L8-BO, що застосовується у цій роботі.

На Рис. 1.3 зображено основні полімерні матеріали та фулеренова похідна, які традиційно використовувалися в органічних сонячних елементах.

Донорний матеріал є основною частиною активного шару, що поглинає світло та генерує екситони. Його основні характеристики:

- Висока рухливість дірок, що забезпечує ефективний перенесення заряду.
- Широкий спектр поглинання, особливо в діапазоні 400–800 нм.
- Стабільність у робочих умовах та хороша розчинність для технології друку.

В історичному розвитку ОТСЕ широко використовувалися такі матеріали:

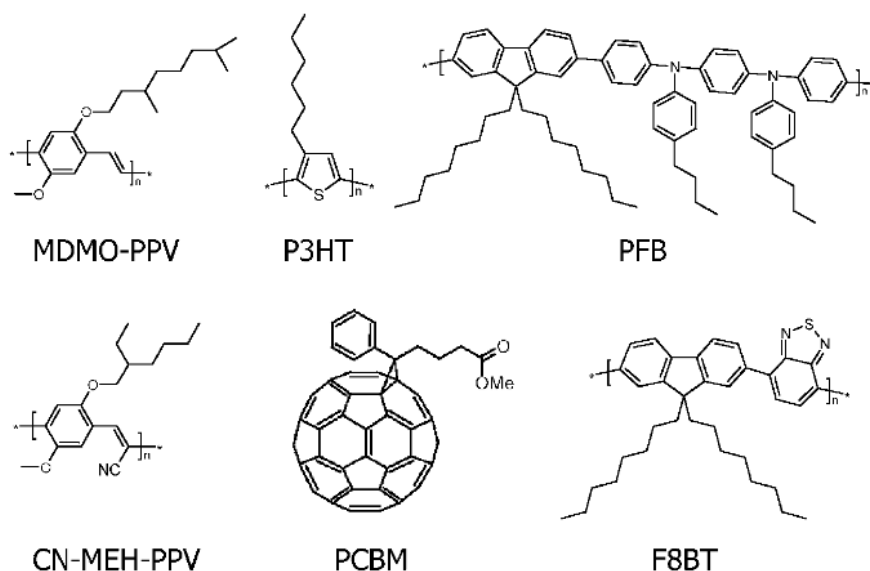


Рис. 1.3. Кон'юговані полімери та похідні фулерену, які використовуються в органічних сонячних елементах [22].

P3HT (Poly(3-hexylthiophene-2,5-diyl)):

- Висока кристалічність і рухливість носіїв заряду.
- Відносно низька ширина забороненої зони (1.9 eV).
- Використовувався у ранніх пристроях із PCBM (PCE 3-5%).

MDMO-PPV (Poly[2-methoxy-5-(3,7-dimethyloctyloxy)]-1,4-phenylenevinylene):

- Добра розчинність і простота у виробництві.
- Вузкий спектр поглинання, що обмежує ефективність.

PFB (Poly(9,9'-dioctylfluorene-co-bis-N,N'-(4-butylphenyl)-bis-N,N'-phenyl-1,4-phenylenediamine)):

- Полімер із покращеними електронними властивостями.
- Рідше використовується через нижчу стабільність.

Полімер D18 – один із найперспективніших донорних матеріалів, розроблений для органічних сонячних елементів нового покоління.

Основні характеристики D18 це висока квантова ефективність поглинання у видимому діапазоні, оптимальне енергетичне узгодження з нефулереновими акцепторами, покращена морфологічна стабільність, що сприяє довговічності пристрою, висока рухливість носіїв заряду ($10^{-3} \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$).

D18 дозволяє значно підвищити ефективність порівняно з традиційними донорами, такими як P3HT, MDMO-PPV, PFB, що робить його одним із найкращих рішень для сучасних органічних сонячних елементів.

Акцепторні матеріали приймають електрони, що вивільняються при дисоціації екситонів, і забезпечують ефективний перехід носіїв заряду до електродів. Основні вимоги до акцепторів це низьке значення LUMO для ефективного захоплення електронів, висока рухливість електронів для мінімізації втрат енергії, оптимальне енергетичне узгодження з донором.

Акцептор L8-BO є представником нефулеренових акцепторів (NFAs), що демонструє значно вищу ефективність порівняно з традиційними фулереновими похідними.

Основні характеристики L8-BO:

- Вища ефективність дисоціації екситонів, ніж у фулеренів.
- Ширший спектр поглинання, що підвищує загальну ефективність сонячного елемента.
- Краща морфологічна стабільність, що зменшує процеси рекомбінації.

При використанні пари D18 + L8-BO вдалося досягти $PCE = 14.5\%$, що є одним із найкращих результатів для органічних сонячних елементів.

До появи нефулеренових акцепторів найпоширенішими були фулеренові похідні, такі як:

PCBM (1-(3-methoxycarbonyl)propyl-1-phenyl[6,6]C₆₀) - найвідоміший фулереновий акцептор:

- Висока рухливість носіїв заряду ($10^{-3} \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$)
- Вузький спектр поглинання, що обмежує ефективність пристроїв.

F8TB (Poly(9,9'-dioctylfluorene-co-benzothiadiazole)) - один із перших полімерних акцепторів, що отримав комерційне застосування, відзначався стабільністю, але поступався ефективністю нефулереновим матеріалам.

L8-BO перевершує PCBM завдяки кращому енергетичному узгодженню, нижчим втратам при перенесенні заряду та ширшому спектру поглинання.

Вибір матеріалів для органічних тонкоплівкових сонячних елементів є критично важливим для їх ефективності. Історично використовувалися фулеренові акцептори (PCBM) у поєднанні з класичними полімерними донорами (P3HT, MDMO-PPV), однак сучасні дослідження сфокусовані на розробці нефулеренових акцепторів (L8-BO, Y6) та нових ефективних полімерних донорів (D18, PTB7-Th). Перехід до нових матеріалів дозволяє підвищити ефективність органічних сонячних елементів до рівня, необхідного для комерційного застосування.

1.4.2. Енергетична структура органічних молекул (HOMO, LUMO, E_g)

Органічні напівпровідники, що використовуються в сонячних елементах, мають особливу електронну структуру, яка відрізняється від традиційних неорганічних напівпровідників. Вони складаються з окремих молекул або полімерних ланцюгів, у яких електронні рівні визначаються молекулярними орбіталями, а не безперервною зонною структурою. Найважливішими характеристиками таких матеріалів є рівні HOMO та LUMO, а також ширина забороненої зони (E_g).

Рівень HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) відповідає найвищій зайнятій молекулярній орбіталі, яка є аналогом валентної зони у неорганічних напівпровідниках. Відповідно, рівень LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) – це найнижча вільна орбіталь, що виконує роль зони провідності.

Ширина забороненої зони (E_g) визначається різницею між рівнями HOMO та LUMO і є критично важливим параметром, оскільки впливає на спектр поглинання світла та ефективність генерації носіїв заряду. Для органічних сонячних елементів оптимальне значення E_g зазвичай знаходиться в діапазоні 1.4 – 1.8 еВ, оскільки такий розмір енергетичної щілини дозволяє ефективно

поглинати видиме світло, при цьому мінімізуючи втрати енергії через теплову рекомбінацію.

Щоб органічний сонячний елемент ефективно генерував електричний струм, важливо правильно узгодити рівні НОМО та LUMO між різними компонентами активного шару. У типовій структурі донора та акцептора цей процес працює наступним чином:

1) Поглинання світла та збудження електрона

Коли фотон із достатньою енергією взаємодіє з органічним матеріалом, він може збудити електрон, переводячи його з рівня НОМО на рівень LUMO. Цей процес можливий, якщо енергія фотона відповідає або перевищує ширину забороненої зони. У результаті утворюється екситон – зв'язана пара електрона та дірки, яка зберігає певну кулонівську взаємодію через низьку діелектричну проникність органічних матеріалів.

2) Розділення екситонів та генерація носіїв заряду

Щоб отримати вільні носії заряду, екситон повинен дисоціювати. Для цього рівень LUMO донора має бути вищим, ніж рівень LUMO акцептора. Тоді електрон енергетично вигідно перейде на акцептор, а дірка залишиться в донорному матеріалі. Аналогічно, для ефективного перенесення дірок рівень НОМО донора повинен бути вищим, ніж рівень НОМО акцептора.

3) Перенесення зарядів і створення фотоструму

Після дисоціації екситонів вільні електрони та дірки транспортуються до відповідних електродів. Внутрішнє електричне поле, що виникає через різницю енергетичних рівнів, допомагає спрямовувати заряджені частинки в потрібному напрямку.

Різні органічні матеріали мають різні значення рівнів НОМО, LUMO та ширини забороненої зони. У Таблиці 1.2 наведені значення для деяких ключових матеріалів, зокрема донорного полімеру D18 та акцепторного матеріалу L8-BO, які використовуються у сучасних високоефективних сонячних елементах.

Таблиця 1.2

Енергетичні рівні HOMO, LUMO та E_g для різних органічних матеріалів.

Матеріал	HOMO (eV)	LUMO (eV)	E_g (eV)	Тип
D18	-5.52	-3.74	1.78	Донор
P3HT	-5.10	-3.20	1.90	Донор
MDMO-PPV	-5.30	-3.00	2.30	Донор
L8-BO	-5.64	-4.08	1.56	Акцептор
PCBM	-6.10	-3.90	2.20	Акцептор
ITIC	-5.68	-4.20	1.48	Акцептор

З таблиці видно, що полімер D18 має відносно вузьку заборонену зону ($E_g = 1.78$ eV), що дозволяє йому ефективно поглинати світло у широкому спектральному діапазоні. Водночас, акцептор L8-BO має нижчий рівень LUMO (-4.08 eV), що сприяє ефективному перенесенню електронів від донора до акцептора, мінімізуючи енергетичні втрати.

Різниця між рівнями HOMO донора та LUMO акцептора визначає максимальну можливу відкрита напругу (V_{OC}) сонячного елемента. Вона оцінюється за формулою:

$$qV_{OC} \approx E_{\text{HOMO}}^D - E_{\text{LUMO}}^A - E_{\text{втрати}} \quad (1.10)$$

де $E_{\text{втрати}}$ враховує теплові та рекомбінаційні втрати і зазвичай знаходиться в межах $0.3 - 0.5$ eV.

Для системи D18:L8-BO можна розрахувати теоретичне значення V_{OC} :

$$V_{OC} \approx \frac{(-5.52) - (-4.08) - 0.3}{q} = 1.14 \text{ В} \quad (1.11)$$

Реальні експерименти показують, що відкритий струм для таких систем зазвичай становить близько $0.9 - 1.0$ В, що підтверджує важливість правильного вибору матеріалів для досягнення високої ефективності органічних сонячних елементів.

Енергетична структура органічних матеріалів відіграє вирішальну роль у роботі сонячних елементів. Оптимальне узгодження рівнів HOMO та LUMO донора й акцептора дозволяє ефективно генерувати та транспортувати носії заряду.

1.5. Висновки до розділу 1

У цьому розділі було розглянуто сучасні підходи до моделювання сонячних елементів, зокрема органічних (OSC) неорганічних GaAs структур. Проведено аналіз фізичних основ роботи таких елементів, визначено їхні переваги та недоліки, а також обґрунтовано вибір підходу до моделювання.

Розглянуто особливості органічних сонячних елементів, які, попри нижчу ефективність порівняно з GaAs, мають значні перспективи завдяки гнучкості, легкості, низькій вартості виробництва та екологічності. Основними викликами для OSC є короткий термін служби через деградацію полімерів та складність процесів розділення носіїв заряду через екситонну природу переносу заряду. Водночас, постійний розвиток матеріалів та технологій дозволяє очікувати поступового підвищення ефективності таких елементів.

Детально розглянуто програмні засоби для моделювання сонячних елементів, що дозволяють описати електронні та теплові процеси в активному шарі та на межах поділу матеріалів. Було проведено порівняльний аналіз COMSOL Multiphysics та OghmaNano, які використовують різні чисельні методи: COMSOL базується на методі кінцевих елементів (FEM) тоді як OghmaNano використовує метод кінцевих різниць (FDM), що добре підходить для ефективного моделювання тонкоплівкових і органічних сонячних елементів. Встановлено, що OghmaNano ефективно справляється з моделюванням GaAs-сонячних комірок та особливо добре підходить для аналізу органічних структур, завдяки

можливості врахування екситонних ефектів та меншій вимозі до обчислювальних ресурсів.

На основі проведеного аналізу визначено матеріали для подальшого дослідження. У наступному розділі буде розглянуто створення моделей сонячних комірок на основі арсеніду галію (GaAs) та органічного напівпровідника D18:L8-BO.

РОЗДІЛ 2.

