UNIVERSITATEA DE STAT DIN MOLDOVA

ȘCOALA DOCTORALĂ ȘTIINȚE ALE NATURII

Consorțiu: **Universitatea Stat din Moldova, Institutul de Dezvoltare a Societății Informaționale, Universitatea de Stat „Bogdan Petriceicu Hașdeu" din Cahul**

Cu titlu de manuscris
C.Z.U: 537.222.22:621.315.592:620.97(043.2)

LUNGU ION

FIZICA HETEROSTRUCTURILOR CdS/ZnTe ÎN APLICAȚII FOTOVOLTAICE

134.01 Fizica și Tehnologia Materialelor

Rezumatul tezei de doctor în științe fizice

CHIȘINĂU, 2024

Teza a fost elaborată în cadrul laboratorului „Materiale Organice/Anorganice în Optoelectronică” al Universității de Stat din Moldova, Școala Doctorală Științe ale Naturii

Conducător științific-

POTLOG Tamara Doctor în Științe Fizico-Matematice, Conferențiar Universitar, Universitatea de Stat din Moldova

Componența Comisiei de Doctorat:

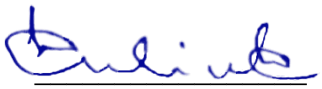
CULIUC Leonid	Academician, Doctor Habilitat în Științe Fizico-Matematice, Profesor Universitar, Institutul de Fizică Aplicată, Universitatea de Stat din Moldova - **p*reședinte***
POTLOG Tamara	Doctor în Științe Fizico-Matematice, Conferențiar Universitar, Universitatea de Stat din Moldova - ***conducător de doctorat***
NICORICI Valentina	Doctor în Științe Fizico-Matematice, Conferențiar Universitar, Universitatea de Stat din Moldova - ***referent***
LUCA Dumitru	Doctor, Profesor Emerit, Universitatea Alexandru Ioan Cuza din Iași, România - ***referent***
TROFIM Viorel	Doctor Habilitat în Tehnică, Profesor Universitar, Universitatea Tehnică a Moldovei - ***referent***

Susținerea va avea loc la 08.10.2024, ora 15:00 în cadrul Ședinței Comisiei de susținere publică a tezei de doctorat din cadrul Școlii Doctorale Științe ale Naturii, USM. Sediul – Universitatea de Stata din Moldova (http://www.usm.md),str. M. Kogălniceanu 65 A, blocul 3, sala 332, MD-2009, Chișinău, Moldova.

Teza de doctor și rezumatul pot fi consultate la Biblioteca Națională a Republicii Moldova, Biblioteca Științifică Centrală ”Andrei Lupan” (Institut), Biblioteca Centrală a Universității de Stat din Moldova (MD 2009, mun. Chișinău, str. Alexei Mateevici 60), pe pagina web a ANACEC (http://www.cnaa.md), și pe pagina web a USM (http://www.usm.md).

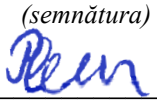
Rezumatul a fost expediat la ”____” August 2024

Președintele Comisiei de Doctorat
Academician, Doctor Habilitat în Științe Fizico-Matematice



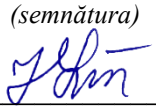
(semnătura) **CULIUC Leonid**

Conducător științific
Doctor în Științe Fizico-Matematice,



(semnătura) **POTLOG Tamara**

Autor:



(semnătura) **LUNGU Ion**

© Lungu Ion, 2024

CUPRINS

CUPRINS....3
REPERELE CONCEPTUALE ALE CERCETĂRII....4
CONŢINUTUL TEZEI....7
CONCLUZII GENERALE....24
RECOMANDĂRI....26
BIBLIOGRAFIE....27
LISTA PUBLICAȚIILOR AUTORULUI LA TEMA TEZEI....28
ADNOTARE....32
ANNOTATION....33
АННОТАЦИЯ....34

REPERELE CONCEPTUALE ALE CERCETĂRII

Actualitatea și importanța temei abordate

Astăzi, piața globală a dispozitivelor fotovoltaice este predominată în mare parte ~ 95% de tehnologia pe bază de siliciu. Cu toate acestea, siliciul nu este considerat materialul ideal pentru panourile solare, deoarece nu absoarbe lumina eficient. Cercetătorii explorează alternative precum tehnologia celulelor solare cu strat subțire și perovskite [1]. Perovskiții au atins deja o eficiență similară cu cea a siliciului, cu o conversie a energiei solare de peste 25%, dar sunt instabili, o problemă încă nerezolvată. O abordare promițătoare este reprezentată de celule fotovoltaice în tandem, care combină siliciul cu perovskiți, având potențialul de a atinge eficiențe de peste 30% [2]. Totodată, straturile subțiri pe baza compușilor A^2B^6 au atras atenția datorită capacității lor de a forma dispozitive semiconductoare de înaltă performanță. Celulele fotovoltaice pe bază de CdTe au fost deja implementate comercial și prezintă o eficiență energetică și rate de degradare mai bune decât tehnologiile pe bază de siliciu [3]. Peste 30 de GW de module pe baza CdTe sunt deja instalate la nivel global, cu eficiențe de până la 18,6% pentru modulele comerciale și peste 22% pentru dispozitivele de laborator [4], făcând din aceasta una dintre tehnologiile cu cea mai rapidă dezvoltare și promisiuni pentru aplicațiile cu straturi subțiri. Creșterea ulterioară a eficienței acestor dispozitive depinde în mare măsură de îmbunătățirea tensiunii de circuit deschis (U_{CD}) și a factorului de umplere (*FF*) prin inovații în materiale, metode de obținere și designul straturilor în dispozitive. Un alt punct de interes în domeniul fotovoltaic îl reprezintă straturile de ZnTe dopate cu oxigen, care formează aliaje semiconductoare diluate (HMA) cu proprietăți fundamentale semnificativ modificate prin înlocuirea unei mici fracțiuni a atomilor gazdă cu elemente de electronegativitate diferită [5], ca urmare a interacțiunii dintre stările localizate ale oxigenului și electronilor din banda de conducție a ZnTe se formează o bandă intermediară. Abordarea utilizării materialelor cu bandă intermediară (IB) oferă perspectivă atractivă de a obține o eficiență înaltă într-un dispozitiv cu o singură heterojoncțiune. Pentru a dezvolta cu succes celule fotovoltaice IB bazate pe straturile subțiri de ZnTe:O, este esențială dezvoltarea unei metode de creștere epitaxială a straturilor de ZnTe:O de înaltă calitate. Diferite grupuri de cercetători au obținut deja astfel de straturi folosind metode precum epitaxia cu fascicul molecular sau depunerea cu ablația laser pulsat. Proprietățile fizice ale compușilor semiconductori binari, cu bandă intermediară, în prezent sunt insuficient studiate, ceea ce încetinește progresul utilizării practice a acestora în dispozitivele reale. Astfel, rămân încă provocări în ceea ce privește designul structurii și proprietățile fotofizice ale dispozitivelor electronice ce utilizează straturi de CdS ca ”fereastră” și ZnTe cu bandă intermediară. Prin urmare, optimizarea designului, studiul caracteristicilor

electrice și optice ale acestora, precum și cercetarea aspectelor cheie legate de dispozitivele fotovoltaice bazate pe acești compuși, reprezintă obiective actuale. Creșterea eficienței dispozitivelor poate fi realizată numai prin optimizarea proprietăților fizice a fiecărui strat individual și a designului întregii celule fotovoltaice.

Scopul lucrării constă în analiza potențialului utilizării HJ CdS/ZnTe în aplicații fotovoltaice utilizând simularea numerică cu SCAPS-1D, elaborarea tehnologiei de obținere a benzii intermediare în stratul absorbant ZnTe prin încorporarea oxigenului în rețea, precum și investigarea proprietăților electrice și fotoelectrice ale acestora.

Principalele obiective de cercetare propuse în lucrarea de față sunt:

1. Simularea numerică cu programul SCAPS-1D pentru a prezice performanța dispozitivului fotovoltaic CdS/ZnTe și a identifica principiile generale de optimizare a parametrilor fotovoltaici ai acestuia.

2. Optimizarea tehnologiilor de obținere a straturilor subțiri de ZnO, CdS cu compoziție și morfologie dirijată prin utilizarea metodelor de depunere prin metoda pirolizei de pulverizare și depunerii în volum cuazi-închis.

3. Caracterizarea proprietăților optice și structurale ale straturilor subțiri de ZnO și CdS, utilizate ca electrod transparent și, respectiv, fereastră optică în dispozitivul fotovoltaic realizat ulterior.

4. Elaborarea tehnologiei de obținere a straturilor de ZnTe:O cu identificarea regimului optimal de tratare termică în mediu de oxigen pentru formarea benzii intermediare.

5. Stabilirea corelației dintre regimul tehnologic (T_S, T_{sub}, t) și concentrația de oxigen în straturile de ZnTe:O prin studiul compoziției, caracteristicilor optice și fotoluminescenței.

6. Estimarea principalilor parametri funcționali și analiza caracteristicilor HJ CdS/ZnTe:O în funcție de unii parametri fizico-chimici ai tehnologiei de obținere a stratului absorbant și designului contactului din spate.

7. Stabilirea mecanismului de transport al purtătorilor de sarcină electrică prin heterojoncțiunea CdS/ZnTe:O.

Ipoteza de cercetare

○ Randamentul de conversie simulat numeric cu softul SCAPS-1D a HJ CdS/ZnTe este dependent de parametrii straturilor componente, de exemplu, pentru d_{ZnTe}=1,0 μm, d_{CdS}=5 nm, d_{ZnO}=20 nm, $E_{g(CdS)}$=2,4 eV, $E_{g(ZnO)}$=3,3 eV, $\Phi_{(Ag)}$=4,7 eV sau obținut următorii parametri fotovoltaici: U_{CD}=0,89 V, J_{SC}=25,9 mA/cm^2, FF=72,6, η=16,78%.

o Condițiile tehnologice optimale pentru obținerea straturilor subțiri de ZnTe obținute prin metoda CSS sunt: temperatura substratului 320 ℃ - 360 ℃; temperatura sursei 360 ℃ - 600 ℃; timpul de depunere 6 minute. Tratarea termică în mediu de oxigen la temperatura de tratare 400 ℃, timp de 1 oră, pune în evidență formarea benzii intermediare.

o Formarea benzii intermediare în straturile subțiri de ZnTe este confirmată prin: analiza EDX ce indică prezența oxigenului, și micșorarea acestuia cu temperatura sursei de la 5,88% (pentru T_S=560 ℃) până la 0,68% (pentru T_S=600 ℃); micșorarea parametrului rețelei cristaline a stratului absorbant cu conținut mare de oxigen; și prezența unei benzi largi situate la 1,6 eV – 2,0 eV în spectrele de fotoluminescență;

o Mecanismul conductibilității în HJ CdS/ZnTe:O la frecvențe joase (10^2 Hz - 10^4 Hz) este predominat de conductibilitatea ionică, iar la frecvențe înalte (10^5 Hz - 10^6 Hz) prezintă conductibilitate de polarizare la interfață.

o HJ CdS/ZnTe realizate au valoarea U_{CD}=0,84 V, J_{SC}=0,25 mA/cm^2, randamentul de conversie a energiei solare în energie electrică 0,13% la iluminare cu lumină integrală de 100 mW/cm^2. Eficiența cuantică internă indică o valoare a eficienței cuantice interne puțin mai mare de 0,5 în intervalul lungimilor de undă 490-590 nm.

Sinteza metodologiei de cercetare și justificarea metodelor de cercetare alese

Problema științifică elucidată în această teză constă în realizarea unui dispozitiv fotovoltaic cu bandă intermediară prin optimizarea tehnologiei de obținere a straturilor subțiri de compuși binari, cu compoziție, morfologie și proprietăți optice și electrice controlate, și studierea proprietăților electrice și fotoelectrice ale acestor dispozitive. Pentru obținerea straturilor ZnTe:O cu bandă intermediară s-a utilizat metoda CSS și tratarea termică în mediu de oxigen la 400 ℃, timp de 1 oră, iar pentru ZnO s-a folosit metoda pirolizei prin pulverizare. Structura straturilor subțiri au fost investigate prin difracția razelor X, morfologia și compoziția chimică prin microscopie electronică cu scanare și spectroscopie de raze X cu dispersie de energie. Rugozitatea suprafețelor a fost analizată folosind microscopia de forță atomică. Transmitanța, reflectanța și absorbanța au fost măsurate prin spectroscopie UV-Vis. Spectrele de fotoluminescență au evidențiat banda intermediară în stratul de ZnTe, indicând substituirea telurului cu oxigen și formarea centrului O_{Te}. Parametrii fotovoltaici: U_{CD}, J_{SC}, R_s, R_{sh}, FF, η au fost determinați prin măsurarea caracteristicilor J-U în condiții AM1.5. Proprietățile electrice s-au studiat prin caracteristicile J-U la întuneric, caracteristicile C-U la diferite frecvențe și temperaturi (220 - 350 K), spectroscopie de impedanță în funcție de temperatură și frecvență (10^3 - 10^6 Hz).

