

COLLECTION OF RESEARCH PAPERS

of the 7th International Research and Practical Conference

**CHEMICAL TECHNOLOGY:
SCIENCE, ECONOMY AND PRODUCTION**

ЗБІРНИК НАУКОВИХ ПРАЦЬ

VII Міжнародної науково-практичної конференції

**ХІМІЧНА ТЕХНОЛОГІЯ:
НАУКА, ЕКОНОМІКА ТА ВИРОБНИЦТВО**



МІНІСТЕРСТВО
ОСВІТИ І НАУКИ
УКРАЇНИ



Фармак



ISSN 2786-4898

Міністерство освіти і науки України
Сумський державний університет
Шосткинський інститут Сумського державного університету
Центральний науково-дослідний інститут
озброєння та військової техніки збройних сил України
Публічне акціонерне товариство «Фармак»
Управління освіти Шосткинської міської ради
Виконавчий комітет Шосткинської міської ради

COLLECTION OF RESEARCH PAPERS

of the 7th International Research and Practical Conference

CHEMICAL TECHNOLOGY: SCIENCE, ECONOMY AND PRODUCTION



ЗБІРНИК НАУКОВИХ ПРАЦЬ

VII Міжнародної науково-практичної конференції
**ХІМІЧНА ТЕХНОЛОГІЯ:
НАУКА, ЕКОНОМІКА ТА ВИРОБНИЦТВО**

(м. Шостка, 22-24 листопада 2023 року)



Суми

Сумський Державний Університет

2023

УДК 66.01

Редакційна колегія:

Головний редактор Закусило Р.В., доцент кафедри хімічної технології високомолекулярних сполук, к.т.н., доцент.

Заступник головного редактора Павленко О.В., ст. викладач кафедри хімічної технології високомолекулярних сполук, к.т.н.

Відповідальний секретар Скуба Ю.Г. фахівець кафедри економіки та управління Шосткинського інституту Сумського державного університету.

Члени редакційної колегії:

Лукашов В.К. – професор кафедри хімічної технології високомолекулярних сполук, д.т.н., професор;

Середа В.І. – завідувач кафедри хімічної технології високомолекулярних сполук, к.т.н.;

Худолей Г.М. – завідувач кафедри системотехніки і інформаційних технологій, к.т.н.;

Тур О.М. – завідувач кафедри економіки та управління, к.е.н.;

Тимофійв С.В. – ст. викладач кафедри хімічної технології високомолекулярних сполук, к.х.н.;

Пригара І.О. – ст. викладач кафедри економіки та управління, к.е.н.

Збірник наукових праць VII Міжнародної науково-практичної конференції «Хімічна технологія: наука, економіка та виробництво», м. Шостка, 22 - 24 листопада 2023 року. – Суми : Сумський державний університет, 2023. – 215 с.

ISSN 2786-4898.

Збірник містить наукові праці учасників VII Міжнародної науково-практичної конференції «Хімічна технологія: наука, економіка та виробництво», що складаються з узагальнених матеріалів науково-дослідних робіт науковців різних галузей виробництва та наукових закладів України.

У збірнику висвітлюються актуальні питання спеціальної хімічної технології і виробництва боєприпасів, утилізації відходів виробництв різних галузей, енергозбереження, моделювання технологічних процесів, соціально-економічні аспекти виробництва та природокористування в умовах війни.

Збірник корисний робітникам хімічної промисловості, науковим співробітникам, аспірантам і студентам спеціальностей хіміко-технологічного та соціально-економічного профілів, фахівцям інформаційних технологій виробництва.

Наукові праці учасників конференції подаються в авторській редакції.