МАТЕРІАЛИ ТА МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕНЬ

Моделювання сонячних комірок GaAs та органічної комірки D18:L8-BO

Цей розділ присвячено моделюванню сонячної комірки на основі галій-арсеніду (GaAs) та органічної комірки D18:L8-BO. Для дослідження використувалася комп'ютерна модель одновимірної структури комірки, що дозволяє точно аналізувати транспорт носіїв заряду, рекомбінаційні процеси та вплив параметрів матеріалів на ефективність перетворення енергії.

Об'єктом дослідження є сонячна комірка на основі напівпровідника GaAs. Моделювання проводилося з метою оптимізації конструктивних параметрів для покращення ефективності пристрою. Зокрема, варіювалася товщина емітерного шару (n-GaAs) у діапазоні від 0,1 до 1 $\mu\text{м}$ при чотирьох значеннях концентрації домішок: 1×10^{15} , 1×10^{16} , 1×10^{17} , $1 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Аналогічно, товщина шару поглинача (p-GaAs) змінювалася від 10 до 100 $\mu\text{м}$ при тих самих значеннях концентрації легування.

Також досліджувався вплив поверхневої рекомбінації носіїв заряду. У симуляції змінювалася швидкість рекомбінації на передній та задній межі пристрою від 10^2 до $10^7 \text{ см}^2/\text{с}$. Усі розрахунки виконувалися на основі дрейфово-дифузійної моделі з урахуванням оптичних та температурних ефектів.

Окремо виконано моделювання органічної сонячної комірки з активним шаром на основі суміші D18:L8-BO. Варіювалася товщина активного шару в межах 50–200 нм з метою аналізу балансу між поглинанням світла і рухливістю носіїв заряду. Було враховано змінну інтенсивність освітлення, починаючи зі стандартного спектру AM1.5G до повної темряви, а також вплив температури в межах 285–350 K.

Для кожного з досліджуваних режимів обчислювалися ключові фотоелектричні характеристики:

- J_{SC} — густина короткозамкненого струму (мА/см²), тобто максимальний струм, який може генерувати сонячна комірка за відсутності зовнішнього навантаження.
- V_{OC} — напруга холостого ходу (В), що відповідає максимальній напрузі комірки при відсутності зовнішнього струму.
- FF — заповнення фактору (англ. *fill factor*), який характеризує форму вольт-амперної характеристики і визначається як відношення максимальної потужності до добутку J_{SC} та V_{OC} :

$$FF = \frac{P_{\max}}{J_{SC} \cdot V_{OC}} \times 100\%$$

де $P_{\max}$ — максимальна потужність, що її здатна забезпечити сонячна комірка.

- PCE — коефіцієнт перетворення енергії (*Power Conversion Efficiency*), що визначає частку поглинутої сонячної енергії, яка перетворюється в електричну. Визначається як:

$$PCE = \frac{J_{SC} \cdot V_{OC} \cdot FF}{P_{\text{in}}} \times 100\%$$

де P_{in} — потужність вхідного випромінювання

Моделювання реалізовано шляхом чисельного розв'язання рівнянь перенесення заряду та рекомбінації у середовищі, що враховує фізичні параметри матеріалів, граничні умови та оптичне поглинання.

2.1. Математична модель

2.1.1. Сонячний елемент на основі GaAs

Моделювання сонячної комірки на основі GaAs у середовищі OghmaNano базується на фізичних процесах, характерних для неорганічних напівпровідників. Основною відмінністю від органічних сонячних елементів є висока рухливість носіїв заряду, відсутність екситонних ефектів у масштабах довжин дифузії, а також домінування рекомбінаційних процесів унаслідок механізмів Shockley-Read-Hall та радіаційної рекомбінації.

Для опису фізичних процесів використовується система рівнянь, що включає рівняння Пуассона, рівняння неперервності для електронів і дірок, дрейф-дифузійні рівняння для носіїв заряду та механізми генерації-рекомбінації.

Розподіл електростатичного потенціалу описується рівнянням Пуассона:

$$\nabla \cdot (\varepsilon_0 \varepsilon_r \nabla \varphi) = -q(p - n + N_D^+ - N_A^-), \quad (2.1)$$

де φ – електростатичний потенціал, В; ε_0 – діелектрична проникність вакууму, Ф/м; ε_r – діелектрична проникність матеріалу GaAs; q – заряд електрона, Кл; p, n – концентрації дірок і електронів відповідно, м^{-3} ; N_D^+, N_A^- – концентрації іонізованих донорів і акцепторів, м^{-3} .

Рух електронів і дірок у GaAs описується рівняннями струму:

$$J_n = q\mu_n nE + qD_n \nabla n, \quad (2.2)$$

$$J_p = q\mu_p pE - qD_p \nabla p. \quad (2.3)$$

де J_n, J_p – густини струму електронів і дірок, А/м²; μ_n, μ_p – рухливості електронів і дірок, м²/(В·с); E – електричне поле, В/м; D_n, D_p – коефіцієнти дифузії електронів і дірок, м²/с.

Зміна концентрації носіїв заряду враховується рівняннями неперервності:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot J_n + G - R_n, \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \nabla \cdot J_p + G - R_p. \quad (2.5)$$

де G – швидкість генерації носіїв заряду під дією світла, м⁻³с⁻¹; R_n, R_p – швидкості рекомбінації електронів і дірок відповідно, м⁻³с⁻¹.

Рекомбінаційні процеси у GaAs включають рекомбінацію через пастки (SRH), радіаційну рекомбінацію та Оже-рекомбінацію:

$$R_{\text{Auger}} = C_n n(np - n_i^2) + C_p p(np - n_i^2), \quad (2.6)$$

де C_n, C_p – коефіцієнти Оже-рекомбінації для електронів і дірок, м⁶/с. Найбільш вагомим механізмом у широкому діапазоні концентрацій носіїв є Shockley-Read-Hall-рекомбінація:

$$R_{\text{SRH}} = \frac{np - n_i^2}{\tau_p(n + n_t) + \tau_n(p + p_t)}. \quad (2.7)$$

де R_{SRH} – швидкість SRH-рекомбінації, м⁻³с⁻¹; n_i – власна концентрація носіїв у GaAs, м⁻³; τ_n, τ_p – середні часи життя електронів і дірок, с; n_t, p_t – концентрації пасткових станів, м⁻³.

Для GaAs характерною є радіаційна рекомбінація, що визначається рівнянням:

$$R_{\text{rad}} = B(np - n_i^2), \quad (2.8)$$

де B – коефіцієнт бімолекулярної рекомбінації, $\text{м}^3/\text{с}$.

Розглянута модель дозволяє точно описати фізичні процеси в сонячній комірці на основі GaAs, включаючи основні механізми генерації та рекомбінації носіїв заряду, що визначають ефективність перетворення енергії.

Рекомбінація на поверхні описується через:

$$R_s = S \cdot \Delta n, \quad (2.9)$$

де R_s — густина рекомбінації на поверхні, S — швидкість рекомбінації, Δn — надлишкова концентрація носіїв поблизу поверхні.

На межі р-п переходу враховується електростатичне поле та параметри переносу, зокрема ширина області просторового заряду (SCR), робота виходу та градієнти концентрацій. Транспорт носіїв описується дрейф-дифузійними рівняннями:

$$J_n = qn\mu_n E + qD_n \frac{dn}{dx}, \quad J_p = qp\mu_p E - qD_p \frac{dp}{dx}, \quad (2.10)$$

де J_n , J_p — струмові густини електронів і дірок; q — заряд електрона; μ — рухливість; D — коефіцієнт дифузії; E — електричне поле.

2.1.2. Сонячний елемент на основі D18:L8-BO

Побудова геометрії задачі здійснена з урахуванням необхідності оптимізації розрахункової області для досягнення високої точності обчислень за наявних обчислювальних потужностей. Моделювання органічної сонячної комірки на основі D18:L8-BO у середовищі OghmaNano ґрунтується на специфічних фізичних процесах, характерних для органічних напівпровідників. Основними особливостями OSC є низька рухливість носіїв заряду, генерація екситонів, які повинні дисоціювати перед утворенням вільних носіїв, наявність пасткових

станів, що впливають на кінетику перенесення заряду, а також високий рівень рекомбінаційних втрат у порівнянні з неорганічними сонячними елементами.

Для коректного опису цих процесів модель включає систему рівнянь, які описують розподіл електростатичного потенціалу, генерацію та дифузію екситонів, рух електронів і дірок через дрейф і дифузію, вплив пасткових станів та механізми рекомбінації носіїв заряду.

Розподіл електростатичного потенціалу в активному шарі описується рівнянням Пуассона:

$$\nabla \cdot (\varepsilon_0 \varepsilon_r \nabla \varphi) = -q(p - n + N_D^+ - N_A^-), \quad (2.11)$$

де φ – електростатичний потенціал, В; ε_0 – діелектрична проникність вакууму, Ф/м; ε_r – діелектрична проникність активного шару; q – заряд електрона, Кл; p, n – концентрації дірок і електронів відповідно, м^{-3} ; N_D^+, N_A^- – концентрації іонізованих донорів і акцепторів, м^{-3} .

Оскільки у OSC носії заряду утворюються через екситони, необхідно враховувати їхню генерацію, дифузію та дисоціацію. Динаміка екситонів описується рівнянням:

$$\frac{\partial X}{\partial t} = D_X \nabla^2 X - k_d X - k_f X p + G_X, \quad (2.12)$$

де X – концентрація екситонів, м^{-3} ; D_X – коефіцієнт дифузії екситонів, $\text{м}^2/\text{с}$; k_d – швидкість спонтанної дисоціації екситонів, $1/\text{с}$; k_f – коефіцієнт френелівської рекомбінації, $\text{м}^3/\text{с}$; G_X – швидкість генерації екситонів під дією світла, $\text{м}^{-3}\text{с}^{-1}$.

Після дисоціації екситонів утворюються вільні електрони та дірки, рух яких відбувається через дрейф у електричному полі та дифузію. Ці процеси описуються рівняннями струму для електронів і дірок:

$$J_n = q\mu_n n E + qD_n \nabla n, \quad (2.13)$$

$$J_p = q\mu_p p E - qD_p \nabla p. \quad (2.14)$$

де J_n, J_p – густини струму електронів і дірок, А/м²; μ_n, μ_p – рухливості електронів і дірок, м²/(В·с); E – електричне поле, В/м; D_n, D_p – коефіцієнти дифузії електронів і дірок, м²/с.

Органічні напівпровідники мають значну кількість пасткових станів, що зменшують рухливість носіїв. Вплив пасток враховується через ефективну рухливість:

$$\mu_e(n) = \frac{\mu_{0,e} n_{\text{free}}}{n_{\text{free}} + n_{\text{trap}}}, \quad (2.15)$$

$$\mu_p(p) = \frac{\mu_{0,p} p_{\text{free}}}{p_{\text{free}} + p_{\text{trap}}}. \quad (2.16)$$

де $n_{\text{free}}, p_{\text{free}}$ – концентрації вільних електронів і дірок, м⁻³; $n_{\text{trap}}, p_{\text{trap}}$ – концентрації пасткових станів, м⁻³; $\mu_{0,e}, \mu_{0,p}$ – номінальні рухливості в ідеальному випадку без пасток, м²/(В·с).

У органічних сонячних елементах домінує рекомбінація за механізмом Shockley-Read-Hall:

$$R_{\text{SRH}} = \frac{np - n_i^2}{\tau_p(n + n_t) + \tau_n(p + p_t)}. \quad (2.17)$$

де R_{SRH} – швидкість рекомбінації за механізмом SRH, м⁻³с⁻¹; n_i – власна концентрація носіїв у матеріалі, м⁻³; τ_n, τ_p – середні часи життя електронів і дірок, с; n_t, p_t – концентрації захоплених носіїв, м⁻³.

В органічних сонячних комірках р-п перехід реалізується у вигляді гетероструктури донор–акцептор. Тут немає класичного просторового заряду, однак ключову роль відіграє ефективність розділення екситонів на межі цих двох матеріалів. Основним параметром переходу є константа швидкості розділення k_{sep} :

$$R_{DA} = k_{\text{sep}} \cdot [\text{Exc}], \quad (2.18)$$

де $[\text{Exc}]$ — концентрація екситонів у межах довжини їх дифузії.

Поверхнева рекомбінація враховується на межах контакту активного шару з транспортними шарами PEDOT:PSS (дірковий транспорт) та PNDIT-F3N (електронний транспорт). Швидкість рекомбінації задається подібно до неорганічного випадку:

$$R_s = S \cdot \Delta n, \quad (2.19)$$

але з нижчими значеннями S через меншу рухливість носіїв та іншу морфологію межі. У багатьох моделях органічних сонячних комірок поверхнева рекомбінація зосереджена поблизу контактів і враховується через граничні умови на відповідних шарах.

Розглянута система рівнянь дозволяє детально змоделювати основні фізичні процеси в органічних сонячних елементах на основі D18:L8-BO. Особливістю цієї моделі є врахування екситонного транспорту, пасткових ефектів та SRH-рекомбінації, що суттєво впливає на ефективність пристрою.