CONȚINUTUL TEZEI

În **Introducere** se justifică relevanța temei de cercetare, se prezintă scopul și obiectivele tezei, metodologia cercetării științifice, noutatea rezultatelor obținute, problema științifică abordată, semnificația teoretică și practică a lucrării, principalele rezultate științifice propuse pentru susținere, aprobarea rezultatelor și structura lucrării.

Capitolul 1 este dedicat analizei bibliografice a cercetărilor privind materialele din clasa compușilor binari (ZnO, CdS, ZnTe) și designul dispozitivelor fotovoltaice bazate pe acestea. Acest capitol prezintă aspectele generale și o sinteză a celor mai recente publicații științifice referitoare la structura și proprietățile structurale, morfologice, topologice, electrice și optice ale acestor materiale. De asemenea, este analizată literatura de specialitate dedicată proiectării dispozitivelor fotovoltaice bazate pe aceste materiale, descriind mecanismele de transport al sarcinii electrice prin heterojoncțiunile formate din straturile subțiri menționate. În contextul designului dispozitivelor fotovoltaice, metodele de simulare numerică permit includerea unor efecte fizice importante care nu ar putea fi considerate experimental. Pentru a spori eficiența dispozitivelor până la limita Shockley-Queisser, au fost dezvoltate diverse programe de simulare, precum PC-1D, AMPS-1D, ADEPT-F și SCAPS-1D, care ajută la optimizarea designului și compararea cu alte propuneri concurente. În această teză, a fost utilizat programul SCAPS-1D.

Capitolul 2 prezintă tehnologia de obținere a straturilor subțiri de ZnTe, CdS, ZnO și a heterojoncțiunilor bazate pe acestea. Se discută influența parametrilor tehnologici de depunere, precum temperatura suportului și sursei, asupra morfologiei, compoziției chimice, topologiei suprafeței și structurii cristaline a straturilor subțiri de ZnTe și CdS, obținute prin metoda volumului cuazi-închis. Straturile de ZnTe și CdS au fost depuse pe substraturi de sticlă borosilicată fără utilizarea unui agent de transport gazos suplimentar. Pentru a determina condițiile optime de creștere a straturilor subțiri de ZnTe, au fost obținute două seturi de probe: în primul set, s-a variat temperatura substratului (T_{sub}) menținând constantă temperatura sursei (T_S), iar în al doilea set, s-a variat T_S menținând constantă T_{sub}. Durata de depunere a fost aceeași pentru ambele seturi. De asemenea, se descrie metoda de sinteză a straturilor de ZnO prin piroliză prin pulverizare, ținând cont de concentrația molară a soluției precursoare, viteza fluxului de gaz purtător și temperatura substratului. Gazele purtătoare, argonul purificat și oxigenul, influențează procesul de depunere și proprietățile straturilor subțiri rezultate, asigurând un mediu controlat și interacționând chimic cu soluția precursoare pentru a modifica compoziția și proprietățile straturilor. Doparea cu Al este utilizată pentru a introduce impurități controlate în rețeaua de ZnO, modificând proprietățile optoelectronice ale materialului. Pentru a investiga efectul dopării cu Al

asupra proprietăților straturilor de ZnO, au fost obținute două seturi de probe în diferite medii gazoase: unul în mediu de O_2 și altul în mediu de Ar. Ambele seturi de probe au fost dopate cu diferite concentrații de Al, între 0-5%, în soluția precursoare inițială. Tehnologia de obținere a heterojoncțiunilor CdS/ZnTe implică mai multe etape critice, esențiale pentru eficiența acestora: depunerea contactului frontal (cum ar fi ZnO, SnO_2, ITO, ITO/ZnO) prin pulverizare cu piroliză; depunerea stratului „fereastră" (CdS) prin evaporare în CSS; depunerea stratului absorbant (ZnTe) prin evaporare în CSS și tratarea termică în mediu de oxigen; depunerea stratului buffer Sb/Te la contactul din spate prin evaporare termică în vid sau PEDOT:PSS prin centrifugare; și depunerea contactului ohmic din spate prin evaporare termică în vid.

Capitolul 3 este dedicat studiului influenței parametrilor tehnologici de depunere asupra morfologiei, compoziției chimice, structurii cristaline și proprietăților optice fiecărei componente ale HJ CdS/ZnTe, și anume, ZnO, CdS și ZnTe.

Analiza AFM arată că parametrii de rugozitate a suprafeței straturilor de ZnO, obținute în mediu de O_2, indică valori mai mari (R_{MS}=60,96 nm) comparativ cu parametrii straturilor de ZnO nedopate, obținute în mediu de Ar (R_{MS}=29,48 nm), Fig.1. Analiza XRD indică că toate straturile subțiri de ZnO au structură policristalină, evidențiind planele de difracție (0 0 0 2), (1 0 0 0) și (1 0 0 1), care corespund structurii wurtzit hexagonale a ZnO, cu axa *c* perpendiculară pe suprafața substratului. Straturile subțiri nanostructurate de ZnO au o transmitanță ridicată (80-85%) în ambele medii de obținere. Pentru straturile subțiri de ZnO obținute în mediu de O_2, valoarea benzii interzise (E_g) este aproximativ de 3,24±0,02 eV. Pentru straturile obținute în mediu de Ar, E_g variază de la 3,22 eV până la 3,27 eV.

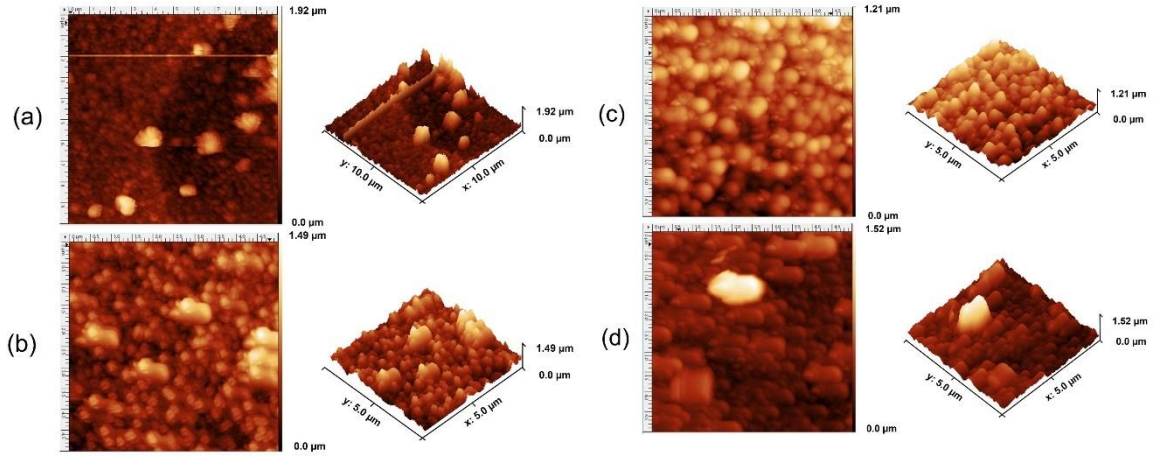


Fig. 1. Imagini AFM ale straturilor subțiri de ZnO nedopate obținute în mediu de O_2 (a); nedopate obținute în mediu de Ar (b); dopate cu Al obținute în mediu de Ar (c); dopat cu 2% Al obținute în mediu de Ar (d) și tratate în vid la 420 °C

Rezultatele studiului XRD ale straturilor de CdS arată că, indiferent de mediul de tratare termic, acestea sunt policristaline și aparțin sistemului cristalografic hexagonal. Dimensiunea

medie a cristalitelor atinge valoarea maximă în cazul tratamentului termic în vid. Calculul valorii benzii interzise (E_g) din spectrele de reflectanță (R) și transmitanță (T) indică o valoare de 2,40±0,02 eV.

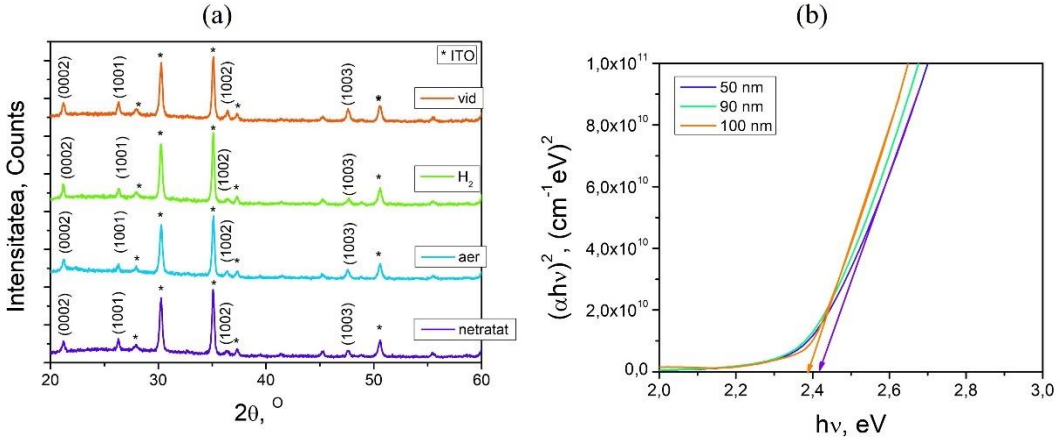


Fig. 2. Tablourile de difracție XRD (a) și dependența $(\alpha h\nu)^2$=f($h\nu$) (b) ale straturile subțiri de CdS

Un studiu mai detaliat a fost realizat asupra stratului absorbant ZnTe:O. Aceste straturi au fost obținute prin metoda CSS. Condițiile de depunere ale straturilor subțiri de ZnTe s-au modificat conform datelor prezentate în Tabelul 1.

Tabelul 1. Parametrii tehnologici utilizați în obținerea straturilor subțiri de ZnTe, precum și rezistivitatea specifică a acestora.

T_S, °C	T_{sub}, °C	t_{dep}, min	R, 10^9 Ω	ρ, Ω·cm
580	320	6	27,06	13,5
	330		2,83	1,4
	340		2,41	1,2
	350		2,90	1,5
	360		0,88	0,4
560	340		1,62	0,8
570			4,50	2,3
580			2,41	1,2
590			30,44	15,2
600			4,87	2,4

Apoi, aceste două seturi de ZnTe obținute în diferite condiții tehnologice a T_{sub} și T_S au fost transportate într-un cuptor (Fig. 3) pentru a fi tratate în mediu de O_2. Tot procesul de tratare a durat 1 oră la temperatura de 400 °C, debitul de oxigen a fost fixat de 5 ml/min.

Analiza EDX confirmă prezența unui exces de telur (Te) în ambele seturi de probe conform Tabelului 2. Se observă că cantitatea de Te crește odată cu creșterea temperaturii sursei (T_S), în timp ce procentul de oxigen scade. Această observație poate fi explicată prin posibila încorporare a oxigenului ca impuritate substituțională în situl de telur (O_{Te}) în timpul procesului de creștere a straturilor subțiri de ZnTe:O.

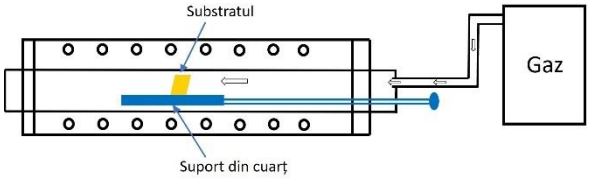


Fig. 3. Tratarea termică în mediu de O_2

Această încorporare a oxigenului în rețeaua de ZnTe poate rezulta în stări izoelectronice, adică atomii de oxigen pot substitui atomii de telur în rețea, menținând astfel bilanțul de sarcină al compusului. Acest fenomen poate influența compoziția chimică a straturilor subțiri de ZnTe:O, determinând un exces de telur și o scădere a procentului de oxigen detectat în spectrele EDX.

Tabelul 2. Analiza EDX ale straturilor subțiri de ZnTe:O

	***T*, °C**	**Element, %**		
		O	**Zn**	**Te**
T_{sub}	320	2,09	47,81	50,10
	340	1,55	48,67	49,78
	360	4,49	48,16	49,35
T_S	560	5,88	47,80	46,32
	580	3,05	47,49	49,46
	600	0,69	49,17	50,14

În Fig. 4. sunt prezentate tablourile de difracție XRD ale straturilor subțiri de ZnTe după tratarea termică în mediu de O_2, în funcție de T_{sub} și T_S. Toate probele prezintă structură policristalină cu orientare preferențială de-a lungul direcției [111].

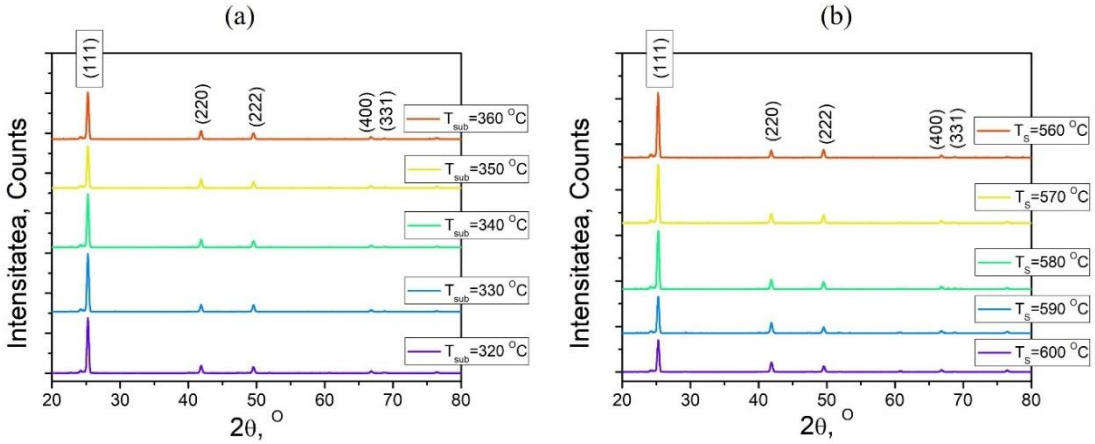


Fig. 4. Tablourile de difracție XRD ale straturilor subțiri de ZnTe:O în funcție de T_{sub} (a) și T_S (b).