© Шосткинський інститут
Сумського державного університету, 2023
© Сумський державний університет, 2023

**МОДЕЛЮВАННЯ ЕКСПЛУАТАЦІЙНИХ ХАРАКТЕРИСТИК
ФОТОЕЛЕКТРИЧНОГО ПЕРЕТВОРЮВАЧА ЗІ СТРУКТУРОЮ
ZnO:Al/ZnMgO/CuO**

М.М. Іващенко¹, А.С. Опанасюк²

¹ Відокремлений структурний підрозділ «Класичний фаховий коледж СумДУ»

² Сумський державний університет
m.ivashchenko@gm.sumdu.edu.ua

Комп'ютерне моделювання основних фізичних процесів, які відбуваються в тонкоплівкових фотоелектричних перетворювачах (ФЕП), привертає особливу увагу дослідників ще з початку 80-х років ХХ століття. Для моделювання роботи фотоперетворювачів, розрахунку їх оптичних та електрофізичних характеристик використовується достатньо велика кількість експериментальних моделей. Однак, інтерпретація отриманих при їх використанні результатів дуже часто є досить важкою. Тривимірне числове моделювання в наш час широко використовується також для попереднього проектування ФЕП та їх тестування [1].

Ідеальний програмний пакет, призначений для моделювання роботи тонкоплівкових ФЕП, повинен відповідати наступним критеріям:

мати можливість моделювання процесів у багатошарових структурах;

можливість моделювання процесів у ФЕП з шарами, ширина забороненої зони яких є більшою ніж 3 eV;

враховувати рекомбінацію генерованих носіїв заряду на глибоких рівнях в об'ємі матеріалу та на поверхні;

можливість розділення енергетичних зон на складові частини;

можливість моделювання основних електричних характеристик ФЕП як функції від часу;

мати велику швидкість моделювання процесів та легкість в користуванні.

Мінімальна кількість шарів ФЕП, з якими спроможний працювати прийнятний для використання пакет моделювання, повинна складати не менше 6; повинна бути передбачена можливість моделювання не лише темнових і світлових вольт-амперних характеристик (ВАХ), а і інших залежностей, наприклад, квантового виходу, частотно-ємнісних залежностей тощо.

Порівняльні характеристики деяких основних програмних пакетів, які використовуються для моделювання фізичних процесів у ФЕП на основі гетеропереходів (ГП), наведені в табл. 1 [2].

Основний інструмент, яким користувався оперує у відмічених програмних продуктах, є так звана «активна» панель, в якій дослідник встановлює початкові (стартові) параметри для моделювання: робочу температуру, діапазон напруги, частоту, тип випромінювання тощо. Далі, після введення стартових параметрів, ще одним необхідним інструментом для моделювання, є «активний перелік розрахункових залежностей», який дозволяє отримувати ВАХ, частотно-ємнісні характеристики, залежності «квантовий вихід – довжина хвилі (енергія фотона)» та ін. [3].

Кожен з програмних пакетів, наведених у таблиці 1 має як свої переваги так і недоліки, однак одним з найбільш привабливих з них є програмний пакет SCAPS. Його особливістю є те, що основні параметри симуляції (моделювання) можуть бути скриптовані користувачем власноручно, що дозволяє оптимізувати пакет програм під певні, більш вузьконаправлені задачі, які в результаті будуть розв'язуватися більш ефективно [4].

Таблиця 1 Порівняльні характеристики програм для моделювання фізичних процесів у ФЕП [2]

	AMPS	SCAPS	ASA	PC1D
Макс. кільк. шарів	30	7	необмежена	5
Побудова зонних діаграм	Враховується модель Андерсона			
Розділення енергетичних зон	ні	ні	так	ні
Глибокі стани в забороненій зоні	50	3	4	без заряду
Глибокі поверхневі стани	ні	так	ні	ні
Багатопрофільне моделювання	ні	так	так	короткочасно
Числове наближення	враховується			
Швидкість	мала	висока	дуже висока	дуже висока
Інтерактивність	задовільна	добра	відсутня	добра

Світлові ВАХ були змодельовані з використанням програмного пакету SCAPS-3307 [5]. Процес моделювання був оснований на використанні рівняння Пуассона. Шар ZnO:Al був обраний нами в якості верхнього струмопровідного шару завдяки електронному типу провідності, високому значенню коефіцієнта оптичного пропускання та фізико-технологічним параметрам отримання, максимально наближеним до аналогічних параметрів віконного шару [6]. Шар Zn_{0,5}Mg_{0,5}O був обраний в якості віконного шару завдяки можливості контролю значення ширини забороненої зони, змінюючи концентрацію магнію у сполуці. В якості поглинаючого шару ФЕП був обраний оксид міді (CuO) завдяки своєму значенню ширини забороненої зони, яке є наближеним до оптимального.