2.2. Комп'ютерна модель

Побудова геометрії задачі здійснена з урахуванням потреби в оптимізації розрахункової області для отримання високої точності розрахунку на доступних обчислювальних потужностях. Оптимальним у такому випадку виявляється 2D - профіль, що і був побудований в окремій програмі OghmaNano. Усі необхідні системи рівнянь можливо вирішити в даному програмному забезпеченні. Моделювання сонячної комірки не є простою задачею, оскільки потребує детального вивчення усіх фізичних процесів, що відбуваються між відповідними шарами сонячної комірки.

Створення моделі складається з наступних етапів: детальне вивчення процесів взаємодії шарів комірки для обох варіантів, органічної комірки на основі D18:L8-BO та елементу з арсенід галію. Створення просторовозалежної моделі комірки з урахуванням переносу заряду, а саме дрейфу-дифузії, рекомбінації носіїв та розподілу електричного потенціалу. Для створення моделі необхідно виконати наступні кроки:

1) Почати нову симуляцію та з запропонованого переліку на рис.2.3 обрати відповідний тип моделювання. В нашому випадку це Organic Solar Cell та Tandem Solar Cell. Обрати відповідний матеріал для кожного з моделювань.

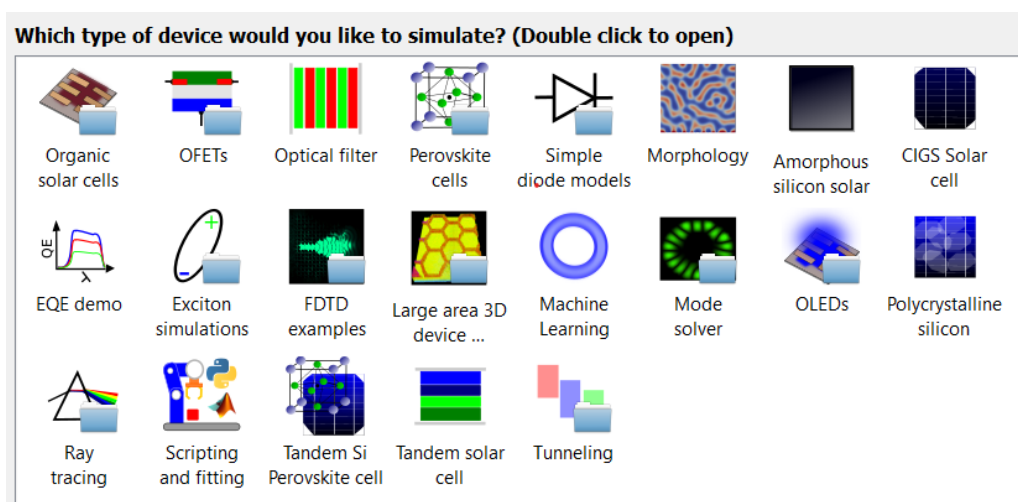


Рис. 2.1. Види девайсів, що можуть бути змодельовані.

2) Після того як була створена стандартна сонячна комірка необхідно задати товщину кожного шару, додаткові параметри для матеріалів, також обрати чи буде розв'язуватись теплова та оптична задачі.

3) Провести ряд тестів на чутливість для кожної з моделей для порівняння отриманих результатів.

Далі буде наведено детальне налаштування кожної з систем з граничними умовами, параметрами і додатковими опціями.

2.2.1. Сонячний елемент на основі GaAs

Для побудови достовірної моделі сонячної комірки на основі арсеніду галію (GaAs) було враховано всі ключові шари, які беруть участь у генерації, транспортуванні та зборі носіїв заряду. Основна структура комірки складається з емітерного шару n -GaAs, базового шару p -GaAs, буферного шару (BSF), а також фронтального і заднього контактів. Геометрія комірки представлена на рис. 2.2, а товщини відповідних шарів подані в таблиці 2.1.

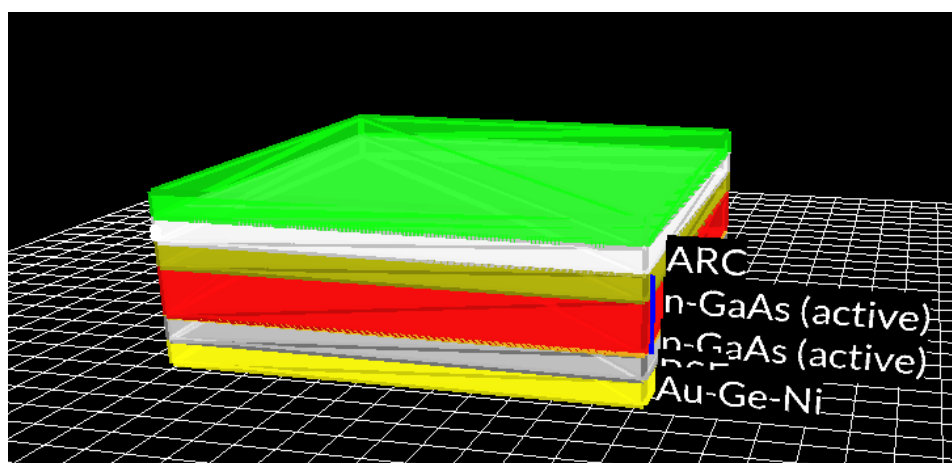


Рис. 2.2. Багатошарова структура сонячної комірки на основі GaAs.

Сонячна комірка на основі GaAs є гетероструктурним пристроєм із прямою забороненою зоною, що дозволяє ефективно поглинати світло навіть у тонких шарах. Умови освітлення відповідали стандартному спектру сонячного випромінювання із інтенсивністю 0.1 Вт/см^2 при температурі $T = 300 \text{ К}$.

Початкове легування базового шару p -GaAs становило $1 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$, а емітерного шару n -GaAs — $1 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Розглянемо функціональне призначення кожного шару:

Антирефлексне покриття (ARC) — наноситься на фронтальну поверхню комірки для зменшення втрат світла через відбиття. Зазвичай виготовляється з діелектричних матеріалів, що забезпечують інтерференційне приглушення відбиття.

Таблиця 2.1

Товщина шарів GaAs-сонячної комірки

Шар	Товщина (м)
Антирефлекторне покриття (ARC)	7.0×10^{-8}
<i>n</i> -GaAs (емітер)	$1.0 \times 10^{-7} - 1.0 \times 10^{-6}$
<i>p</i> -GaAs (база)	$1.0 \times 10^{-5} - 1.0 \times 10^{-4}$
Back Surface Field (BSF)	2.0×10^{-7}
Металевий задній контакт (Au-Ge-Ni)	1.0×10^{-6}

Емітерний шар (*n*-GaAs) — сильно легований шар, у якому фотогенеровані дірки рухаються до *p-n* переходу. Забезпечує формування електричного поля разом із базовим шаром, необхідного для розділення носіїв заряду.

Базовий шар (*p*-GaAs) — основна активна зона, де відбувається поглинання фотонів та генерація електронно-діркових пар. Цей шар зазвичай має більшу товщину, що забезпечує достатній об'єм поглинання світла.

Back Surface Field (BSF) — тонкий додатковий шар з вищою концентрацією домішок, що створює бар'єр для дірок, відштовхуючи їх від задньої поверхні та знижуючи рекомбінаційні втрати.

Металевий задній контакт (Au-Ge-Ni) — шар, що забезпечує електричний контакт із зовнішнім ланцюгом. Матеріал обирається з урахуванням сумісності з GaAs і необхідності формування низькоомного контакту.

Кожен із цих шарів оптимізується під час моделювання за товщиною, електричними параметрами та оптичними властивостями для досягнення максимальної ефективності пристрою.

Для оцінки продуктивності тандемної сонячної комірки на основі GaAs було проведено серію чисельних експериментів методом варіації ключових параметрів структури. У процесі моделювання змінювалися характеристики як емітерного (*n*-GaAs), так і базового (*p*-GaAs) шарів. Основна увага приді-

лялася зміні товщини та концентрації домішок, що безпосередньо впливають на ефективність поглинання, розділення та транспорту носіїв заряду.

У таблиці 2.2 наведено параметри, які варіювалися під час моделювання, а також діапазони зміни кожного з них.

Таблиця 2.2

Варійовані параметри структури GaAs-комірки.

Параметр	Діапазон зміни
Товщина емітерного шару	100 нм – 300 нм
Товщина базового шару	100 нм – 3000 нм
Концентрація легування емітера	$10^{16} \text{ см}^{-3} - 10^{18} \text{ см}^{-3}$
Концентрація легування	$10^{15} \text{ см}^{-3} - 10^{18} \text{ см}^{-3}$
Інтенсивність освітлення	0%, 50%, 75%, 100% від AM1.5G
Температура	285 K – 350 K

Окрім варіації геометричних та електрофізичних параметрів, проводився аналіз впливу змін інтенсивності освітлення — включно з умовами зниженого опромінення (до повної темряви), що дозволило дослідити адаптивність комірки до зовнішніх факторів. Додатково виконувалося моделювання при різних температурних умовах у діапазоні 285–350 K, що дозволило оцінити теплову стабільність пристрою та характер втрат на рекомбінацію за підвищених температур.

2.2.2. Сонячний елемент на основі D18:L8-BO

Для коректного моделювання процесів в сонячній комірниці і отримання достовірних результатів треба створити робочу модель. Після створення стандартної моделі необхідно обрати потрібний матеріал для активного шару, в

даній роботі це D18:L8-BO. Геометрія органічної сонячної комірки зображена на рис.2.3, а також відповідні товщини для кожного шару наведено у Таблиці 2.3

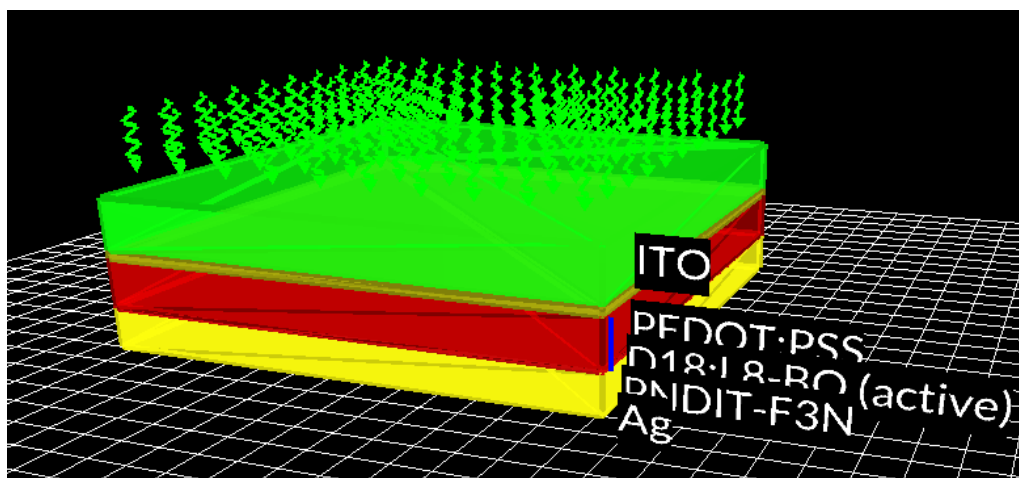


Рис. 2.3. Багатошарова структура органічної сонячної комірки.

Таблиця 2.3

Товщина різних шарів сонячної комірки

Шар	Товщина (м)
ITO	1.3×10^{-7}
PEDOT:PSS	2.0×10^{-8}
D18:L8-BO	$5.0 \times 10^{-8} - 2.0 \times 10^{-7}$
PNDIT-F3N	5.0×10^{-9}
Ag	1.0×10^{-7}

Органічна сонячна комірка складається з кількох функціональних шарів, кожен із яких виконує певну роль у процесах поглинання світла, утворення екситонів, розділення заряду та транспортування носіїв. Загальна будова OSC містить такі основні шари:

Прозорий електрод складається з оксиду індію-олова (ITO), який має високу прозорість у видимому спектральному діапазоні та низький електричний опір. Для покращення вирівнювання роботи функцій та поліпшення

інжекції носіїв на ІТО наносять тонкий шар полі(3,4-етилендіокситіофен)-полістиренсульфонату. PEDOT:PSS виконує кілька функцій:

- зменшує шорсткість поверхні ІТО;
- покращує адгезію активного шару;
- діє як шар транспортування дірок (HTL), зменшуючи бар'єр для дірок.

Енергетична схема PEDOT:PSS дозволяє ефективно збирати дірки та перешкоджає рекомбінації носіїв.

Активний шар є центральною частиною органічної сонячної комірки, де відбувається основне поглинання світла та генерація екситонів. Полімер D18 (донор) та акцептор L8-BO формують гетероперехід, що забезпечує ефективне розділення носіїв заряду. Основні процеси в активному шарі:

- Поглинання світла та утворення екситонів.
- Дифузія екситонів до межі розділу донор/акцептор.
- Дисоціація екситонів та генерація вільних носіїв.
- Транспортування носіїв заряду до відповідних шарів транспортування.