Toate maximele de difracție se potrivesc bine cu datele de referință ICDD #15-0746 și #96-900-8859 [6]. Parametrii micro structurali estimați din tablourile de difracție XRD sunt prezentate în Tabelul 3. Se observă că intensitățile maximelor de difracție ale ZnTe se îmbunătățesc odată cu creșterea temperaturii sursei de la 560 °C până la 600 °C. Acest lucru poate fi explicat prin faptul că o temperatură mai mare de depunere produce energii cinetice de suprafață mai mari.

Tabelul 3. Parametrii microstructurali ai straturilor subțiri de ZnTe:O

T_S, °C	T_{sub}, °C	2θ, °	I, Counts	a, Å	d, Å	D, nm	ε_{st}
580	320	25,27	1384	6,101	3,523	32,3	$1,12\cdot10^{-3}$
	330	25,27	1464	6,100	3,524	33,2	$1,14\cdot10^{-3}$
	340	25,27	1338	6,102	3,524	28,5	$0,64\cdot10^{-3}$
	350	25,26	1073	6,101	3,524	27,2	$0,47\cdot10^{-3}$
	360	25,26	1193	6,102	3,524	28,9	$0,61\cdot10^{-3}$
560	340	25,28	708	6,099	3,523	27,7	$0,75\cdot10^{-3}$
570		25,27	823	6,101	3,524	28,1	$0,57\cdot10^{-3}$
580		25,26	1297	6,102	3,524	27,2	$0,34\cdot10^{-3}$
590		25,26	1291	6,102	3,525	27,6	$0,47\cdot10^{-3}$
600		25,26	1443	6,014	3,525	27,0	$0,30\cdot10^{-3}$

unde: 2θ- unghiul de difracție pentru maximul cel mai intens; I- intensitatea celui mai intens maximum; d- distanta interplanara; D- dimensiunea cristalitelor; ε_{st} - deformarea rețelei.

Observăm din Tabelul 3, că modificarea temperaturii substratului (T_{sub}) cu 10 °C determină o ușoară schimbare în valoarea dimensiunii cristalitelor, situându-se într-un interval cuprins între 32 nm și 27 nm. În același timp, variația T_{sub} cu același pas de 10 °C modifică și deformarea rețelei (ε_{st}). Modificarea valorii temperaturii sursei (T_S) conduce, de asemenea, la o creștere ușoară a parametrului d, așa cum se arată în cazul variației T_S. Această modificare este mai pronunțată, trecând de la o valoare de 3,5226 Å (pentru T_S=560 °C) până la 3,5250 Å (pentru T_S=600 °C). De asemenea, o ușoară modificare a valorilor dimensiunii cristalitelor (D) și deformării rețelei (ε_{st}) se observă odată cu variația T_S, conform Tabelului 3. Valoarea minimă a ε_{st} și cea mai mare dimensiune a cristalitului (D) au fost obținute pentru probele T_{sub}=360 °C și T_S=590 °C. Această relație între T_{sub} și T_S poate fi atribuită mișcării atomilor interstițiali de Zn în interiorul cristalitelor la granițele acestora, ceea ce duce la disiparea lor și reducerea concentrației de imperfecțiuni ale rețelei.

Utilizând spectrele de reflexie (R) și transmitanță (T) măsurate și cunoscând grosimile straturilor subțiri de ZnTe:O din secțiunile transversale SEM, a fost estimat coeficientul de absorbție (α). Dependența $(\alpha h\nu)^2$=f(hν) pentru straturile subțiri de ZnTe:O depuse la diferite T_{sub} și T_S sunt prezentate, respectiv, în Fig. 5. Estimarea valorii benzii energetice interzise (E_g) prin metoda lui Jan Tauc [7] arată că E_g variază la energii mai mici de la 2,24 eV până la 2,19 eV odată cu creșterea T_{sub} de la 320 °C până la 360 °C. În ceea ce privește variația T_S de la 560 °C până la 600 °C, se poate observa o altă imagine a coeficientului de absorbție la temperatura camerei. Din Fig. 5.b, se poate observa o scădere a coeficientului de absorbție odată cu creșterea T_S, atât în regiunile de absorbție fundamentală, cât și în cele de impurități. Acest fenomen este cauzat de creșterea grosimii stratului subțire de ZnTe:O odată cu creșterea T_S. Estimarea valorii E_g arată că se modifică E_g cu 0,05 eV, ceea ce indică la încorporarea oxigenului în rețeaua cristalină a ZnTe la T_{sub}=340 °C și T_S=580 °C.

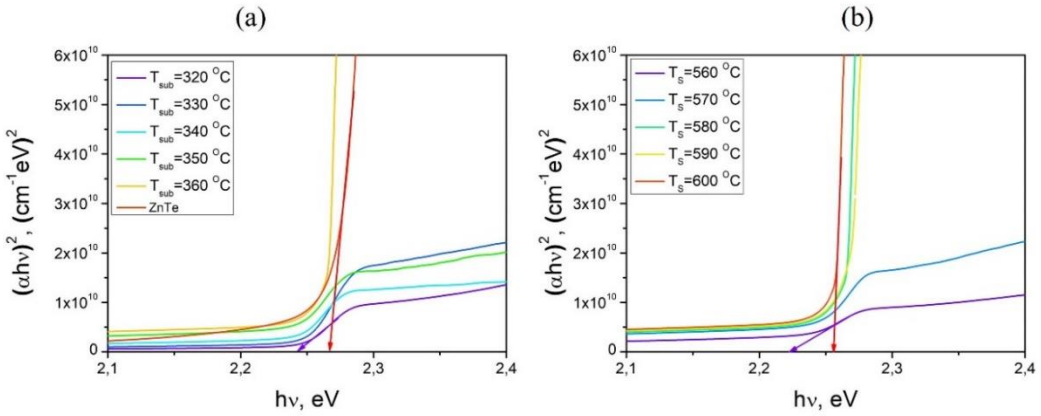


Fig. 5. Dependența $(\alpha h\nu)^2$=f(hν) ale straturilor subțiri de ZnTe:O depuse la diferite T_{sub} (a) și T_S (b)

Spectrele de fotoluminescență (FL) ale straturilor de ZnTe:O, depuse la diferite T_{sub} și T_S sunt prezentate, respectiv, în Fig. 6. În toate spectrele FL, domină o bandă de emisie largă cu maximum la 1,82 eV.

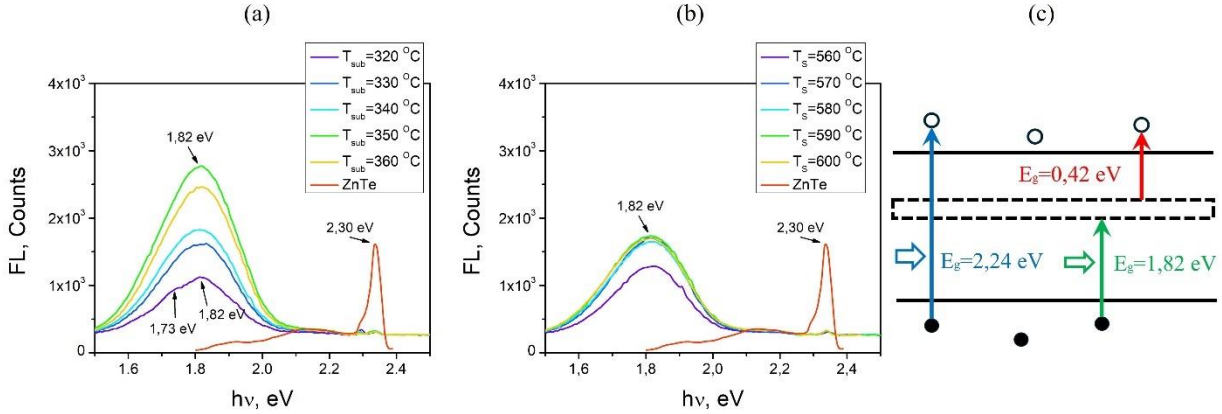


Fig. 6. Spectrele de fotoluminescență ale straturilor de ZnTe:O depuse la diferite T_{sub} (a) și T_S (b) înregistrate la T=300 K, λ_{ex}=532 nm, și diagrama energetică ale straturilor subțiri de ZnTe:O cu bandă intermediară cu maximum situat la 1.82 eV de la banda de valență (c)

Deconvoluția spectrului de FL a probei obținute la T_{sub}=320 °C, prin utilizarea funcției Gauss, arată că banda de emisie este formată din două sub benzi (situate la 1,82 eV și 1,73 eV), care pot fi asociate centrelor de oxigen [8]. De asemenea, în toate spectrele măsurate se poate observa un umăr la 2,16 eV. Conform studiului [9], această emisie în jurul valorii de 2,16 eV este atribuită defectelor create la granița granulelor sau în zone cu densitate mare de dislocații. Această emisie se datorează defectelor native (V_{Zn} și Te_i) ale materialului. Prin urmare, pe baza spectrelor de absorbție și FL măsurate pentru primul set de probe, se poate presupune că această bandă largă poate fi asociată concentrației ionilor de oxigen (O^{2-}), deoarece intensitatea benzii se modifică cu creșterea temperaturii suportului [9]. Fig. 6.c ilustrează diagrama energetică a straturilor subțiri de ZnTe:O.

Așadar, impuritatea izoelectronică de oxigen creează niveluri localizate asemănătoare acceptorului în apropierea fundului benzii de conducție. Ele interacționează rezonant cu banda de

conducție, îndepărtând degenerarea și se formează noi stări hibride, care formează două subbenzi cu minime la k=0. Ca urmare, banda de conducție este împărțită într-o subbandă superioară îngustă E_+, formată din stări localizate, și o subbandă inferioară, mai largă, E_-, formată din stări delocalizate (extinse).

Impuritățile de substituție ale O_{Te} din ZnTe oferă o cale pentru absorbția optică sub-bandă, care este eficientă în dezvoltarea unei noi generații de celule fotovoltaice cu bandă intermediară (IBSC). Aceste dispozitive sunt proiectate să absoarbă, de asemenea, fotoni cu energia mai mică decât a benzii interzise prin intermediul unei subbenzi de energie electronică care este localizată în interiorul benzii interzise a semiconductorului gazdă, producând astfel fotocurent îmbunătățit, menținând ideal în același timp tensiunea de circuit deschis dată de banda interzisă a materialului fotovoltaic gazdă.

În capitolul 4 sunt prezentate studii detaliate asupra caracteristicilor electrice ale structurilor CdS/ZnTe:O, utilizând o varietate de metode și măsurători pentru a determina parametrii esențiali care influențează eficiența heterostructurii.

În Figura 7.a sunt prezentate curbele J-U la polarizare directă în scală semilogaritmică în intervalul de temperaturi 220-350 K. Caracteristicile J-U au o natură complexă și sugerează implicarea diferitelor mecanisme de transport al curentului. Densitatea curentului extrapolat din regiunea directă a dependenței ln$J$=f(U) la U=0 prezintă valoarea J_0, ce este prezentată în Tabelul 4., precum și parametrii electrici. Dependența ln(J_0/T^2)=f(1/T) pentru intervalul de temperatură (280-220) K (Fig. 7.b) reprezintă o linie dreaptă. Din panta ln(J_0/T^2) față de dependența 1/T și din interceptarea la ordonată a pantei liniare respective, s-au obținut valorile energiei de activare (E_A) și constantei Richardson efective (A**), respectiv, 0,98 eV și 69 A/cm^{2}K^2. Înălțimea barierei în regiunea de temperatură (220-280) K se modifică de la 0,69 eV (pentru T=220 K) până la 1,01 eV (pentru T=290 K), în timp ce factorul diodic (n_2) a variat, respectiv, de la 20,78 până la 10,95. Conform Tabelului 4, valorile factorului de idealitate n_1 s-au modificat de la 1,96 (pentru T=290 K) până la 2,01 (pentru T=350 K). Aceste caracteristici ne permit să presupunem că, la polarizare directă, la temperaturi mai ridicate, mecanismul de transport al curentului este dominat de recombinare la interfață. În mod normal, impuritățile de volum, imperfecțiunile de suprafață, dislocațiile sunt căi de recombinare.