Перед початком процесу моделювання необхідно обрати вхідні базові параметри, такі як: товщини поглинаючого, віконного та струмопровідного шарів (d), значення ширини ЗЗ (E_g) шарів, їх спорідненості електронів (χ) та діелектричні сталі (ϵ/ϵ_0), рухливості електронів (μ_n) та дірок (μ_p), їх ефективні маси (m_n/m_0 та m_p/m_0 , відповідно), густини станів у зоні провідності (N_C) та валентній (N_V) зоні, тощо [2].

Основні базові параметри, використані для моделювання приведені в Таблиці 2.

Процес моделювання проводився з використанням таких стартових початкових умов: кліматична зона сонячного випромінювання AM 1.5; три з чотирьох (товщина поглинаючого шару CuO, товщина віконного шару Zn_{1-x}Mg_xO, товщина струмопровідного шару ZnO:Al, робоча температура сонячного елементу) параметрів моделювання мали фіксоване значення, в той час, як один з них – змінювався

Таблиця 2 Базові параметри для проведення числового моделювання

Шар	CuO	Zn _{0,5} Mg _{0,5} O	ZnO:Al
E_g , eВ	1,51	3,90	3,50
X , eВ	4,07	3,67	4,65
$\varepsilon/\varepsilon_0$, в.о.	18,10	10,50	9,00
N_C , см ⁻³	$2,20 \times 10^{20}$	$2,50 \times 10^{19}$	2.20×10^{18}
N_V , см ⁻³	$5,50 \times 10^{19}$	$4,20 \times 10^{19}$	1.80×10^{19}
μ_n , см ² /с	100	100	100
μ_p , см ² /год	10	50	25
m_n/m_0	-	0,35	0,38
m_p/m_0	0,42	-	-

Товщина базового (поглинаючого) шару є важливим робочим параметром для ФЕП завдяки поглинання носіїв заряду та імовірності підвищення внаслідок цього ефективності фотоперетворення. На Рис. 1 представлені результати моделювання ФЕП на базі структури CuO/Zn_{1-x}Mg_xO/ZnO:Al як функції зміни товщини поглинаючого шару.

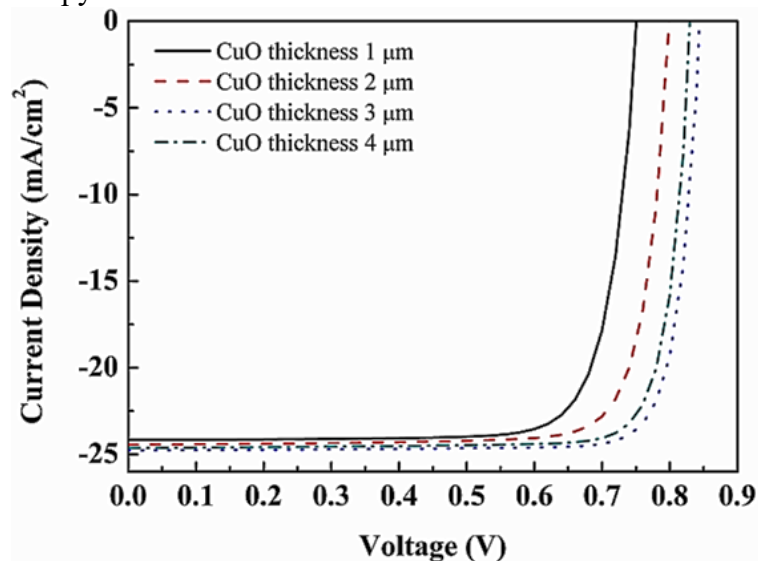


Рисунок 1 Світлові ВАХ ФЕП зі структурою CuO/Zn_{1-x}Mg_xO/ZnO:Al при різних значеннях товщини поглинаючого шару