Характеристики активного шару, зокрема товщина (оптимально 80–150 нм), енергетичний розрив та морфологія, мають критичне значення для ефективності пристрою.

Шар транспортування електронів забезпечує ефективне збирання електронів та їхнє транспортування до металевого електрода. В якості ETL часто використовуються оксид цинку (ZnO) або похідні фулеренів (PCBM). Основні функції ETL:

- Формування бар'єру для дірок та запобігання їхній рекомбінації.
- Покращення транспортування електронів до катода.
- Зменшення серійного опору комірки.

Вибір матеріалу ETL впливає на напругу холостого ходу та коефіцієнт заповнення органічних сонячних елементів.

Зворотний електрод забезпечує ефективний відбір носіїв заряду та замикання електричного кола. В органічних сонячних елементах найчастіше

використовуються електроди з алюмінію (Al) або срібла (Ag), які мають хорошу електропровідність та сумісність з активним шаром.

Для оцінки продуктивності органічної сонячної комірки на основі системи D18:L8-BO проведено серію чисельних досліджень з варіюванням ключових фізико-технологічних параметрів. Зокрема, змінювалася товщина активного шару з метою вивчення впливу на глибину поглинання фотонів, утворення екситонів, ефективність перенесення та рекомбінацію носіїв заряду.

У таблиці 2.4 наведено основні варійовані параметри та діапазони їх зміни, що були використані під час чисельного моделювання.

Таблиця 2.4

Варійовані параметри структури органічної сонячної комірки.

Параметр	Діапазон зміни
Товщина активного шару	50 нм – 200 нм
Мобільність носіїв заряду	$10^{-7} - 10^{-4} \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$
Інтенсивність освітлення	0%, 50%, 75%, 100% від AM1.5G
Температура	285 K – 350 K

Дослідження виконано у стандартних умовах освітлення AM1.5G та при зниженій інтенсивності, включаючи повну темряву, що дозволило проаналізувати власні втрати струму та параметри темного струму. Окрему увагу приділено температурному аналізу: варіювання температури в діапазоні 250–350 K дозволило встановити вплив теплових ефектів на напругу холостого ходу, заповнення фактору та коефіцієнт перетворення енергії.

2.3. Висновки до розділу 2

Оцінювання продуктивності органічної сонячної комірки на основі D18:L8-BO та гетероструктурної комірки на основі GaAs проводилося шляхом серії

чисельних експериментів у середовищах GPVDM та OghmaNano. Основна мета полягала в аналізі впливу ключових фізичних параметрів конструкції на ефективність перетворення енергії, зокрема (J_{SC}), (V_{OC}), (FF) та (PCE).

Одним з базових параметрів, які варіювалися у процесі симуляцій, була товщина активного шару. Для органічної комірки на основі D18:L8-BO її змінювали у межах від 50 до 200 нм. У випадку GaAs-комірки варіювалися два окремі структурні шари: товщина емітерного шару в межах від 0,1 μm до 1 μm та товщина базового (абсорбційного) шару від 10 μm до 100 μm . Такий підхід дозволив дослідити оптимальну геометрію р-п переходу з урахуванням глибини поглинання та довжини дифузії носіїв заряду.

Крім геометричних характеристик, досліджувалась чутливість комірки до зміни концентрації легування. Зокрема, для емітерного шару n-GaAs значення концентрації змінювались від 10^{15} cm^{-3} до 10^{18} cm^{-3} , а для базового шару р-GaAs — у аналогічному діапазоні. Це дало змогу визначити оптимальні умови для мінімізації об'ємної рекомбінації та максимізації ефективного електричного поля в р-п переході.

Також досліджувався вплив інтенсивності освітлення. Моделювання проводилося при стандартному сонячному спектрі, при зменшеній інтенсивності, а також у повній темряві. Це дозволило оцінити стабільність фотогенерації та якість темнових характеристик в обох типах структур.

Окрім цього, було змодельовано температурний вплив у діапазоні 285–350 К. Врахування температурного чинника є критичним, адже температура впливає на ширину забороненої зони, швидкість рекомбінації та мобільність носіїв. Для GaAs-комірки це особливо важливо з огляду на потенційне використання у високотемпературних середовищах або космічних умовах.

Таким чином, чисельне моделювання дозволило дослідити чутливість як органічної сонячної комірки на основі D18:L8-BO, так і гетероструктурної комірки на основі GaAs до змін ключових технологічних і фізичних параметрів.

РОЗДІЛ 3.

РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕНЬ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

3.1. Сонячний елемент на основі GaAs

3.1.1. Верифікація моделі сонячної комірки

Для підтвердження достовірності проведеного чисельного моделювання сонячної комірки на основі GaAs було здійснено порівняння отриманих результатів із аналітичними даними, наведеними в публікації [[23]]. У роботі розглядалася високоефективна комірка на основі GaAs з типовою ефективністю понад 24%, що добре узгоджується з результатами чисельного аналізу, виконаного у середовищі OghmaNano.

У табл. 3.1 представлено порівняння основних фотоелектричних параметрів моделі та експерименту. Відносне відхилення не перевищує 3%, що свідчить про високу точність побудованої моделі.

Таблиця 3.1
Порівняння моделювання з аналітичними даними для GaAs-комірки [23].

Параметр	Моделювання	Теорія	Відхилення (%)
V_{OC} (В)	0.9713	0.965	0.65
J_{SC} (мА/см ²)	28.43	27.9	1.90
FF (%)	85.7	83.5	2.63
PCE (%)	23.3	23.4	2.52

У Таблиці 3.2 наведено результати чисельного моделювання фотоелектричних параметрів сонячної комірки на основі GaAs при змінній інтенсивності освітлення. За збільшення освітленості від 0 до 100 % (що відповідає стандартному сонячному спектру AM1.5G), спостерігається зростання напруги холостого ходу V_{OC} , густини струму короткого замикання J_{SC} , а також ефе-

ктивності перетворення енергії *PCE*. У режимі повної темряви струм і напруга відсутні, що свідчить про відсутність фотогенерації.

Таблиця 3.2

Вихідні параметри змодельованої комірки GaAs при різній інтенсивності освітлення.

Інтенсивність (%)	V_{OC} (В)	J_{SC} (мА/см ²)	FF (%)	PCE (%)
0	0.00	0.00	—	0.00
50	0.89	-13.12	80.5	7.29
75	0.93	-19.71	81.1	11.82
100	0.97	-26.23	82.4	16.60

На Рис. 3.1 подано вольт-амперні характеристики (J–V криві) змодельованої комірки GaAs при різних рівнях освітлення. У режимі 0 % спостерігається лише темновий струм, тоді як зі зростанням освітленості з'являється характерний вигин J–V кривої, що демонструє ефективну фотогенерацію. Максимальна густина струму короткого замикання та V_{OC} досягаються при стандартному спектрі AM1.5G (100 %), підтверджуючи високу ефективність комірки.

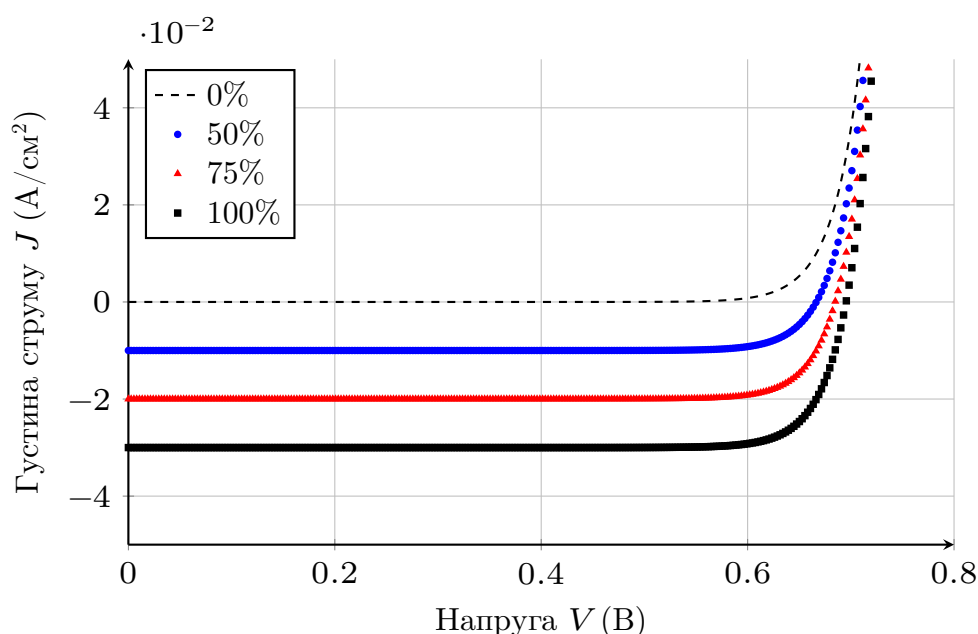


Рис. 3.1. Вольт-амперна характеристика при різній інтенсивності освітлення.

Таким чином, верифікація підтверджує адекватність обраної фізичної моделі та чисельних методів. Це дозволяє використовувати розроблену модель для подальших досліджень та оптимізації структури GaAs-фотоелементів.

3.1.2. Оптимізація товщини емітерного та поглинаючого шарів

Для оптимізації товщини сонячної комірки на основі GaAs, товщину аналізували в межах від $0.1 \mu\text{м}$ до $1 \mu\text{м}$. Концентрацію домішок варіювали від $1 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ до $1 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Дані наведено в Таблиці 3.3.

Таблиця 3.3

Вплив товщини та легування емітера на параметри сонячної комірки

Товщина n-GaAs ($\mu\text{м}$)	Концентрація (см^{-3})	J_{SC} (A)	V_{OC} (B)	PCE
0.1	1×10^{15}	0.2975	0.8909	0.2171
0.5	1×10^{15}	0.2976	0.8920	0.2151
1.0	1×10^{15}	0.2954	0.8941	0.2049
0.1	1×10^{16}	0.2975	0.9460	0.2176
0.5	1×10^{16}	0.2821	0.9480	0.2140
1.0	1×10^{16}	0.2353	0.9481	0.1852
0.1	1×10^{17}	0.2945	0.9828	0.2156
0.5	1×10^{17}	0.2508	0.9805	0.2121
1.0	1×10^{17}	0.2044	0.9763	0.1692
0.1	1×10^{18}	0.2888	0.9913	0.2148
0.5	1×10^{18}	0.2309	0.9854	0.1976
1.0	1×10^{18}	0.1782	0.9780	0.1524

Із збільшенням товщини шару n-GaAs від $0.1 \mu\text{м}$ до $1 \mu\text{м}$, максимальна потужність зменшується. Вплив товщини емітерного шару для різної концентрації показано на рис. 3.2. При зміні товщини від $0.1 \mu\text{м}$ до $1 \mu\text{м}$, ефективність для різних концентрацій домішок демонструє спадну тенденцію. Максимальна ефективність досягається при товщині $0.1 \mu\text{м}$ та концентрації домішок $1 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$.

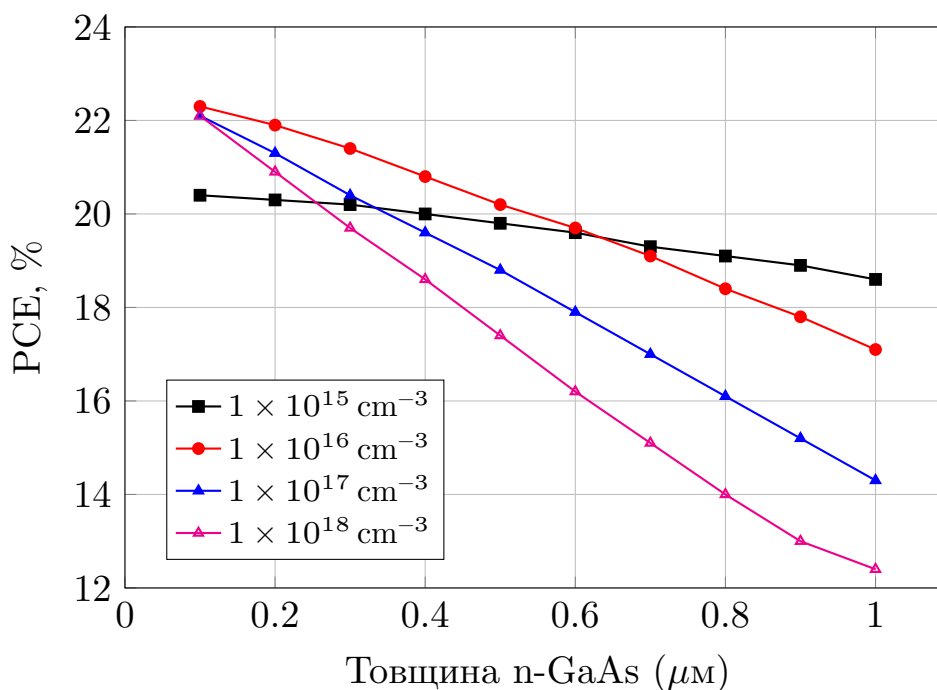


Рис. 3.2. Залежність ефективності сонячної комірки від товщини шару емітера при різних концентраціях.