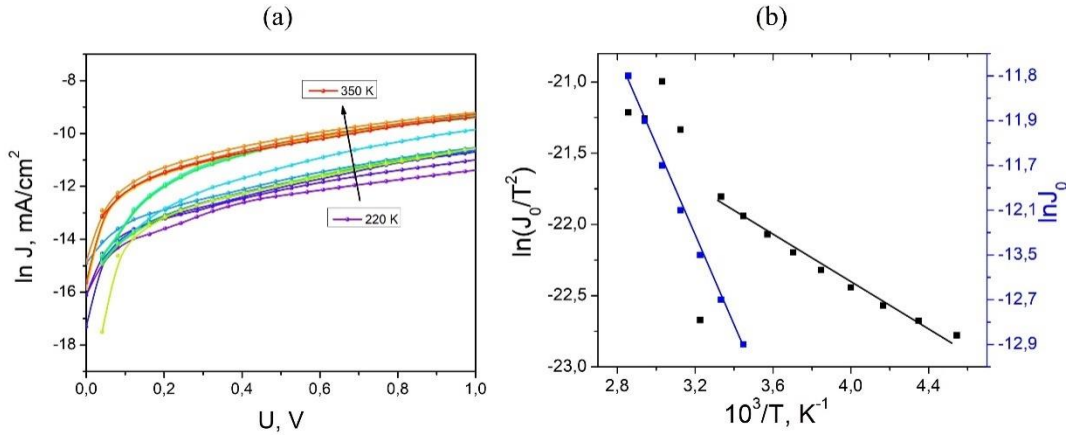


Fig. 7. Dependența lnJ=f(U) (a) și dependența ln(J_0/T^2)=f(1/T) (b) a *HJ* CdS/ZnTe

Tabelul 4. Parametrii electrici ai *HJ* CdS/ZnTe pentru diferite temperaturi de măsurare

T, K	ln J_0	J_0, 10^{-2} mA/cm^2	n_1 (U<0,2 V)	n_2 (U> 0,2 V)	$q\Phi_{b0}$, eV	U_d, V
220	-13,0	0,62	1,76	20,78	0,69	0,43
230	-12,8	0,75	1,34	15,63	1,1	0,69
240	-12,6	0,91	0,83	13,33	1,26	0,79
250	-12,4	1,12	1,71	13,82	1,34	0,84
260	-12,2	1,37	2,41	13,18	1,17	0,73
270	-12,0	1,67	2,56	11,98	1,31	0,82
280	-11,8	2,04	2,08	11,88	1,39	0,68
290	-11,6	2,49	1,96	10,95	1,01	0,63
300	-11,4	3,05	2,18	10,67	1,39	0,87
310	-12,2	1,37	1,97	12,05	1,61	1,01
320	-10,8	5,56	1,96	11,09	1,15	0,72
330	-10,4	8,30	1,81	12,49	1,15	0,72
340	-10,6	6,79	1,60	11,33	1,33	0,83
350	-10,5	7,50	2,01	12,10	1,61	1,01

Studierea dependenței C-U *a HJ* CdS/ZnTe la diferite frecvențe 10 kHz, 100 kHz, 1 MHz indică faptul că forma curbei C-U prezintă variație ciclică sau histerezis. Cu creșterea valorii frecvenței de măsurare de la 10 kHz până la 1 MHz, valoarea capacității structurii CdS/ZnTe se micșorează aproape cu un ordin, ce indică la aportul stărilor de la interfața heterostructurilor. Dependența capacității din Fig. 8. arată două pante, una pentru tensiuni negative și alta pentru tensiuni pozitive, sugerând că există două mecanisme diferite care contribuie la capacitate în aceste regiuni de tensiuni, care provin din răspunsuri diferite ale sarcinilor fixe și mobile între regiunea interfeței și volumul HJ. Densitatea stărilor la interfața CdS/ZnTe atinge valoarea de $4{,}9\cdot10^{10}$ eV^{-1}cm^{-2}. Măsurătorile C-U permit să estimăm, de asemenea, grosimea regiunii de sarcină spațială, care variază în funcție de frecvența de măsurare, de la 2,16 μm (pentru 10 kHz) până la 4,33 μm (pentru 1 MHz). În tot intervalul temperaturilor se observă o valoare care se modifică ușor în jurul valorii de 1,2 V a U_d. Densitatea stărilor acceptoare (care este doar N_A) estimată din panta liniară

a dependențelor C^{-2}=f(U) a atins valorile de $0{,}81\cdot10^{17}$ cm^{-3} (350 K), $1{,}22\cdot10^{17}$ cm^{-3} (300 K) și $3{,}23\cdot10^{14}$ cm^{-3} (220 K).

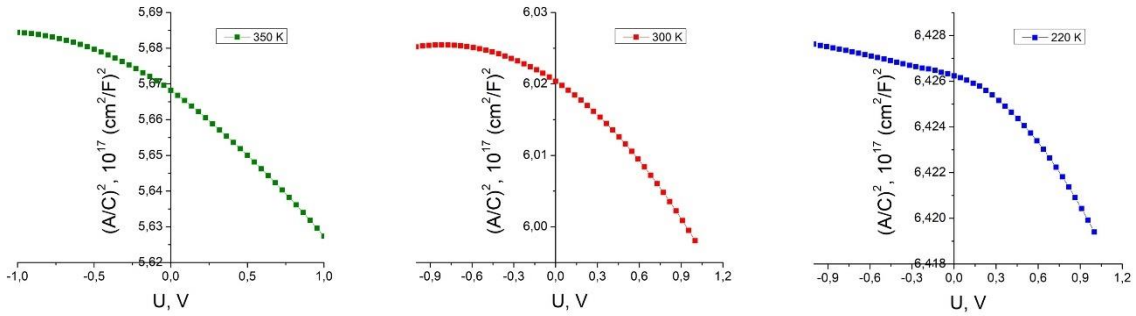


Fig. 8. Dependența $(1/C)^2$=f (U) a *HJ* CdS/ZnTe la diferite temperaturi de măsurare

Pentru a construi diagrama benzilor de energie a unei heterojoncțiuni, este esențial să utilizăm datele din caracteristicile curent-tensiune (J-U) și capacitate-tensiune (C-U), precum și să cunoaștem valorile afinităților electronice și poziția nivelului Fermi pentru fiecare material component. Datele numerice au fost prezentate în Tabelul 5.

Tabelul 5. Parametri electrici ai HJ CdS/ZnTe obținuți din datele experimentale

Parametrii	**CdS**	**ZnTe**
E_g, eV	2,40	2,20
χ, eV	4,5	3,5
Masa efectivă, m*, kg	0,17 m_o	0,12 m_o
m_o, kg	$9{,}1\cdot10^{-31}$	
Parametrul rețelei cristaline a și c, Å	a=4,141 c=6,720	a=6,103
N_D, cm^{-3}	$9{,}0\cdot10^{19}$	-
N_A, cm^{-3}	-	$3{,}55\cdot10^{15}$
N_V, cm^{-3}	-	$2{,}24\cdot10^{18}$
N_C, cm^{-3}	$2{,}41\cdot10^{18}$	-
ε_r	9,35	10,3
	HJ	
E_C-E_F, eV	-0,07	
E_F-E_V, eV	0,17	
ΔE_C, eV	0,9	
ΔE_V, eV	-0,72	

În baza datelor din Tabelul 5, a fost construită diagrama benzilor de energie ale HJ CdS/ZnTe la o tensiune directă sub 0,2 V (Fig. 9.a) și peste 0,2 V (Fig. 9.b).

De asemenea s-au realizat măsurători ale capacității (C) și G/ω (partea reală a conductanței normalizate în funcție de frecvență) la diferite frecvențe și temperaturi.

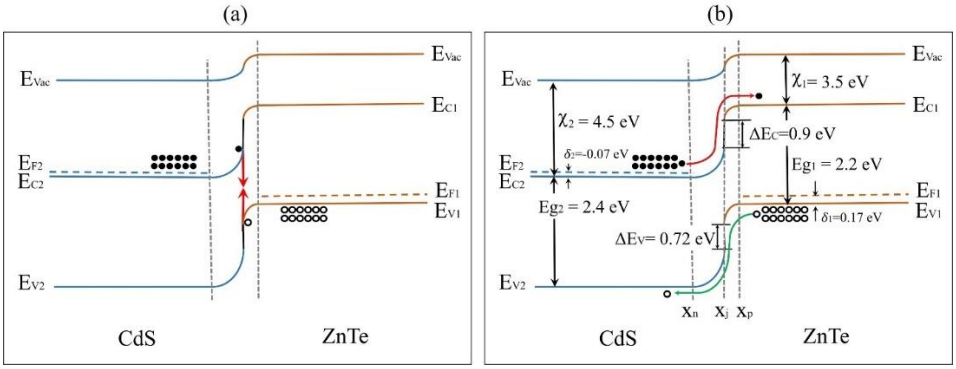


Fig. 9. Diagramele benzilor de energie ale HJ CdS/ZnTe la tensiune directă sub 0,2 V (a) și peste 0,2 V (b).

Fig. 10. prezintă modul în care capacitatea variază în funcție de frecvență pentru diverse temperaturi de măsurare. În grafic se evidențiază un platou la frecvențe cuprinse între 1 MHz și 100 kHz, indicând că capacitatea se menține relativ constantă în această gamă de frecvențe. Ulterior, urmează o perioadă de relaxare dielectrică la frecvențe mai mari de 10^5 Hz. Fig. 10.b prezintă modul în care constanta dielectrică depinde de temperatură pentru diferite frecvențe de măsurare în cazul *HJ* CdS/ZnTe. Se poate observa că constanta dielectrică are același comportament ca și capacitatea electrică și crește într-un mod ușor și monoton odată cu creșterea temperaturii.

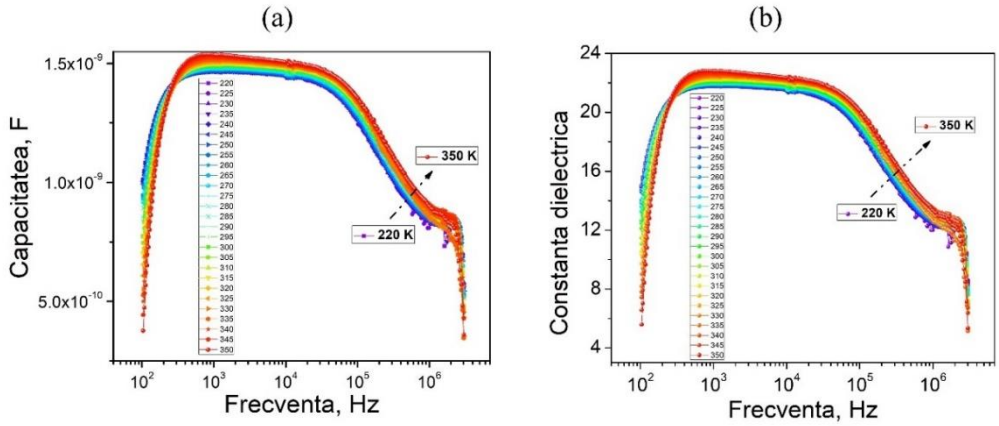


Fig. 10. Variația capacității (a) și constatei dielectrice (b) în funcție de frecvență a HJ CdS/ZnTe pentru diferite temperaturi de măsurare

Tangenta unghiului de pierdere sau factorul de disipație (*tanδ*) pot fi extrase direct din datele de măsurare. Este cunoscut faptul că vectorul de inducție electrică reprezintă tangenta unghiului de pierdere, adică $tan\delta=\vec{D}$. Fig. 11.a ilustrează dependența *tanδ=f(T)* pentru diferite frecvențe de măsurare. Se poate observa că, odată cu creșterea frecvenței la toate temperaturile studiate, *tanδ* scade, acest fenomen fiind probabil atribuit micșorării gradului de orientare a dipolilor electrici a moleculelor. Cu toate acestea, începând de la o valoare de aproximativ 10 MHz, *tanδ* începe să crească din nou. Fig.11 .b ilustrează modul în care conductivitatea totală *σ*

variază în funcție de frecvență. La frecvențe joase, se remarcă o comportare care nu depinde de frecvență, aceasta corespunzând conductivității pentru curent continuu, în timp ce la frecvențe înalte prevalează componenta alternativă a conductivității. Conductivitatea alternativă este influențată nu numai de temperatură, ci și de frecvență.

$$\sigma_{ac} = A\omega^{S}, \tag{1}$$

unde *A* reprezintă o constantă, ω este frecvența unghiulară, iar *S* este un exponent care, în general, are o valoare mai mică sau egală cu unu.

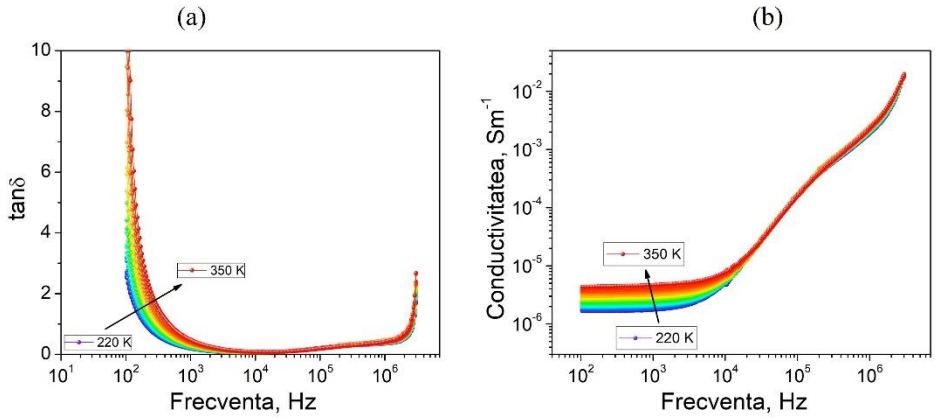


Fig. 11. Dependența *tanδ=f(frecvență)* a *HJ* CdS/ZnTe pentru diferite temperaturi de măsurare (a) și dependența de frecvență a conductivității totale (b).