Аналіз ВАХ показав наступне: при збільшенні величини товщини поглинаючого шару з 1,0 до 4,0 мкм напруга холостого ходу U_{oc} незначно коливалася ($U_{oc} = 0,75-0,84$ В); густина струму короткого замикання спочатку значно збільшувалась своє значення – з 24,17 мА/см² до 24,77 мА/см² потім дещо зменшувалась до 24,63 мА/см² при збільшенні товщини поглинаючого шару.

Коефіцієнт корисної дії фотоелектричного перетворення при збільшенні товщини шару CuO з 1,0 мкм до 3,0 мкм збільшував своє значення з 14,55 % до 17,19 %, після цього, при подальшому зростанні товщини шару CuO до 4,0 мкм η дещо зменшував своє значення до 17,13 %. Даний ефект може бути викликаний максимальним поглинанням сонячного випромінювання при товщинах поглинаючих шарів 4,0 мкм. При даних значеннях товщин кількість генерованих електронно-діркових пар досягає стану насичення. Подальше збільшення товщини поглинаючого шару призводить до збільшення значення опору даного шару [7]. Як результат проведеного моделювання, було встановлено оптимальне значення товщини поглинаючого шару, яке було використане в подальших розрахунках.

На Рис. 2 приведені результати моделювання ФЕП при різних товщинах віконного шару, яка є важливим робочим параметром, так як природа віконного шару може суттєво впливати на кількість світлового випромінювання, яке потрапить на поглинаючий шар [8].

Було встановлено, що значення U_{OC} для шару $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$, який змінював своє значення з 25 до 100 нм, нехтовно змінювалося в бік зменшення з 0,85 до 0,84 В, що свідчить про фактичну сталість рівня рекомбінації носіїв заряду незалежно від товщини віконного шару. Зміна густини струму короткого замикання при зміні товщини віконного шару проявилася у наступному: значення J_{SC} зменшувалося з 25,78 mA/cm^2 до 24,77 mA/cm^2 . К.к.д. змодельованого ФЕП зменшувався при підвищенні товщини віконного шару. Даний ефект можна пояснити збільшенням рівня поглинання фотонів у віконному шарі при збільшенні його товщини [9].

Необхідно відмітити, що отримання суцільних плівок $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$ при товщинах, менших за 25 нм є надзвичайно складною задачею, тому процес моделювання віконного та струмопровідного шарів при товщинах, менших за 25 нм не проводився.

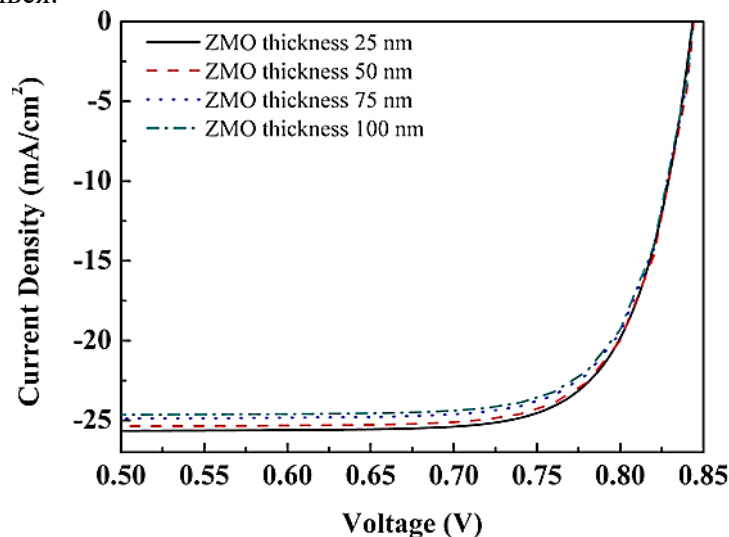


Рисунок 2 Світлові ВАХ ФЕП зі структурою $\text{CuO}/\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}/\text{ZnO}:\text{Al}$ при різних товщинах віконного шару $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}$