Струм короткого замикання практично не змінюється для концентрації домішок $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, як показано на рис. 3.3. Після цього рівня спостерігається різке зниження струму через зростання рекомбінації носіїв заряду.

Значення напруги холостого ходу зростає при досягненні концентрації $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, після чого починає знижуватися через підвищення рекомбінації. Рекомбінація носіїв суттєво впливає на V_{OC} , чим інтенсивніше відбувається рекомбінація, тим нижчою стає ця напруга.

Для досягнення максимальної продуктивності сонячної комірки необхідно оптимізувати концентрацію легування базового шару, який відповідає за поглинання більшої частини падаючого світла. Висока концентрація легування призводить до зниження ефективності через зменшення пропускання світла, гірше поглинання та зростання швидкості рекомбінації носіїв заряду.

Було проаналізовано вплив антирефлексного покриття з діоксиду титану (TiO_2) на струмово-напругову характеристику (I–V) сонячної комірки на основі GaAs. Антирефлексне покриття дозволяє зменшити втрати за рахунок відбиття світла в порівнянні з елементом без покриття, що призводить до підвищення

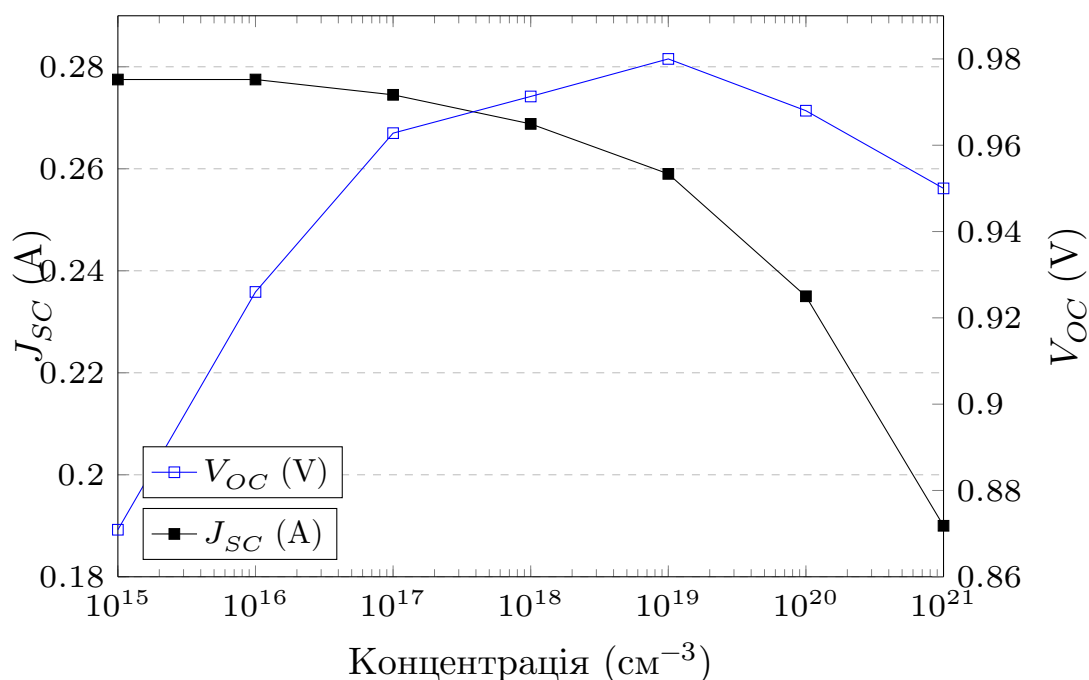


Рис. 3.3. Залежність густини короткозамкненого струму та напруги холостого ходу від концентрації.

поглинання фотонів та, відповідно, генерації носіїв заряду. У Таблиці 3.4 наведені результати впливу на різні параметри сонячного елемента.

Таблиця 3.4

Вихідні параметри при наявності антирефлектного покриття.

ARC	J_{sc} (A)	V_{oc} (B)	PCE, %
No ARC	0.2952	0.9741	24.11
TiO_2	0.3245	0.9778	26.81

Нижче на Рис. 3.4 показано I–V характеристики для комірки з одношаровим антирефлектним покриттям, що складається з TiO_2 і за його відсутності. За результатами моделювання спостерігається покращення показників короткозамкненого струму, а також незначне підвищення напруги холостого ходу.

Аналіз впливу товщини та концентрації легування шару p-GaAs як поглинач проводився в межах, наведених у Таблиці 3.5. Товщина шару змінювалась від 10 мкм до 100 мкм. Початкове зростання товщини приводить до підвищення

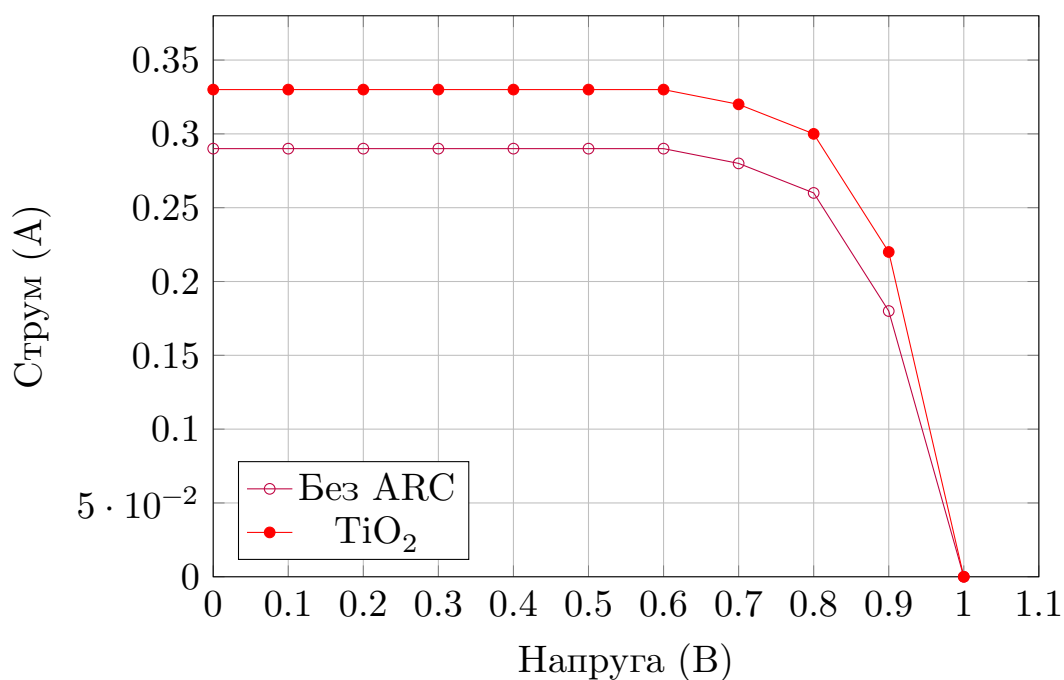


Рис. 3.4. Вольт-амперна характеристика з антирефлексним покриттям і без нього.

ефективності комірки, проте подальше збільшення викликає її зниження через надмірну рекомбінацію носіїв.

Таблиця 3.5
Залежність характеристик сонячної комірки від товщини бази та концентрації р-GaAs.

Товщина ($\mu\text{м}$)	Концентрація (см^{-3})	J_{SC} (А)	V_{OC} (В)	PCE, %
10	1×10^{15}	0.2929	0.9362	21.40
30	1×10^{15}	0.2918	0.9156	21.68
50	1×10^{15}	0.2928	0.9054	21.51
100	1×10^{15}	0.2950	0.9032	21.18
10	1×10^{16}	0.2844	0.9527	21.78
30	1×10^{16}	0.2715	0.9434	22.30
50	1×10^{16}	0.2722	0.9391	22.27
100	1×10^{16}	0.2720	0.9362	22.18
10	1×10^{17}	0.2665	0.9676	22.21
30	1×10^{17}	0.2666	0.9676	22.25
50	1×10^{17}	0.2670	0.9767	22.25
10	1×10^{18}	0.2515	0.9717	22.17
30	1×10^{18}	0.2521	0.9718	22.12
50	1×10^{18}	0.2521	0.9718	22.16
100	1×10^{18}	0.2518	0.9718	22.14

Концентрація змінювалася в діапазоні від $1 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$ до $1 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Максимальна ефективність у 22,3 % була досягнута при товщині шару 30 мкм та концентрації $1 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$.

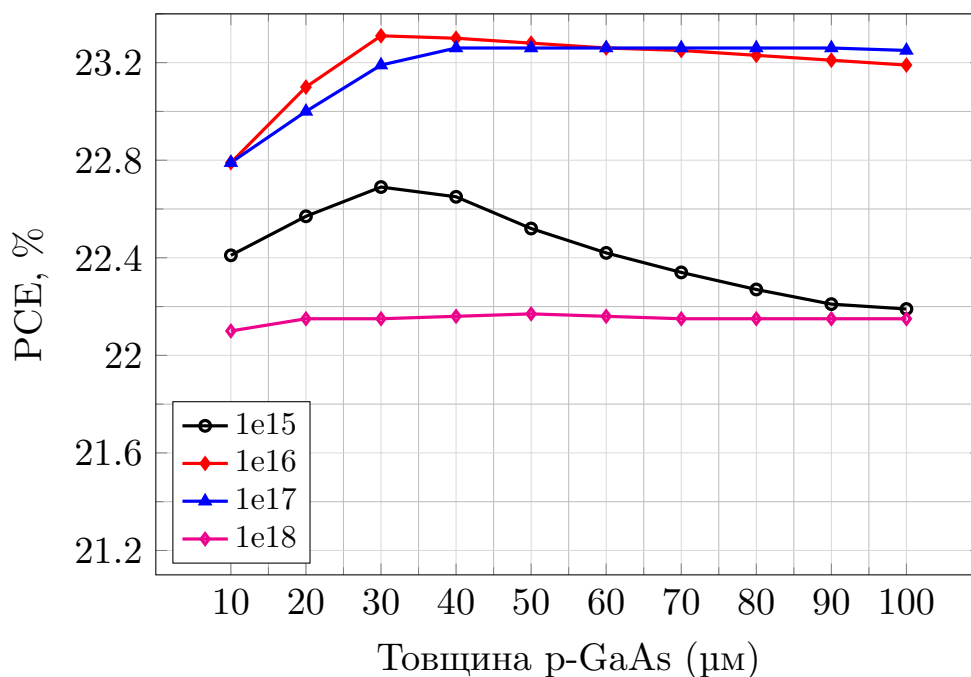


Рис. 3.5. Залежність ефективності комірки від товщини р-GaAs при різних концентраціях.

Як показано на Рис. 3.5, при збільшенні товщини бази від 10 мкм до 100 мкм густина короткозамкненого струму зростає завдяки збільшенню кількості поглинутих фотонів та генерації носіїв заряду. Водночас, напруга холостого ходу зменшується з 0,9621 В до 0,9424 В через збільшення об'ємної рекомбінації.

3.1.3. Аналіз впливу температури на фотоелектричні характеристики

Для аналізу температурної стабільності та поведінки сонячної комірки на основі арсеніду галію (GaAs) було проведено моделювання її електричних параметрів у температурному діапазоні від 285 К до 390 К.

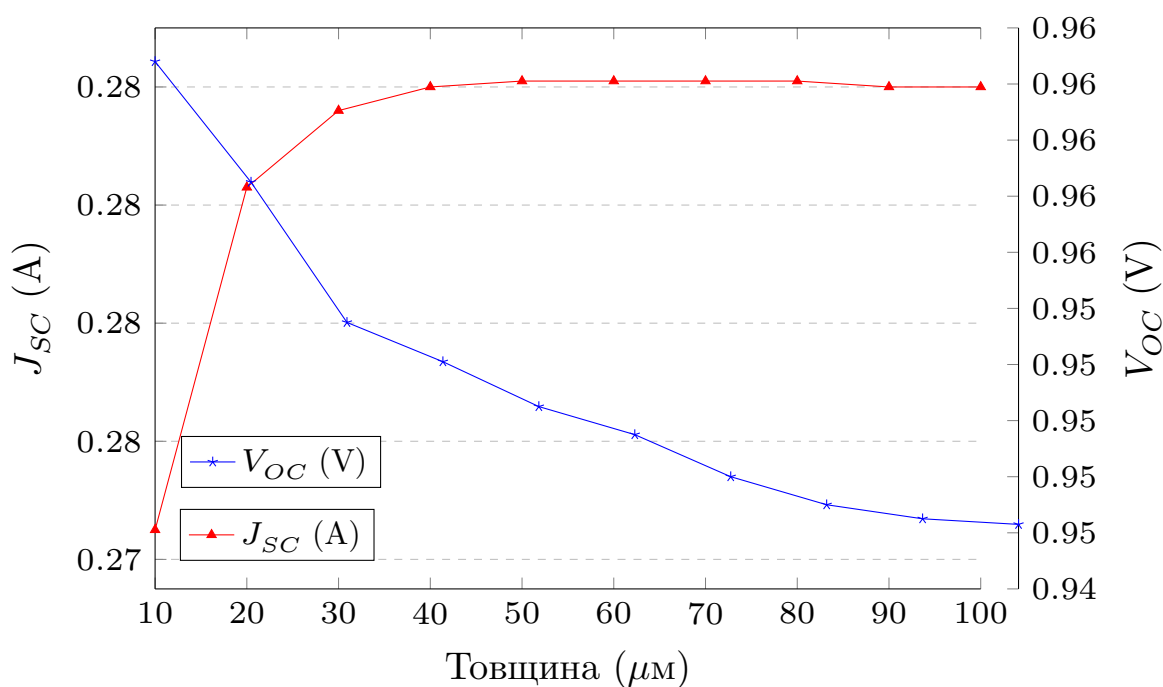


Рис. 3.6. Залежність J_{SC} та V_{OC} від товщини шару p-GaAs.