Valoarea și comportamentul exponentului *S* din funcția față de temperatură și/sau frecvență determină mecanismul predominant de conducție în material. În funcție de valoarea și comportamentul lui *S*, au fost dezvoltate mai multe modele teoretice pentru a explica mecanismul de conducție al materialelor (QMT, SPT, LPT și CBH).

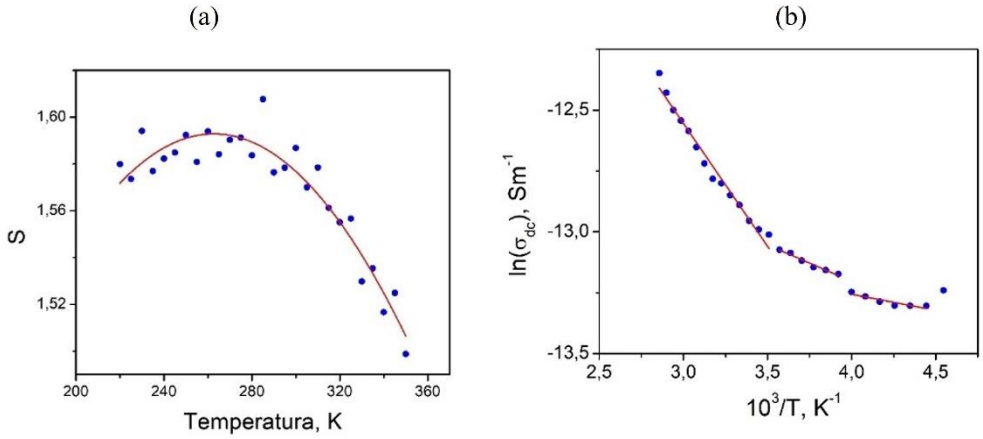


Fig. 12. Exponentul S (a) și conductivitatea σ_{DC} (b) în funcție de temperatura de măsurare a HJ CdS/ZnTe

În cadrul modelului de tunelare cuantic (QMT), se sugerează că *S* este influențat de frecvență, dar nu de temperatură. În cazul modelului de tunelare (SPT), se prezice că *S* crește pe

măsură ce temperatura crește. Pentru tunelarea (LPT), *S* depinde atât de temperatură, cât și de frecvență. În modelul CBH (correlated barrier hopping), în care fenomenul de conducție derivă din saltul sincronizat al purtătorilor de sarcină electrică între stările vecine cele mai apropiate, se presupune că *S* depinde atât de temperatură, cât și de frecvență, iar *S* ar trebui să scadă pe măsură ce temperatura crește (Fig. 12.).

În dependența conductivității de frecvență, se pot observa două regiuni distincte în apropierea frecvenței de 100 kHz, unde s-a remarcat relaxarea dielectrică în conductivitate. La frecvențe mai mari, conductivitatea scade semnificativ pe măsură ce frecvența crește, sugerând că tinde să se apropie de o conductivitate electrică în curent continuu în jurul valorii de 100 kHz. În acest moment, se observa o nouă relaxare dielectrică care duce la o nouă fază de scădere accentuată a conductivității, iar aceasta rămâne constantă până la frecvențe de 10^5 Hz. Prin analiza celor două regiuni prezentate în graficul măsurat la 350 K, conform legii Jonscher, s-a determinat că variația conductivității în funcție de frecvență se desfășoară conform valorii parametrului *S* de la 1,63 la frecvențe joase (1 MHz -5 MHz) și de 2,7 la frecvențe mai mari ca 5 MHz. După cum se observă din Fig. 12.b, relația dintre conductivitate și temperatură prezintă o variație liniară în intervalul de temperatură (280-350) K. Aceasta sugerează că comportamentul structurii CdS/ZnTe seamănă cu cel al unui cristal feroelectric cu conductivitate ionică descris de ecuația:

$$\sigma_{dc} = \sigma_0 exp\left(-\frac{E_a}{k_B T}\right). \quad (2)$$

unde în intervalul de temperatură (280-350) K, energia de activare este E_{a1}=0,98 eV, E_{a2}=0,90 eV și E_{a3}=0,86 eV.

Pentru a confirma comportamentul componentei conductivității în intervalul de temperatură (220-280) K, a fost analizată impedanța electrică a *HJ* CdS/ZnTe. Fig. 13.a prezintă dependența de frecvență a componentelor reale *Z'* și imaginare *Z"* ale impedanței complexe $Z=Z'-iZ''$ (unde i=-1) pentru *HJ* CdS/ZnTe cu aria contactului de Ag de 0,3 cm^2, în intervalul de frecvență 100 Hz - 10 MHz, la diferite temperaturi. Măsurătorile de impedanță complexă ale probei furnizează informații utile despre componenta reală *Z'* (partea rezistivă) și componenta imaginară *Z"* (partea reactivă) a impedanței complexe. Este cunoscut faptul că în cazul unei probe cu capacitate introdusă într-un câmp electromagnetic alternativ de frecvență ω, schema electrică echivalentă a *HJ* CdS/ZnTe:O [10] este reprezentată în Fig. 13.b.

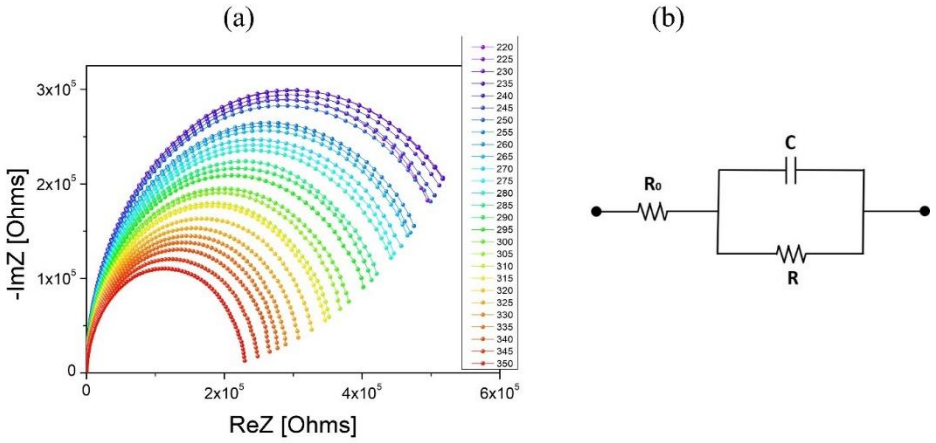


Fig. 13. Dependența grafică a spectrelor de impedanță a *HJ* CdS/ZnTe (a) și circuitul echivalent al unei probe utilizate în măsurarea impedanței complexe (b)

Conductivitatea electrică complexă σ a probei conține componentele σ' și σ'', care reprezintă, respectiv, partea reală și partea imaginară ale conductivității electrice complexe. Acestea pot fi exprimate prin relațiile:

$$\sigma' = \frac{\rho'}{M'}, \tag{3}$$

și

$$\sigma'' = \frac{\rho''}{M'}, \tag{4}$$

unde M reprezintă modulul complex al impedanței, definit prin relația:

$$M = |Z^*|^2 \cdot \left(\frac{A}{d}\right)^2, \tag{5}$$

unde $\boldsymbol{Z^* = \sqrt{Z'^2 + Z^{*2}}}$ reprezintă modulul impedanței complexe a HJ CdS/ZnTe. Modulul impedanței complexe (M'') a *HJ* CdS/ZnTe este prezentat în Fig. 14.a. M″ prezintă un maxim care se schimbă la o frecvență mai mare odată cu creșterea temperaturii, indicând o corelație între mișcările sarcinilor ionice mobile. Regiunea de frecvență în care apar maxime indică tranziția purtătorilor de sarcină de la mobilitatea la distanță lungă la cea scurtă. Astfel de rezultate pot fi cauzate, eventual, de o lipsă de forță de restabilire care guvernează mobilitatea purtătorilor de sarcină sub acțiunea unui câmp electric indus. Acest comportament indica faptul că, pe măsură ce frecvența crește, fiecare ion se deplasează pe o cale din ce în ce mai scurtă, până când câmpul electric se schimbă atât de rapid, încât ionii doar se deplaseaza în limitele valorilor de energie a gropii potențiale și ionul poate face doar mișcare localizată în interiorul ei. Observăm că maximul polarizării interfaciale se deplasează către frecvențe mai mari pe măsură ce temperatura de măsurare crește, indicînd existența a 2 procese de relaxare dielectrică descrise prin legea lui Vogel-Fulcher-Tammann (VFT).

Conform teoriei lui Debye [11], relația dintre frecvența maximă ω_{max} la care componenta imaginară Z'' are un maxim, constanta de timp de relaxare (τ), ce reprezintă timpul după care amplitudinea oscilației scade la 1/e din valoarea maximă, este descris de ecuația:

$$2\pi\omega_{max}\tau = 1 \quad (6)$$

Folosind valorile experimentale ale frecvenței ω_{max}, s-a estimat constanta de timp de relaxare τ și s-a construit dependența $ln\tau=f(1/T)$, prezentată în Fig. 14.b.

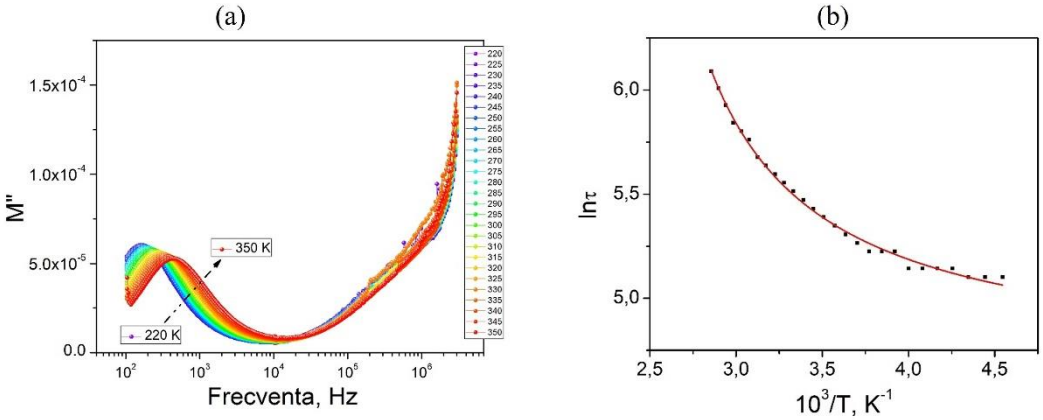


Fig. 14. Dependenta modulul impedanței complexe (M″) (a) și dependența $ln\tau=f(1/T)$ a HJ CdS/ZnTe (b)

Se poate observa o dependență neliniară între logaritmul natural al timpului de relaxare și inversul temperaturii. Datele privind timpul de relaxare dielectrică din Fig. 14 . se supun relației VFT, care este folosită pe scară largă pentru a descrie dinamica relaxării în diverse structuri:

$$\tau(T) = \tau_\infty \left[\frac{-DT_0}{R(T-T_0)}\right] \quad (7)$$

unde, T_0 - temperatura lui Vogel, cunoscută și sub denumirea de temperatură de tranziție, τ_∞ - timpul la care temperatura T tinde către infinit ($T\rightarrow+\infty$), R - constanta universală a gazelor. D - constanta specifică a relației VFT. Valorile foarte mici ale temperaturii Vogel arată că timpul, de relaxare pentru toate probele se supune legii clasice.

Așadar, interacțiunea dintre conductivitatea ionică și polarizarea interfacială este un punct cheie pentru înțelegerea mecanismului de transport al curentului în HJ CdS/ZnTe.

În **Capitolul 5 s**unt prezentați parametrii în regim de fotoelement: tensiunea circuitului deschis (U_{CD}), densitatea curentului de scurtcircuit (J_{SC}), factorul de umplere (FF), eficiența cuantică externă (EQE) și eficiența de conversie (η) în funcție de condițiile tehnologice. Caracteristicile fotoelectrice integrale exprimă dependența densității curentului de scurtcircuit și tensiunii de circuit deschis de iluminare.

Fig. 15.a prezintă caracteristicile J-U ale HJ CdS/ZnTe obținute la diferite temperaturi ale substratului (T_{sub}). Cel mai bun rezultat pentru tensiunea circuitului deschis (U_{CD}), care a fost de

0,48 V, a fost înregistrat la temperatura substratului de 340 °C, în timp ce cea mai bună valoare a densității curentului de scurtcircuit (J_{SC}), de 1,15 A/cm^2, a fost observată la structura depusă la 360 °C. În cadrul celui de-al doilea set, am variat temperatura sursei (T_S) între 560 °C și 600 °C, menținând temperatura substratului constantă la 340 °C. Cea mai bună densitate a curentului de scurtcircuit a fost înregistrată pentru T_S=580 °C, în timp ce cea mai bună tensiune a circuitului deschis a fost obținută pentru T_S=600 °C.