В результаті було отримане значення товщини віконного шару, оптимальне для подальшого моделювання, яке склало 25 нм. Ці дані використовувалися в подальшому.

На Рис. 3 представлені результати моделювання ФЕП при різних товщинах струмопровідного шару ZnO:Al.

Було встановлено, що значення коефіцієнту корисної дії (η) при збільшенні товщини шару ZnO:Al з 25 нм до 100 нм у незначній мірі змінювалося – дещо зменшувалося з 18,51 до 18,46 %. Отримані результати дозволяють зробити висновок про можливість використання в подальшому струмопровідний шар ZnO:Al з мінімальною товщиною 25 нм.

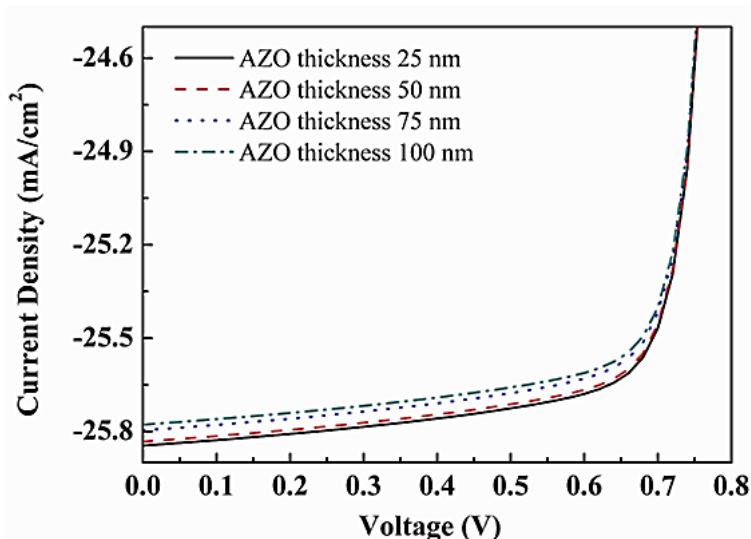


Рисунок 3 Світлові ВАХ ФЕП зі структурою CuO/Zn_{1-x}Mg_xO/ZnO:Al при різних товщинах струмопровідного шару

В процесі експлуатації ФЕП можуть нагріватися при їх опроміненні сонячним світлом. Даний ефект може внести суттєвий вплив на робочі характеристики ФЕП. Тому, нами був досліджений вплив температури ФЕП на їх робочі характеристики в межах 290-320 К з оптимізованими раніше товщинами шарів. Результати моделювання представлені на Рис. 4.

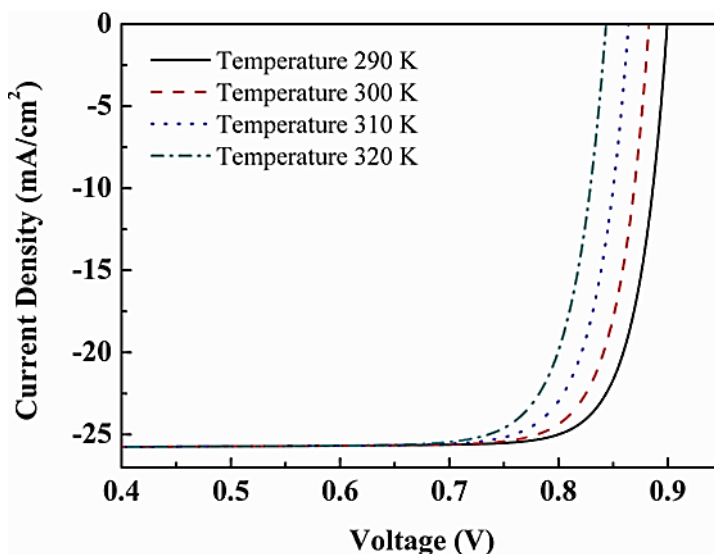


Рисунок 4 Світлові ВАХ ФЕП зі структурою CuO/Zn_{1-x}Mg_xO/ZnO:Al при різних робочих температурах