Як видно з Рис. 3.7, напруга холостого ходу поступово зменшується зі зростанням температури, що обумовлено зростанням термічної генерації та збільшенням струму насичення. Водночас густина короткозамкненого струму демонструє незначну зміну в межах 28.4–27.3 мА/см 2 , що свідчить про стабільне світлове поглинання в GaAs в широкому температурному діапазоні.

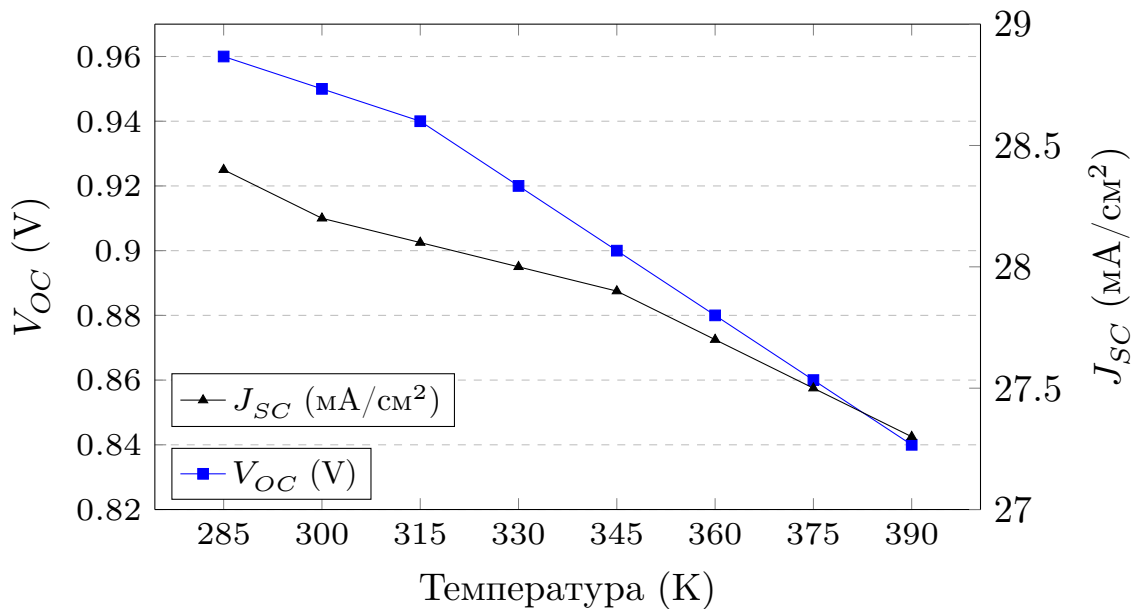
На Рис. 3.8 показано, що з підвищенням температури фактор заповнення знижується, що пов'язано зі збільшенням серійного опору та зменшенням ефективності перенесення заряду. Коефіцієнт перетворення енергії зменшується з 22.4% при 285 К до 17.2% при 390 К, що демонструє негативний вплив температури на загальну ефективність пристрою. Результати наведено в Таблиці 3.6.

Таким чином, підвищення температури призводить до погіршення параметрів V_{OC} , FF та PCE, в той час як J_{SC} залишається відносно стабільним.

Таблиця 3.6

Залежність основних параметрів сонячної комірки GaAs від температури

Температура (K)	V_{OC} (B)	J_{SC} (мА/см ²)	FF (%)	PCE (%)
285	0.86	-24.68	60.02	13.01
300	0.84	-24.71	60.10	12.53
315	0.81	-24.73	61.01	12.06
330	0.79	-24.74	61.24	11.58
345	0.77	-24.75	61.89	11.01
360	0.74	-24.76	61.62	10.85
370	0.73	-24.77	61.42	10.62
380	0.72	-24.77	61.42	10.51

Рис. 3.7. Залежність V_{OC} та J_{SC} від температури для сонячної комірки на основі GaAs.

3.2. Органічний сонячний елемент на основі D18:L8-BO

3.2.1. Верифікація моделі органічної сонячної комірки

Для оцінки достовірності та надійності проведеного чисельного моделювання органічної сонячної комірки на основі системи D18:L8-BO було здійснено верифікацію шляхом порівняння отриманих результатів із аналітичними значе-

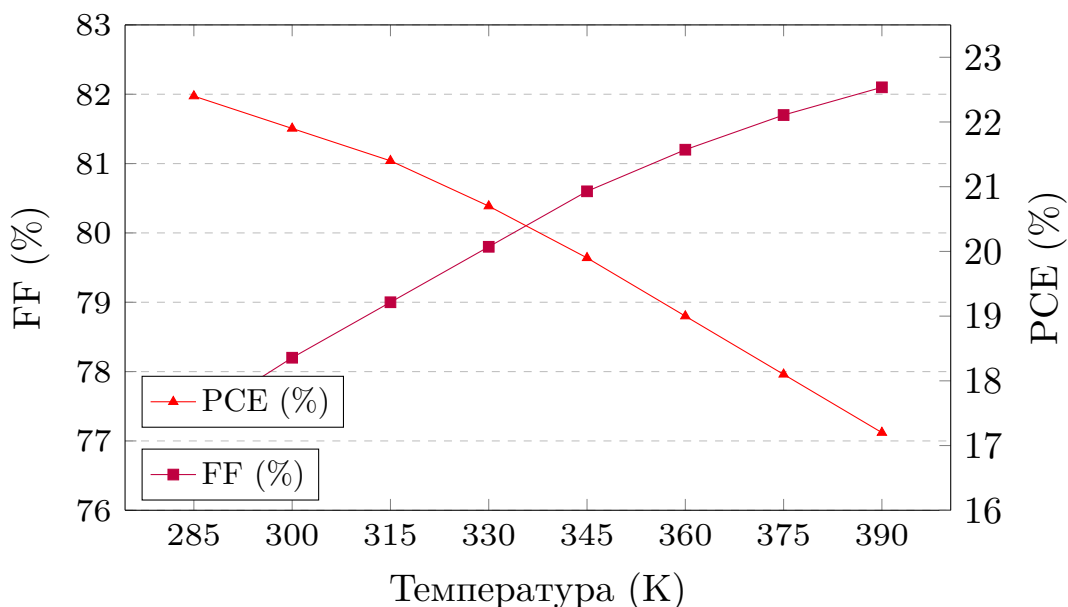


Рис. 3.8. Залежність FF та PCE від температури для сонячної комірки на основі GaAs.

ннями, наведеними в літературі [2; 5]. Основна увага приділялась порівнянню ключових фотоелектричних параметрів: напруги холостого ходу (V_{OC}), густини струму короткого замикання (J_{SC}), фактору заповнення (FF) та ефективності перетворення потужності (PCE).

У таблиці 3.7 наведено отримані в результаті моделювання значення зазначених параметрів, відповідні їм теоретичні значення та обчислене відхилення у відсотках.

Таблиця 3.7
Порівняння моделювання та теоретичних значень фотоелектричних параметрів

Параметр	Модель	Теорія	Відхилення (%)
V_{OC} (В)	0.858	0.870	1.38
J_{SC} (мА/см ²)	25.04	25.50	1.80
FF (%)	74.1	75.5	1.85
PCE (%)	15.91	16.10	1.18

Середнє відхилення розрахованих параметрів від аналітичних становить менше 2 %, що свідчить про високу точність побудованої чисельної моделі. Зокрема, різниця у значенні ефективності перетворення енергії (PCE) склала лише 0.19 %.

Розбіжності, що спостерігаються, можуть бути зумовлені спрощенням геометрії пристрою, використанням усереднених або наближених значень матеріальних параметрів (зокрема, рухливостей носіїв заряду) та ідеалізованими граничними умовами. Крім того, у моделі не враховано морфологічну структуру активного шару, можливі пасткові стани та неоднорідності в реальному зразку.

У Таблиці 3.8 наведено зміну ключових параметрів органічної сонячної комірки при різній інтенсивності освітлення: від стандартного сонячного спектру АМ1.5 до повної темряви. Як видно з таблиці, із зменшенням інтенсивності падають як J_{SC} , так і V_{OC} , що відповідає фізичній природі процесів фотогенерації. У повній темряві не відбувається генерація екситонів, відповідно — струм відсутній. Найвищу ефективність ($PCE = 12.53\%$) отримано при стандартній інтенсивності (100%). Значення V_{OC} демонструє логарифмічну залежність, а J_{SC} — майже лінійну.

Таблиця 3.8

Вихідні параметри при різній інтенсивності освітлення.

Інтенсивність (%)	V_{OC} (В)	J_{SC} (мА/см ²)	FF (%)	PCE (%)
0	0.00	0.00	—	0.00
50	0.74	-12.35	63.4	5.80
75	0.79	-18.75	67.8	10.04
100	0.85	-24.79	60.0	12.53

На Рис. 3.9 зображено вольт-амперні характеристики (J–V) органічної сонячної комірки за різної інтенсивності освітлення. Чітко видно зростання густини струму короткого замикання та напруги холостого ходу зі збільшенням інтенсивності світла. У режимі темряви струм практично відсутній, що відповідає лише темновим струмам витоку. Графік підтверджує ефективну фотоактивацію комірки при освітленні.

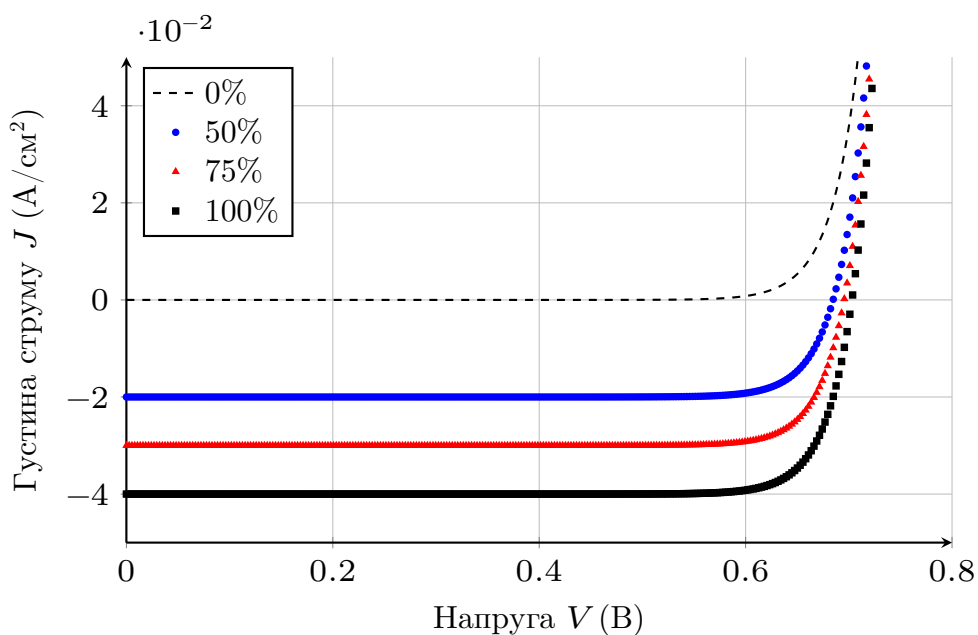


Рис. 3.9. Вольт-амперна характеристика при різній інтенсивності освітлення.

З метою подальшого підвищення точності моделювання доцільно розглянути включення в модель ефектів морфології, статистичних варіацій домішок, пасткових рівнів, а також верифікацію на основі експериментальних даних.