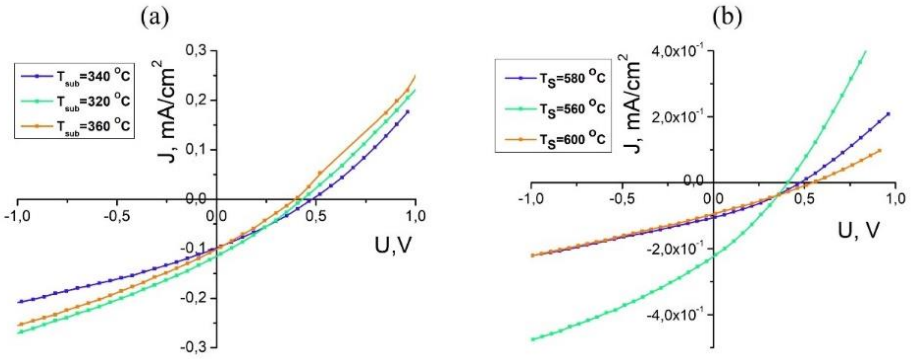


Fig. 15. Caracteristicile J-U ale *HJ* CdS/ZnTe obținute la diferite temperaturi ale substratului (a) și sursei (b) la iluminare 100 mW/cm^2, 300 K.

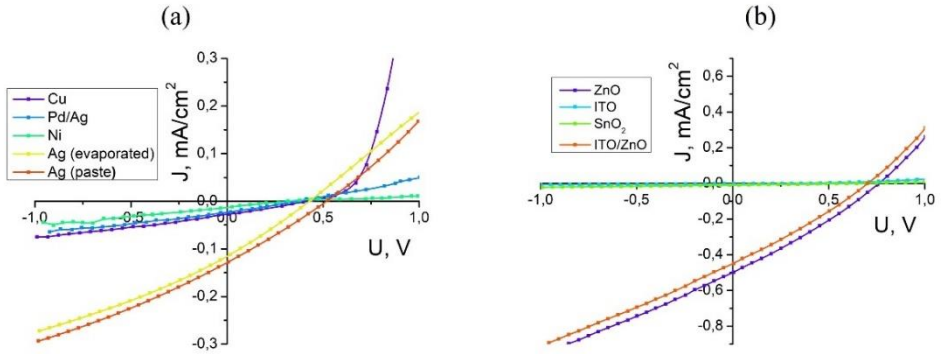


Fig. 16. Caracteristicile J-U ale *HJ* CdS/ZnTe cu diferite metale pentru contactul din spate (a) și cu diferite contacte frontale (b), la iluminare 100 mW/cm^2, 300 K.

Designul și tehnologiile utilizate pentru contactul din spate pot varia în funcție de tipul de dispozitiv fotovoltaic și de materialele folosite. Scopul principal al acestui contact este de a maximiza generarea de energie electrică din spectrul vizibil absorbit de celulă. În acest context, a fost realizat un set de celule fotovoltaice CdS/ZnTe, utilizând diverse metale pentru contactul din spate al ZnTe-ului. Caracteristicile J-U ale acestor celule, măsurate sub iluminare de 100 mW/cm², cu diverse metale la contactul din spate, sunt prezentate în Fig. 16.a. Contactul din spate influențează semnificativ eficiența celulelor fotovoltaice, deoarece ZnTe are o valoare ridicată a lucrului de ieșire, de 5,3–5,8 eV. Rezistența de contact între ZnTe și metalele Cu, Pd/Ag, Ni, Ag a fost calculată pe baza caracteristicilor J-U ale structurilor Cu/ZnTe, Ni/ZnTe, Ag/ZnTe și Pd/Ag/ZnTe. S-a observat că cel mai potrivit metal pentru structura CdS/ZnTe este Ag, depus prin

intermediul unei paste. Contactul frontal al unei celule fotovoltaice, care intră în contact direct cu lumina solară, joacă un rol esențial în colectarea și direcționarea curentului electric generat. Acesta se află opus contactului din spate pe suprafața structurii. Contactul frontal poate fi format din mai multe straturi subțiri și funcționale, cum ar fi straturi de materiale conductoare și straturi anti-reflexive. Pentru a optimiza performanța, a fost obținut un set de probe cu diferiți oxizi conductori transparenți (TCO). Din Fig. 16.b, se poate observa că cel mai eficient TCO este ZnO, prezentând eficiență maximă.

Așadar, în cadrul cercetării proprietăților fotoelectrice s-au stabilit două tipuri de celule fotovoltaice: CdS/ZnTe:O/PEDOT:PSS/Ag și CdS/ZnTe:Mn/Ag cu parametri fotovoltaici mai buni, a căror tehnologie poate fi reprodusă. În procesul de fabricare al acestora, s-au urmat următorii pași tehnologici: în calitate de contactul frontal a fost utilizat ZnO; peste stratul de ZnO a fost depus un strat subțire de CdS (~ 200 nm); depunerea stratului absorbant ZnTe:O s-a realizat la T_{sub}=340 °C și T_S=600 °C, cu un timp de depunere de 18 minute; după depunerea stratului absorbant ZnTe, am aplicat un strat subțire de PEDOT:PSS prin metoda centrifugării, acesta funcționând ca strat buffer la contactul din spate; pentru a crea contactul din spate, s-a folosit pastă de argint. Ca rezultat al acestor etape, am obținut următoarele caracteristici pentru celula fotovoltaică CdS/ZnTe/PEDOT:PSS/Ag: tensiunea de circuit deschis U_{CD}=0,84 V, densitatea curentului de scurtcircuit J_{SC}=2,5·10^{-4} A/cm^2, factorul de umplere FF=38,6 %, și o eficiență de conversie a energiei solare în energie electrică de 0,1% (Fig. 17.).

Tabelul 6. Parametrii fotovoltaici ai celor mai bune HJ CdS/ZnTe

Proba	**U_{CD}, V**	**J_{SC}, mA/cm^2**	***FF*, %**	**η, %**
CdS/ZnTe:O	0,84	0,25	38,6	0,1
CdS/ZnTe:Mn	0,47	0,24	34,2	0,05

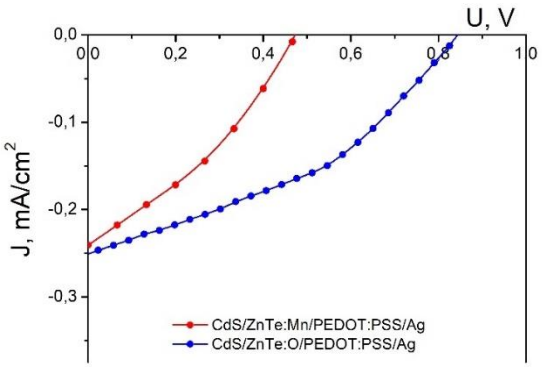


Fig. 17. Caracteristicile J-U a celor mai bune *HJ* CdS/ZnTe

În celulele fotovoltaice obținute are loc conversia numai a unei părți din energia radiației incidente. Cea mai mare parte a energiei se pierde în rezultatul unor fenomene ce au loc în timpul conversiei. Aceste fenomene sunt: reflexia luminii de la suprafața semiconductorului; trecerea

luminii prin semiconductor fără absorbție; disipația energiei electronilor și a golurilor generați de fotoni cu hν>E_g; micșorarea concentrației purtătorilor de sarcină de neechilibru în urma recombinării lor la suprafața semiconductorului și în volumul acestuia; pierderile pe rezistențele R_S și R_{sh}. Eficiența cuantică externă mică (Fig.18) în cazul *HJ* CdS/ZnTe cu Ag evaporat ca contact ohmic este aproape de 0,2 în maximumul situat la lungimea de unda 550 nm, iar eficiența cuantică internă este mai mare decât eficiența cuantică externă.

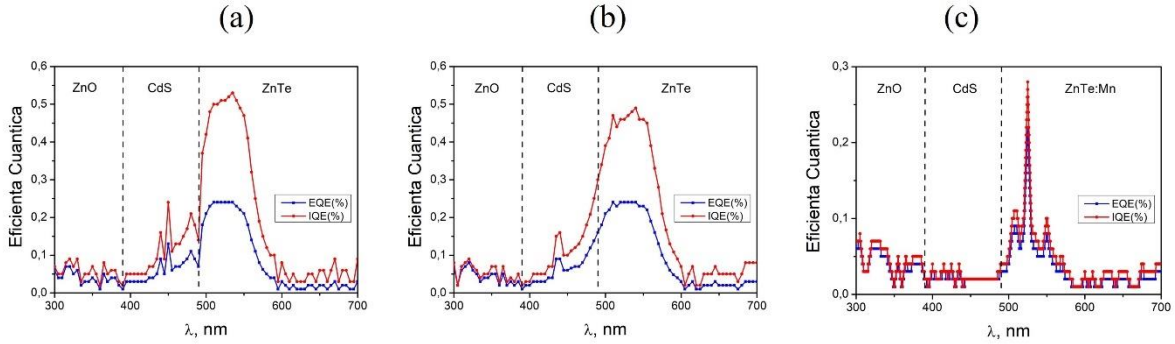


Fig. 18. Distribuția spectrală a eficienței cuantice interne și externe a CdS/ZnTe/PEDOT:PSS/Ag (din pastă) (a), CdS/ZnTe/PEDOT:PSS/Ag evaporat (b) și CdS/ZnTe:Mn/PEDOT:PSS/Ag din pastă (c)

Stratul buffer depus pe absorbantul ZnTe înainte de depunerea contactului de Ag depus prin evaporare, mărește valoarea eficienței cuantice interne până la aproape 0,5, iar valoarea eficienței cuantice externe rămâne nemodificată, egala cu 0,2. Eficiența cuantică internă a *HJ* CdS/ZnTe cu strat buffer de PEDOT:PSS și contact ohmic depus din pasta de Ag indică o valoare a eficienței cuantice interne puțin mai mare ca 0,5, iar eficiența cuantică externă indică 0,2.

În cazul dopării stratului de ZnTe cu Mn valoarea eficienței cuantice atât interne, cât și externe se micșorează până la valoarea de 0,1. În toate designurile de celulă fotovoltaică, eficiența cuantică atât internă, cât și externă la lungimi de undă mari este limitata de E_g a ZnTe.

CONCLUZII GENERALE

1. Au fost simulate caracteristicile J-U ale dispozitivului fotovoltaic CdS/ZnTe pentru următorii parametri de intrare: d_{ZnTe}=1,0 μm, d_{CdS}=5 nm, d_{ZnO}=20 nm $E_{g(ZnTe)}$=2,2 eV, $E_{g(CdS)}$=2,4 eV, $E_{g(ZnO)}$=3,3 eV, $\Phi_{(Ag)}$=4,7 eV cu programul SCAPS-1D, și au fost obținuți următorii parametri fotovoltaici: U_{CD}=0,89 V, J_{SC}=25,9 mA/cm^2, FF=72,6, η=16,78%.
2. Au fost elaborate condițiile tehnologice optime de obținere ale straturilor subțiri de ZnTe, CdS prin metoda volumului cuazi-închis, și a straturilor subțiri de ZnO prin metoda pirolizei prin pulverizare. Straturile subțiri de CdS prezintă structură policristalină de tip hexagonală indiferent de mediul de tratare. Tratarea în vid la T=400 °C timp de o oră permite obținerea straturilor policristaline cu dimensiunea cristalitelor 0,48 nm, transmitanță medie de aproximativ 85%, iar valorile lărgimii benzii interzise (E_g), indiferent de mediul de tratare indică valoarea de 2,40 eV±0,02 eV. Studiile efectuate asupra straturilor subțiri de ZnTe:O obținute la temperatura substratului (T_{sub}) cuprinsă între 320 °C și 360 °C și temperatura sursei (T_S) între 560 °C și 600 °C indică regimul optimal T_{sub}=340 °C și T_S=600 °C. Straturile subțiri de ZnTe obținute prezintă structură de tip zincblendă, încadrată în grupul spațial F43m (216) cu orientarea preferențială [111].
3. După depunere straturile subțiri de ZnTe obținute la diferite T_{sub} și T_S au fost tratate termic în flux de O_2 la temperatura 400 °C, timp de 60 min. Analiza EDX indică faptul că oxigenul se incorporează în rețeaua cristalină a ZnTe și cantitatea acestuia se micșorează odată cu creșterea temperaturii sursei de la 5,88% (pentru T_S=560 °C) până la 0,6% (pentru T_S=600 °C), în timp ce cu creșterea T_{sub} cantitatea de O_2 se mărește și la T_{sub} =360 °C este 4,49%. Aceste rezultate indică formarea unui aliaj semiconductor diluat cu o bandă intermediară în stratul de ZnTe dopat cu oxigen.
4. Analiza spectrelor de transmitanță și reflectanță indică faptul că cu creșterea temperaturii substratului (T_{sub}) de la 320 °C până la 360 °C se modifică valoarea E_g a straturilor de ZnTe:O de la 2,24 eV până la 2,19 eV, în timp ce temperatura sursei (T_S) nu influențează valoarea E_g. Spectrele de fotoluminescență (FL) ale straturilor obținute în intervalul de T_{sub}=320 - 360 °C sunt dominate de benzi largi situate la 1,73 eV și 1,82 eV, a căror poziție e determinată de temperatura substratului, pe când la variația *Ts* predomină numai banda 1,82 eV, atribuite benzii intermediare formate de impuritatea izoelectronică de oxigen.
5. Straturile subțiri de ZnO nedopate cât și dopate cu Al indiferent de natura atmosferei de obținere prezintă structură policristalină de tip hexagonală cu orientare preferată [0002]. Cea mai bună cristalinitate prezintă structura dopată cu 1% de Al obținută în atmosferă de O_2, unde D=31 nm, ε_{st}=1,4·10^{-3}. Conform studiului topografic suprafețele straturilor de ZnO obținute în atmosferă de O_2 sunt mai rugoase și ating cele mai mari valori: R_{MS}=60,96 nm și R_a=1,45 nm, însă prezintă

transmitanță medie de ~90%, cu E_g=3,22 eV, conductibilitate de 1316 $(\Omega \cdot cm)^{-1}$ și concentrația purtătorilor de sarcină electrică $1,25 \cdot 10^{21}$ cm^{-3}.