В результаті проведеного числового моделювання значення коефіцієнта корисної дії ФЕП η зменшувалося при збільшенні значення температури експлуатації з 20,90 % при 290 К до 18,51 % при 320 К. Отримані дані мають гарну кореляцію з фізичними, так як при збільшенні значення робочої температури T призводить до зменшення значень ширини забороненої зони шарів ФЕП, що призводить до зменшення різниці контактних потенціалів на гетеромежі.

В якості висновків по даній роботі можна привести наступне. Було проведено числове моделювання наступних робочих характеристик фотоелектричного перетворювача на базі $\text{CuO}/\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}/\text{ZnO}:\text{Al}$: напруга холостого ходу U_{OC} , густина струму короткого замикання J_{SC} , фактор заповнення FF та коефіцієнт корисної дії η при різних умовах проектування – товщинах поглинаючого (d_{CuO}), віконного ($d_{\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}}$), струмопровідного ($d_{\text{ZnO}:\text{Al}}$) шарів, при різних температурах експлуатації фотоперетворювачів. Були отримані світлові вольт-амперні характеристики змодельованих ФЕП. Були визначені оптимальні структурні та технологічні параметри, які можуть забезпечити максимальну ефективність фото перетворення, а саме: $d_{\text{CuO}} = 4.0$ мкм, $d_{\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}} = 25$ нм, $d_{\text{ZnO}:\text{Al}} = 25$ нм, $T = 290$ К. Оптимальні робочі характеристики для змодельованого ФЕП склали значення: $U_{OC} = 0,90\text{В}$, $J_{SC} = 26,16$ мА/см², $FF = 86,25$ %, $\eta = 20,35$ %.

Список літературних джерел

- 1 S. Kasap, P. Capper, Springer handbook of electronic and photonic materials. Springer International Publishing AG, Cham, 2017. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-48933-9>.
- 2 Іващенко М.М. Структурні, оптичні та електрофізичні властивості плівок CdSe і ZnSe та гетеропереходів на їх основі: дис. канд. фіз.-мат. наук: 01.04.01 / М.М. Іващенко // Суми. – 2014. – 163 с.
- 3 J. Verschraegen, M. Burgelman, Thin Solid Films 515 (2007) 6276-6279. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2006.12.049>.
- 4 S. Degrave, M. Burgelman P. Nollet, 3rd IEEE World Conference on Photovoltaic Energy Conversion 1 (2003) 487-490.
- 5 М.М. Ivashchenko, A.S. Opanasyuk, I.P. Buryk, et al., J. Nano- Electron. Phys. 10 (2018) 03004. [https://doi.org/10.21272/jnep.10\(3\).03004](https://doi.org/10.21272/jnep.10(3).03004).
- 6 O.V. Diachenko, O.A. Dobrozhan, A.S. Opanasyuk, et al., Superlattice Microst. 122 (2018) 476-485. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2018.06.063>.
- 7 A.S. Opanasyuk, M.M. Ivashchenko, I.P. Buryk, et al., J. Nano- Electron. Phys. 7 (2015) 02037.
- 8 Cherouana, R. Labbani, Mater. Today 5 (2018) 13795-13799. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2018.02.020>
- 9 P. Sawicka-Chudy, M. Sibinski, E. Rybak-Wilusz, et al., AIP Advances 10 (2020) 010701. <https://doi.org/10.1063/1.5125433>.