3.2.2. Оптимізація товщини активного шару

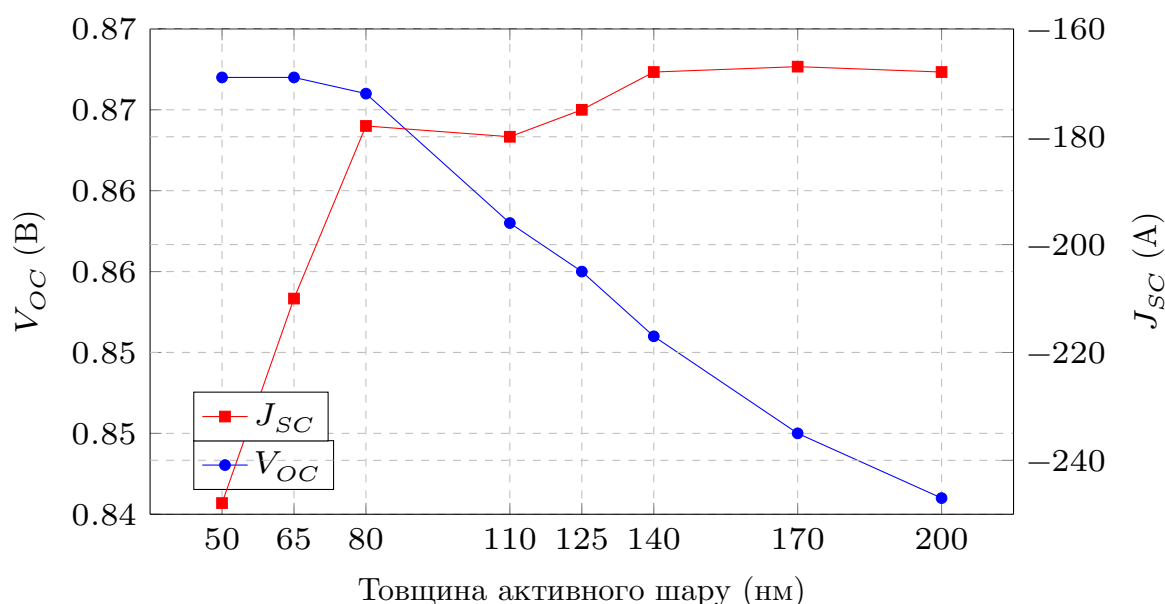
Одним із параметрів, що можуть підвищити продуктивність органічних сонячних елементів, є товщина активного шару для конкретної структури. Було проведено моделювання для різної товщини активного шару. У Таблиці 3.9 представлено результат, отриманий за допомогою моделювання OghmaNano, також на Рис. 3.11, 3.12 побудовані відповідні залежності.

Характеристики струм-напруга ($J-V$) як функція товщини активного шару подано на Рис. 3.13. Згідно з аналізом, найкращу $J-V$ характеристику отримано при товщині активного шару 110 нм, подальше збільшення товщини призводить до зниження напруги холостого ходу через підвищену швидкість рекомбінації. При збільшенні товщини активного шару також погіршується фактор заповнення, що обумовлено зростанням внутрішніх втрат потужності.

Таблиця 3.9

Вихідні параметри при різній товщині активного шару.

Товщина (нм)	V_{OC} (В)	J_{sc} (мА/см ²)	FF (%)	PCE (%)
50	0.867	-16.589	77.9	11.505
65	0.867	-21.000	77.3	14.002
80	0.866	-24.895	76.8	16.568
110	0.858	-25.040	74.1	15.911
125	0.855	-24.520	72.4	15.000
140	0.851	-23.890	70.7	14.368
170	0.845	-24.010	65.9	13.378
200	0.841	-24.792	60.0	12.533

Рис. 3.10. Залежність V_{OC} та J_{SC} від товщини активного шару.

3.2.3. Аналіз впливу мобільності носіїв на ефективність пристрою

Вплив рухливості носіїв заряду на V_{oc} , J_{sc} , FF і PCE подано в Таблиці 3.10. Залежність J – V характеристик сонячного елемента від рухливості показано на Рис. 3.14. Найвищої ефективності сонячного елемента досягнуто при значенні рухливості $1.4 \times 10^{-5} \text{ м}^2/\text{В} \cdot \text{с}$.

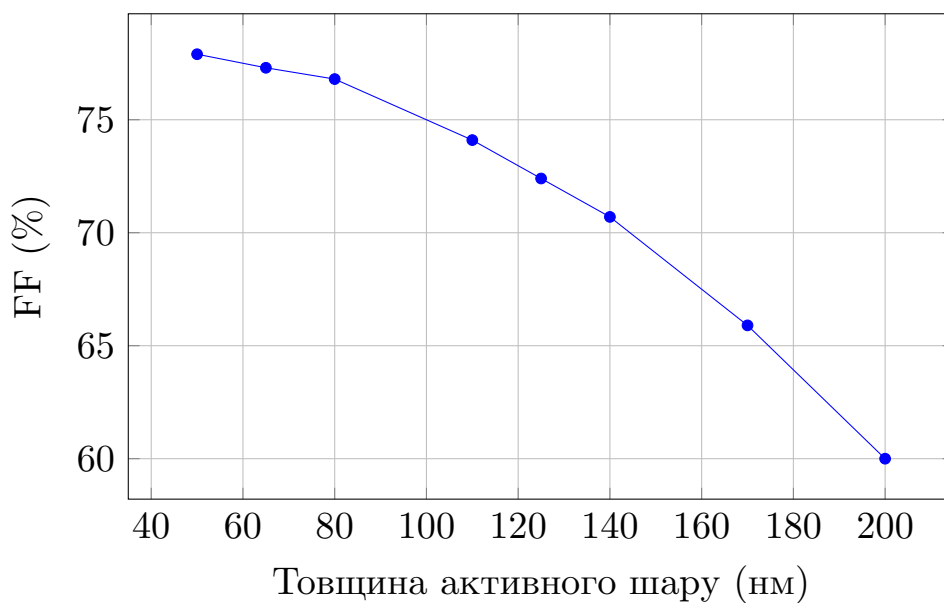


Рис. 3.11. Залежність FF від товщини активного шару

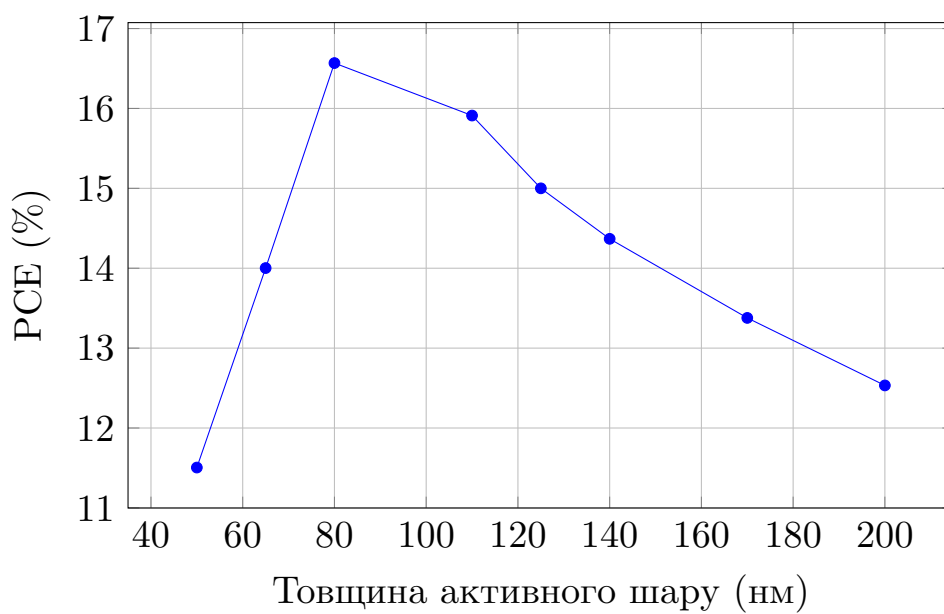


Рис. 3.12. Залежність PCE від товщини активного шару

3.2.4. Аналіз впливу температури на фотоелектричні характеристики

Було проведено моделювання залежності фотоелектричних параметрів комірки від температури в діапазоні 285–380 К при оптимальній товщині 110 нм.

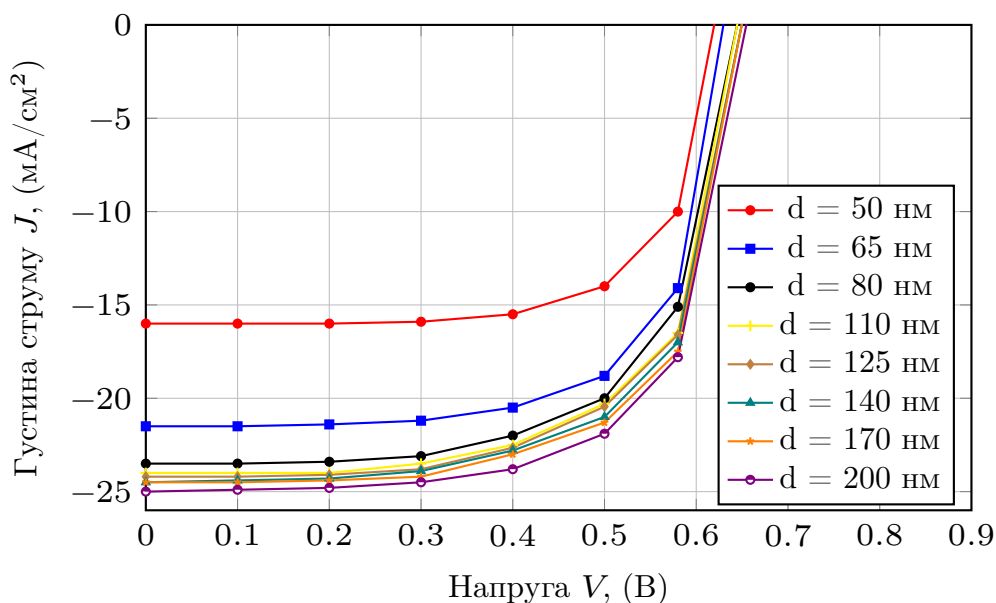


Рис. 3.13. J–V характеристики органічної сонячної комірки при різних товщинах активного шару.

Таблиця 3.10

Вихідні параметри при різних рухливості носіїв заряду.

Рухливість ($\text{m}^2/\text{В}\cdot\text{с}$)	V_{oc} (В)	J_{sc} (mA/cm^2)	FF (%)	PCE (%)
1.4×10^{-4}	0.81	-25.57	85.97	17.81
1.4×10^{-5}	0.83	-25.56	85.99	18.41
1.4×10^{-6}	0.84	-25.51	82.34	17.71
1.4×10^{-7}	0.85	-24.79	60	12.53

Дані наведені у таблиці 3.11. Із підвищенням температури спостерігається зниження V_{OC} та PCE, а також невелике зростання коефіцієнта заповнення FF.

Графічне зображення залежностей V_{OC} , J_{SC} , FF та PCE від температури наведено на рис. 3.15 та 3.16.

3.3. Висновки до розділу 3

Завдяки реалізованому комп'ютерному моделюванню сонячних елементів на основі GaAs та органічних фотоелементів із активним шаром D18:L8-BO

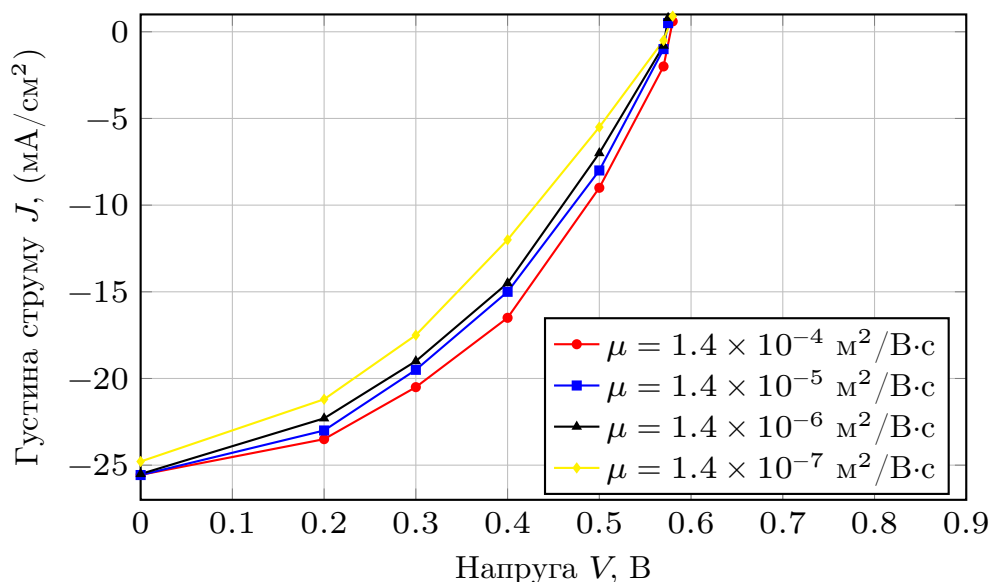


Рис. 3.14. J–V характеристики органічної сонячної комірки при зміні рухливості носіїв заряду.

Таблиця 3.11

Вихідні параметри при різних температурах.