6. Tehnologia de obținere a structurilor CdS/ZnTe:O include: în calitate de contact frontal ZnO (~400 nm); apoi un strat subțire de CdS (~200 nm) tratat termic în vid; apoi s-a crescut stratul absorbant de ZnTe:O (~ 3,0 μm) prin metoda CSS, după depunerea căruia, s-a aplicat stratul subțire de PEDOT:PSS prin metoda centrifugării, acesta funcționând ca strat buffer la contactul din spate; pentru contactul din spate, s-a folosit pastă de argint.
7. Conform caracteristicilor C-U a structurilor CdS/ZnTe:O grosimea regiunii de sarcină spațială variază în funcție de frecvența de măsurare a capacității, începând de la 2,16 μm pentru frecvența de 10 kHz și ajungând la 4,33 μm pentru o frecvență de 1 MHz, și se află în ZnTe, iar densitatea stărilor la interfața dintre CdS și ZnTe atinge o valoare de $4,9 \cdot 10^{10}$ $eV^{-1}cm^{-2}$. Concentrația efectivă a impurităților acceptoare la temperatura camerei atinge valoarea de $7,4 \cdot 10^{14}$ cm^{-3}.
8. Caracteristicile J-U și C-U a structurilor CdS/ZnTe:O indică că curentul direct este dominat de emisia termoionică și recombinarea prin stări de interfață și capcane la toate temperaturile, iar la temperaturi mai mari de temperatura camerei mai intensă este recombinarea prin stări de interfață și capcane decât componenta de emisie termoionică. Conductivitatea totală la frecvențe joase corespunde conductivității ionice, în timp ce la frecvențe mai mari prezintă conductivitate de polarizare la interfață.
9. Studiul caracteristicilor J-U la iluminare cu lumină integrală de 100 mW/cm^2 arată că creșterea grosimii stratului absorbant de ZnTe:O în celula fotovoltaică CdS/ZnTe:O are ca rezultat creșterea tensiunii de circuit deschis și densității curentului de scurtcircuit până la o valoare maximă, respectiv, U_{CD}=0,84 V și J_{SC}=0,25 mA/cm^2. Valoarea randamentului de conversie al energiei solare în energie electrică este 0,13%. Eficiența cuantică internă indică o valoare mai mare de 0,5 în intervalul lungimilor de undă 490-590 nm.

RECOMANDĂRI

Simularea caracteristicilor J-U a HJ CdS/ZnTe indică randament de conversie a energiei solare în energie electrica de 16,78%. Pentru atingerea experimentală a acestei valori este necesar de optimizat tehnologia de obținere ale straturilor de ZnTe. Analiza proprietăților structurale, optice ale straturilor de ZnTe confirma formarea unui aliaj semiconductor diluat în rezultatul tratării termice în oxigen la temperatura de 420 °C, timp de 40 min și formarea benzii intermediare de O_{Te}. Cu părere de rău în cadrul formării structurii în timpul tratării termice această bandă dispare datorită difuziei elementelor componentelor de „fereastră optică" și absorbant cu formarea la interfață a unui strat cu bandă interzisă mai mică decât a ZnTe, captând aproape toți purtătorii de sarcină electrică liberi pe imperfecțiunile de rețea de la interfața HJ. Pentru a reuși realizarea unui aliaj semiconductor ZnTe diluat în structura joncțiunii este necesar:

a) de mărit distanta dintre evaporator și substrat în sistemul de evaporare a ZnTe și de dopat cu oxigen în timpul depunerii în incinta de vid, pentru a obține o concentrație mai mare a oxigenului;
b) de creat proces tehnologic de obținere a componentelor astfel încât să se excludă difuzia elementelor componentelor structurii;
c) de a propune un alt strat buffer, decât cel de CdS;
d) de a utiliza în calitate de contact ohmic metale sau aliaje a căror lucru de extracție al electronilor este mai mare de 5,5 eV.

BIBLIOGRAFIE

1. YANG, Y., HOANG, M., BHARDWAJ, A., WILHELM, M., MATHUR, S., WANG, H. Perovskite solar cells based self-charging power packs: Fundamentals, applications and challenges. In: Nano Energy. 2022, nr. 94, pp. 106910.
2. TURKAY, D., ARTUK, K., CHIN, X., JACOBS, D., MOON, S., WALTER, A., WOLFF, C. High-efficiency (> 30%) monolithic perovskite-Si tandem solar cells with flat front-side wafers. In: Research Square. 2023.
3. KAPADNIS, R., BANSODE, S., SUPEKAR, A., BHUJBAL, P., KALE, S., JADKAR, S., PATHAN, H. (2020). Cadmium telluride/cadmium sulfide thin films solar cells: a review. In: ES Energy & Environment. 2020, nr. 10(20), pp. 3-12.
4. SCARPULLA, M., MCCANDLESS, B., PHILLIPS, A., YAN, Y., HEBEN, M., WOLDEN, C., HAYES, S. CdTe-based thin film photovoltaics: Recent advances, current challenges and future prospects. In: Solar Energy Materials and Solar Cells. 2023, nr. 255, pp. 112289.
5. WANG, W., LIN, A., PHILLIPS, J. Intermediate-band photovoltaic solar cell based on ZnTe: O. In: Applied Physics Letters. 2009, nr. 95(1).
6. SINGH, H., SINGH, T., SHARMA, J. Review on optical, structural and electrical properties of ZnTe thin films: effect of deposition techniques, annealing and doping. In: ISSS Journal of Micro and Smart Systems. 2018, nr. 7(2), pp. 123-143. Disponibil: DOI: 10.1007/s41683-018-0026-2
7. YANG, Q., LIU, C., CUI, L., ZHANG, L., ZENG, Y. Structural, surface, and electrical properties of nitrogen ion implanted ZnTe epilayers. In: Applied Physics A. 2014, nr. 116, pp. 193-197.
8. GARCIA, J., REMON, A., MUNÑZ, V., TRIBOULET, R. Annealing-induced changes in the electronic and structural properties of ZnTe substrates. In: Journal of Materials Research. 2000, nr. 15, pp. 1612-1616.
9. NISHIO, M., HAYASHIDA, K., GUO, Q., OGAWA, H. Effect of VI/II ratio upon photoluminescence properties of aluminum-doped ZnTe layers grown by MOVPE. In: Applied Surface Science. 2001, nr. 169-170, pp. 223–226. DOI: 10.1016/s0169-4332(00)00655-3
10. SCAIFE, B. Principles of dielectrics. 1989.
11. DEBYE, P. Polar Molecules. Dover, New York, 1929.

LISTA PUBLICAȚIILOR AUTORULUI LA TEMA TEZEI

1. Cărți de specialitate (recomandate spre editare de senatul/consiliul științific al unei organizații din domeniile cercetării și inovării sau recunoscute in calitate de cărți științifice peste hotare: proces de recenzare, aprobare de către organizații științifice sau publicare de către edituri științifice prestigioase)

1.1. cărți de specialitate monoautor

1.2. cărți de specialitate colective (cu specificarea contribuției personale)

2. Articole în reviste științifice

2.1. în reviste din bazele de date Web of Science și SCOPUS

1) **LUNGU, Ion**, ZALAMAI, Victor, MONAICO, Eduard, GHIMPU, Lidia, POTLOG, Tamara. Effect of deposition temperature on structural, morphological and optical properties of ZnTe thin films. In: *Journal of Materials Science*. 2023, nr. 10(58), pp. 4384-4398. ISSN 0022-2461. DOI: https://doi.org/10.1007/s10853-023-08285-x (**IF:4.5**)
2) **LUNGU, I,** PATRU, R, GALCA, A, PINTILIE, L, POTLOG, T. (2024). DC current-voltage and impedance spectroscopy characterization of nCdS/pZnTe HJ. In: *Scientific reports*, 2024, nr.14(1), pp. 12955. (**IF:4.6**)
3) **LUNGU, Ion**, POTLOG, Tamara. Thermally Annealed in Vacuum Undoped and Al-Doped ZnO Thin Films for Multifunctional Applications. In: *Lecture Notes in Networks and Systems*. 2020, nr. 101, pp. 144-158. ISSN 2367-3370. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-030-36841-8_15

2.2. în reviste din alte baze de date acceptate de către ANACEC (cu indicarea bazei de date)

2.3. în reviste din Registrul Național al revistelor de profil (cu indicarea categoriei)

Cat. B:

1) **LUNGU, Ion**. Efectul dopării straturilor de ZnTe cu cupru asupra parametrilor fotovoltaici ai heterostructurilor ZnTe:Cu/CdTe. In: *Studia Universitatis Moldaviae. Seria Ştiinţe Exacte şi Economice*. 2021, nr. 2(142), pp. 73-77. ISSN 1857-2073. DOI: https://doi.org/10.5281/zenodo.5094790
2) **LUNGU, Ion**. Influența dopării cu aluminiu asupra proprietăților optice ale straturilor subțiri de ZnO. In: *Studia Universitatis Moldaviae. Seria Ştiinţe Exacte şi Economice*. 2020, nr. 7(137), pp. 23-30. ISSN 1857-2073. DOI: https://doi.org/10.5281/zenodo.4457488

Cat. C:

1) **LUNGU, Ion**, GHIMPU, Lidia, UNTILA, Dumitru, POTLOG, Tamara. Copper-related defects in ZnTe thin films grown by the close space sublimation method. In: *Moldavian Journal of the Physical Sciences*. 2022, nr. 1(21), pp. 34-41. ISSN 1810-648X. DOI: https://doi.org/10.53081/mjps.2022.21-1.03
2) **LUNGU, Ion**, GAGARA, Ludmila, GHIMPU, Lidia, POTLOG, Tamara. Synthesis and electrophysical properties of CdS/ZnTe heterojunctions. In: *Moldavian Journal of the Physical Sciences*. 2022, nr. 1(21), pp. 42-51. ISSN 1810-648X. DOI: https://doi.org/10.53081/mjps.2022.21-1.04
3) RUSNAC, Dumitru, **LUNGU, Ion**, GHIMPU, Lidia, COLIBABA, Gleb, POTLOG, Tamara. Structural and optical properties of ZnO:Ga thin films deposited on ITO/glass substrates for optoelectronic applications. In: *Moldavian Journal of the Physical Sciences*. 2021, nr. 1(20), pp. 84-93. ISSN 1810-648X. DOI: https://doi.org/10.53081/mjps.2021.20-1.07

3. Articole în lucrările conferințelor și altor manifestări științifice

3.1. în lucrările manifestărilor științifice incluse în bazele de date Web of Science şi SCOPUS