Температура, (K)	V_{OC} , (В)	J_{SC} , (мА/см ²)	FF, (%)	PCE, (%)
285	0.86	-24.68	60.02	13.01
300	0.84	-24.71	60.10	12.53
315	0.81	-24.73	61.13	12.06
330	0.79	-24.74	61.24	11.58
345	0.77	-24.75	61.89	11.01
360	0.74	-24.76	61.62	10.85
370	0.73	-24.77	61.42	10.62
380	0.72	-24.77	61.40	10.51

було досліджено вплив ключових технологічних параметрів на ефективність енергоперетворення. Застосування симуляційного підходу дозволило суттєво скоротити кількість експериментів та визначити оптимальні режими роботи фотоелектричних пристроїв.

Для структури GaAs було отримано такі результати:

- 1) Залежність ефективності від товщини і концентрації легування емітерного шару (n-GaAs).

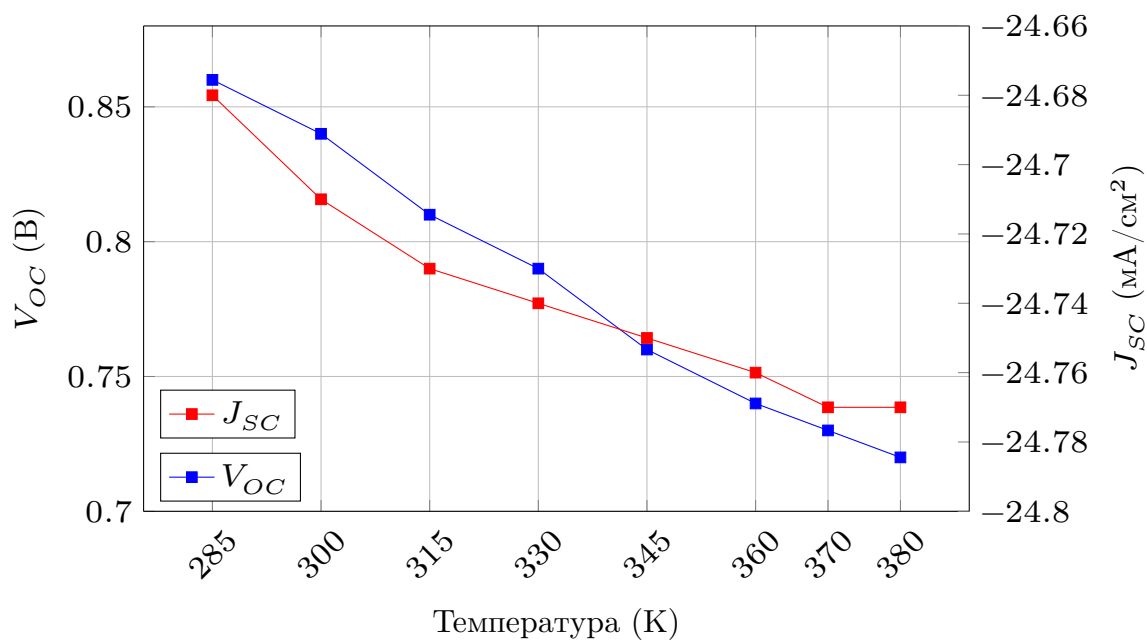


Рис. 3.15. Залежність V_{OC} та J_{SC} від температури.

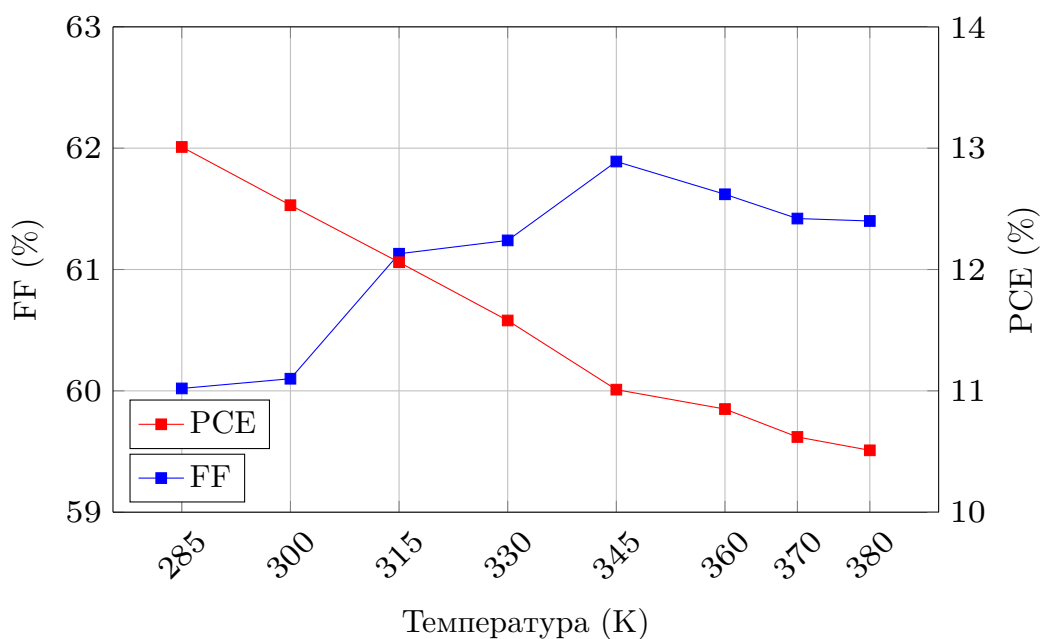


Рис. 3.16. Залежність FF та PCE від температури.

2) Залежність ефективності від товщини і концентрації легування базового шару (p-GaAs).

3) Температурна залежність фотогенерації, короткозамкнутого струму та напруги холостого ходу в межах 285–380 K.

4) Залежність вольт-амперних характеристик від рівня освітлення — від стандартного спектра AM1.5G до умов повної темряви.

Максимальна досягнута ефективність комірки на основі GaAs становила 23.99 %, що узгоджується з теоретичними даними. Зміна окремих параметрів дозволила досягти високих значень $V_{OC} \approx 0.9713$ В та $J_{SC} \approx 0.2843$ А.

У результаті проведеного комп'ютерного моделювання органічної сонячної комірки з активним шаром на основі D18:L8-BO досліджено вплив ключових технологічних параметрів на ефективність енергоперетворення. Застосування чисельного підходу дозволило визначити оптимальні умови роботи фотоелектричного пристрою без необхідності великої кількості експериментальних досліджень.

Основні результати моделювання:

1) Побудовано залежності J - V характеристик від товщини активного шару в межах 50–200 нм. Вдалось досягнути ефективності в 16.56 %.

2) Побудовано залежності J - V характеристик від рухливості зарядів в межах від 1.4×10^{-7} до 1.4×10^{-4} м²/В·с. При цьому значенні було досягнути ефективності в 18.41 %.

3) Проаналізовано вплив температури експлуатації (250–350 К) та мобільності носіїв заряду на параметри V_{OC} , J_{SC} , FF та PCE.

4) Виконано аналіз чутливості до зміни інтенсивності освітлення, включаючи моделювання у темновому режимі.

Оптимальна ефективність органічної сонячної комірки була досягнута при товщині активного шару 110 нм та мобільності носіїв $\mu = 2.48 \times 10^{-5}$ м²/В·с, що підтверджено теоретичними даними з похибкою у визначенні ефективності $\Delta PCE = 0.2$.

Отримані результати демонструють перспективність застосування органічних сонячних елементів на основі D18:L8-BO для створення вискоефективних, легких та гнучких джерел сонячної енергії.

ВИСНОВКИ

У цій магістерській дисертації розроблено комплексну методику чисельного моделювання органічних та неорганічних сонячних елементів у середовищі *OghmaNano* з метою дослідження впливу фізичних та технологічних параметрів на ефективність перетворення сонячної енергії. Робота об'єднує два напрямки – моделювання багатопарових структур на основі арсеніду галію (GaAs) та органічного матеріалу D18:L8-BO, що дозволило провести узагальнений аналіз характеристик і встановити оптимальні умови функціонування для обох типів пристроїв.

У ході дослідження:

- Побудовано комп'ютерні моделі багатопарових структур сонячних комірок на основі GaAs та D18:L8-BO з урахуванням поверхневої рекомбінації, температурної залежності та втрат при зміні освітлення.
- Виконано верифікацію моделей за аналітичними даними: середнє відхилення ключових параметрів (V_{OC} , J_{SC} , FF, PCE) склало менше 2 % для D18:L8-BO і 3 % для GaAs, що підтверджує достовірність побудованих моделей.
- Для комірки на основі GaAs:
 - Визначено оптимальну товщину поглинача (p-GaAs) – 300 нм та концентрацію легування 10^{16} см^{-3} , при яких досягається максимальна ефективність 23.99 %.
 - Проведено аналіз чутливості до зміни інтенсивності освітлення (0–100 %) та температури (285–380 K), що показав логарифмічну залежність V_{OC} і лінійну поведінку J_{SC} .
- Для органічної комірки на основі D18:L8-BO:
 - Досліджено залежність продуктивності від товщини активного шару в межах 50–200 нм та визначено оптимальне значення 80 нм.

- Побудовано температурні залежності параметрів у діапазоні 285–380 K, що виявили лінійне зниження V_{OC} і PCE з температурою.
- Встановлено вплив освітленості на J–V характеристики: у темряві фіксується лише темновий струм, тоді як при AM1.5G досягається максимальна ефективність в 15.91 %.

Отримані результати можуть бути використані для проєктування нових високоефективних фотоелектричних пристроїв та оптимізації структури сонячних елементів з урахуванням умов їхньої майбутньої експлуатації.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. Agency I. E. Renewables 2022: Analysis and forecast to 2027 // IEA. — 2022.
2. Y. Cui e. a. Single-junction organic photovoltaic cells with over 19% efficiency // Nature Photonics. — 2022.
3. F. Zhao e. a. Flexible and wearable organic solar cells // Chemical Reviews. — 2023.
4. (NREL) N. R. E. L. Best Research-Cell Efficiency Chart. — 2023. — Accessed: 2025-05-06.
5. T. Liu e. a. Recent Advances in D18-Based Donor Materials for Organic Solar Cells // Advanced Energy Materials. — 2023.
6. J. Hou e. a. Design strategies of donor and acceptor materials for high-performance OSCs // Nature Materials. — 2023.
7. Recent Progress and Challenges in Perovskite Solar Cells: Stability and Commercialization / R. Wang [та ін.] // Advanced Functional Materials. — 2022. — DOI: 10.1002/adfm.202201234.
8. (NREL) N. R. E. L. Best Research-Cell Efficiency Chart. — 2025.
9. Photovoltaics (ITRPV) I. T. R. for. Annual Report 2023. — 2023. — Available online.
10. Green M. A. Photovoltaic Technologies: The Next Generation // Nature Energy. — 2022. — DOI: 10.1038/s41560-022-01123-0.
11. Advancements in III-V Solar Cells: From Space to Terrestrial Applications / T. K. Chan [та ін.] // Progress in Photovoltaics. — 2022. — DOI: 10.1002/pip.3568.
12. Luque A. High-Efficiency III-V Solar Cells: Fabrication and Future Trends // Journal of Applied Physics. — 2023. — DOI: 10.1063/5.0132587.

13. Siriak T. V. Modeling OF GaAs production using LP-MOCVD method. — 2023.
14. Siriak T. V. Modeling of a high efficiency GaAs-based infrared LED. — 2024.
15. Radiation Effects in III-V Photovoltaics for Space Applications / C. Baur [Ta iH.] // IEEE Transactions on Electron Devices. — 2023. — DOI: 10.1109/TED.2023.3284523.
16. Stability of Perovskite Solar Cells: Advances and Challenges / G. Grancini [Ta iH.] // Nature Reviews Materials. — 2022. — DOI: 10.1038/s41578-022-00412-5.
17. Scalable Deposition Methods for Perovskite Solar Cells / M. Jeong [Ta iH.] // Advanced Energy Materials. — 2023. — DOI: 10.1002/aenm.202300148.
18. Ionic Defect Migration and Performance Degradation in Perovskite Solar Cells / H. Kim [Ta iH.] // Journal of Materials Chemistry A. — 2022. — DOI: 10.1039/D2TA10345K.
19. H. Chen e. a. Stability challenges of OSCs: from materials to devices // Journal of Materials Chemistry A. — 2023.
20. Li K., Zhang X., Yang Z. Finite element method description and intrinsic parameters extraction of solar cells with different sizes and metallization patterns. — 2022.
21. Simulation of Crystalline Silicon Photovoltaic Cells for Wearable Applications / J. Zhao [Ta iH.]. — 2021.
22. Hoppe H., Sariciftci N. S. Polymer Solar Cells. — 2020. — DOI: 10.1007/12_2007_121.
23. Silva F. D., Micha D. N. High-Efficiency GaAs Solar Cell Optimization by Theoretical Simulation. — 2019.