1) POTLOG, Tamara, GORCEAC, Leonid, TAKU, Miyake, **LUNGU, Ion,** RAEVSCHI, Simion, WORASAWAT, Suchada, BOTNARIUC, Vasile, MIMURA, Hidenori. Synthesis and Properties of Al-doped ZnO Thin Films for Photovoltaics. In: *Proceedings. 4th International Conference on Nano Electronics Research and Education (ICNERE)*, 2018, Hamamatsu, Japan, pp. 1-6, DOI: 10.1109/ICNERE.2018.8642595. https://ieeexplore.ieee.org/abstract/document/8642595
2) **LUNGU, Ion**. Structural and composition of Cu-doped ZnTe thin films with different concentrations by immersion in Cu(NO3)2 solution. In: *Proceedings of the International Semiconductor Conference CAS*. Ediția a 44-a, 6-8 octombrie 2021, Sinaia. New Jersey, USA: Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc., 2021, pp. 155-158. ISBN 978-166543571-0. DOI: https://doi.org/10.1109/CAS52836.2021.9604170
3) **LUNGU, Ion**, BUSUIOC, Simon, MONAICO, Elena, POTLOG, Tamara. Effect of Particle Size and Roughness on Contact Angle of ZnTe Thin Films. In: *IFMBE Proceedings. 6th International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering*. Ediția 6, Vol.91, 20-23 septembrie 2023, Chișinău. Chișinău: Springer Science and Business Media Deutschland GmbH, 2023, pp. 268-277. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-031-42775-6_30
4) **LUNGU, Ion**, GHIMPU, Lidia, POTLOG, Tamara. Illumination-Dependent Photovoltaic Parameters of CdS/ZnTe Solar Cells. In: *IFMBE Proceedings. 6th International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering*. Ediția 6, Vol.91, 20-23 septembrie 2023, Chișinău. Chișinău: Springer Science and Business Media Deutschland GmbH, 2023, pp. 214-222. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-031-42775-6_24
5) GAGARA, Ludmila, **LUNGU, Ion**, GHIMPU, Lidia, POTLOG, Tamara. Synthesis Technology for CdSe/CdTe Heterojunctions and Characterization of Their Photoelectric Properties. In: *IFMBE Proceedings. 6th International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering*. Ediția 6, Vol.91, 20-23 septembrie 2023, Chișinău. Chișinău: Springer Science and Business Media Deutschland GmbH, 2023, pp. 206-213. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-031-42775-6_23
6) BOTNARIUC, Vasile, GORCEAC, Leonid, COVAL, Andrei, CINIC, Boris, GAUGAŞ, Petru, CHETRUŞ, Petru, **LUNGU, Ion**, RAEVSCHI, Simion. ZnO nanometric layers used in photovoltaic cells. In: *IFMBE Proceedings. 4th International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering*. Ediția 4, Vol.77, 18-21 septembrie 2019, Chișinău. Switzerland: Springer Nature Switzerland AG, 2020, pp. 53-56. ISBN 978-303031865-9. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-030-31866-6_11
7) POTLOG, Tamara, **LUNGU, Ion**, RAEVSCHI, Simion, BOTNARIUC, Vasile, ROBU, Ștefan, MIMURA, Hidenori. Electrical properties of thermal annealed in vacuum spray deposited al-doped zno thin films. In: *IFMBE Proceedings. 4th International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering*. Ediția 4, Vol.77, 18-21 septembrie 2019, Chișinău. Switzerland: Springer Nature Switzerland AG, 2020, pp. 83-87. ISBN 978-303031865-9. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-030-31866-6_18
8) QASSEM, Amjad-Al, GAGARA, Ludmila, FEDOROV, Vladimir, **LUNGU, Ion**, POTLOG, Tamara. Comparative study of the P-CDS/N-cdte photovoltaic devices

with depleted intrinsic layer. In: *IFMBE Proceedings. 4th International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering*. Ediția 4, Vol.77, 18-21 septembrie 2019, Chișinău. Switzerland: Springer Nature Switzerland AG, 2020, pp. 707-711. ISBN 978-303031865-9. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-030-31866-6_125

3.2. în lucrările manifestărilor științifice incluse în alte baze de date acceptate de către ANACEC

3.3. în lucrările manifestărilor științifici incluse în Registrul materialelor publicate în baza manifestărilor științifice organizate din Republica Moldova

1) **LUNGU, Ion**, GADIAC, Ivan. Proprietățile fizice ale straturilor de ZnTe dopate prin imersie în soluție de cupru. In: *Conferinţa tehnico-ştiinţifică a studenţilor, masteranzilor şi doctoranzilor*. Vol.1, 23-25 martie 2021, Chișinău. Chișinău, Republica Moldova: Tehnica-UTM, 2021, pp. 46-49. ISBN 978-9975-45-699-9. https://ibn.idsi.md/vizualizare_articol/133724
2) RUSNAC, Dumitru, **LUNGU, Ion**, POTLOG, Tamara. Formarea stării excitate triplet în straturile subțiri dopate cu GA sintetizate din soluție. In: *Integrare prin cercetare şi inovare.Ştiinţe ale naturii şi exacte*. SNE, 10-11 noiembrie 2020, Chișinău. Chisinau, Republica Moldova: CEP USM, 2020, pp. 276-279. ISBN 978-9975-152-50-1. https://ibn.idsi.md/vizualizare_articol/114159
3) **LUNGU, Ion**, COLIBABA, Gleb, POTLOG, Tamara. Fabricarea structurilor SnO2/CdTe/ZnO şi cercetarea proprietăţilor acestora. In: *Integrare prin cercetare şi inovare.Ştiinţe ale naturii şi exacte*. SNE, 10-11 noiembrie 2020, Chișinău. Chisinau, Republica Moldova: CEP USM, 2020, pp. 304-308. ISBN 978-9975-152-50-1. https://ibn.idsi.md/vizualizare_articol/114215
4) **LUNGU, Ion**, BOTNARIUC, Vasile, POTLOG, Tamara. Efectul tratării termice în vid asupra structurii și proprietăților optice ale straturilor nanostructurate ZnO dopate cu Ga. In: *Integrare prin cercetare şi inovare.Ştiinţe ale naturii şi exacte*. SNE, 7-8 noiembrie 2019, Chișinău. Chisinau, Republica Moldova: CEP USM, 2019, pp. 234-237. ISBN 978-9975-149-46-4. https://ibn.idsi.md/vizualizare_articol/88887
5) GADIAC, Ivan, **LUNGU, Ion**. Rolul hexamethylenetetraminei (HMTA) în sinteza straturilor nanostrcturate pe probe de ZnO obtinute prin pulverizare cu piroliză. In: *Sesiune națională cu participare internațională de comunicări științifice studențești*. Ediția 24, Vol.1, R, 15 februarie 2020, Chișinău. Chișinău, Republica Moldova: Centrul Editorial-Poligrafic al USM, 2020, pp. 43-46. ISBN 978-9975-142-89-2. https://ibn.idsi.md/vizualizare_articol/102836
6) **LUNGU. I.,** GODIAC, I. Influenţa tratării termice în formarea nanorodurilor de ZnO. In: *Sesiune națională cu participare internațională de comunicări științifice studențești*, Ed. 24, 15 februarie 2020, Chișinău, Republica Moldova: Centrul Editorial-Poligrafic al USM, 2020, Ediția 24, Vol.1, R, pp. 25-28. ISBN 978-9975-45-632-6. https://ibn.idsi.md/vizualizare_articol/106118

4. Brevete de invenție și alte obiecte de proprietate intelectuală (OPI)

4.1. eliberate de către oficii de peste hotare de protecție a proprietății intelectuale (cu indicarea oficiului)

4.2. eliberate de Agenția de Stat pentru Proprietatea Intelectuală

5. Alte lucrări și realizări specifice diferitor domenii științifice (recomandate spre editare/aprobate de o instituție abilitată în domeniu), cum ar fi:

1) **LUNGU, I.,** PATRU, R.E., GALCA, A.C., PINTILIE, L., POTLOG, T. DC current-voltage and impedance spectroscopy characterization of CdS/ZnTe heterostructures. In: *Workshop "Application-oriented material development"* September 12-14, 2023, Bucharest, România.
2) GAGARA, Ludmila, **LUNGU, Ion**, GHIMPU, Lidia, POTLOG, Tamara. Synthesis Technology for CdSe/CdTe Heterojunctions and Characterization of their Photoelectric Properties. In: *IFMBE ProceedingsNanotechnologies and Biomedical Engineering*. Ediția 6, R, 20-23 septembrie 2023, Chișinău. Chișinău: Springer Science and Business Media Deutschland GmbH, 2023, p. 60. ISBN 978-9975-72-773-0. https://ibn.idsi.md/vizualizare_articol/188669
3) **LUNGU, Ion**, GHIMPU, Lidia, SUMAN, Victor, UNTILA, Dumitru, POTLOG, Tamara. Illumination-Dependent Photovoltaic Parameters of CdS/ZnTe Solar Cells. In: *IFMBE ProceedingsNanotechnologies and Biomedical Engineering*. Ediția 6, R, 20-23 septembrie 2023, Chișinău. Chișinău: Springer Science and Business Media Deutschland GmbH, 2023, p. 61. ISBN 978-9975-72-773-0. https://ibn.idsi.md/vizualizare_articol/188671
4) **LUNGU, Ion**, BUSUIOC, Simon, MONAICO, Elena, POTLOG, Tamara. Effect of Particle Size and Roughness on Contact Angle of ZnTe Thin Films. In: *IFMBE ProceedingsNanotechnologies and Biomedical Engineering*. Ediția 6, R, 20-23 septembrie 2023, Chișinău. Chișinău: Springer Science and Business Media Deutschland GmbH, 2023, p. 67. ISBN 978-9975-72-773-0.. https://ibn.idsi.md/vizualizare_articol/188685
5) COLIBABA, Gleb, INCULEŢ, Ion, **LUNGU, Ion**. Obtaining of ZnO single crystals with controllable growth direction for application in optoelectronics and photonics. In: *Cercetări şi inovaţii în viziunea tinerilor cercetători "Cadet INOVA'20"*. Nr.5, 26-28 martie 2020, Sibiu. Sibiu, România: Editura Academiei Forţelor Terestre „Nicolae Bălcescu", 2020, pp. 236-237. https://ibn.idsi.md/vizualizare_articol/116813

ADNOTARE

la teza cu titlul „**FIZICA HETEROSTRUCTURILOR CdS/ZnTe ÎN APLICAȚII FOTOVOLTAICE**”, înaintată de candidatul **Ion LUNGU**, pentru conferirea titlului științific de doctor în științe fizice, la specialitatea **134.01-Fizica și Tehnologia Materialelor**.

Structura tezei: Teza înaintată spre susținere a fost realizată în Laboratorul „Materiale Organice/Anorganice în Optoelectronică” al Universității de Stat din Moldova, Chișinău, 2024. Este scrisă în limba română și constă din introducere, 5 capitole, concluzii generale, recomandări și bibliografie (104 titluri), fiind expusă pe 145 pagini text de bază, 87 figuri și 34 tabele. Rezultatele obținute au fost publicate în 26 lucrări științifice, dintre care un articol în revistă cu impact factor 4,6; 5 articole în reviste din Registrul Național al revistelor de profil; 14 articole în culegeri științifice naționale și internaționale; 5 teze în culegeri științifice naționale și internaționale.

Cuvinte cheie: straturi subțiri, metoda CSS, compuși A^2B^6, simulare numerică SCAPS-1D, caracteristici J–U, caracteristici C-U, XRD, SEM, AFM, UV-Vis, FL, bandă intermediară, spectroscopia de impedanță.

Domeniul de studiu: Fizica și tehnologia dispozitivelor fotovoltaice pe baza compușilor binari, modelarea numerică a caracteristicilor curent-tensiune și eficienței cuantice externe.

Scopul lucrării constă în analiza potențialului utilizării HJ CdS/ZnTe în aplicații fotovoltaice, cu accent pe elaborarea tehnologiei de obținere a benzii intermediare în stratul absorbant prin încorporarea oxigenului în rețeaua de ZnTe.

Obiectivele cercetării: Conceperea designului optimal al dispozitivului fotovoltaic în baza heterojoncțiunii CdS/ZnTe din punct de vedere al eficienței de conversie a energiei solare în energie electrică prin simularea numerică cu softul SCAPS-1D. Elaborarea tehnologiei de obținere a straturilor subțiri ZnO, CdS, ZnTe prin: dirijarea condițiilor tehnologice, dopare, modificarea controlată a morfologiei, proprietăților cristaline, electrice si optice. Realizarea dispozitivelor fotovoltaice în baza compușilor studiați, cercetarea proprietăților fotoelectrice și stabilirea mecanismului de transport al purtătorilor de sarcină electrică.

Noutatea și originalitatea științifică: Optimizarea parametrilor tehnologici de obținere a straturilor subțiri de ZnTe, utilizând metoda CSS și tratamentul termic în mediu de oxigen la 400 °C, prin studiul structurii, compoziției chimice, absorbției, fotoluminescenței indică formarea benzii intermediare la 1,82 eV, în rezultatul substituției oxigenului cu telur. Realizarea dispozitivelor fotovoltaice cu valoarea tensiunii de circuit deschis de 0,84 V, cu randament de conversie a energiei solare în energie electrică 0,13%, destul de modest, în comparație cu cel obținut prin simulare numerică cu softul SCAPS-1D care indică în funcție de parametrii de intrare: $E_{g(\mathrm{ZnTe})}$=2,2 eV, $E_{g(\mathrm{CdS})}$=2,4 eV, $E_{g(\mathrm{ZnO})}$=3,3 eV, $\chi_{(\mathrm{Ag})}$=4,7 eV următorii parametri fotovoltaici: U_{CD}=0,89 V, J_{SC}=25,9 mA/cm^2, FF=72,6, η=16,78%. Eficiență cuantică internă atinge valoare de aproximativ 0,5 în intervalul lungimilor de undă 490-590 nm. Originalitatea constă în crearea de noi materiale pentru dezvoltarea dispozitivelor fotovoltaice alternative.

Rezultatul/rezultatele obținute care contribuie la soluționarea unei probleme științifice importante: în această teză de doctor a fost propus conceptul de dispozitiv fotovoltaic cu bandă intermediară și elaborate mostre experimentale a dispozitivelor fotovoltaice pe baza HJ CdS/ZnTe.

Semnificația teoretică a lucrării constă în elucidarea proceselor fizico-chimice de formare a benzii intermediare în straturile subțiri de ZnTe obținute, precum și a proceselor de la interfața HJ CdS/ZnTe:O prin analiza caracteristicilor J-U, C-U și a spectroscopiei de impedanță în funcție de temperatura și de frecvență de măsurare.

Valoarea aplicativă: constă în implementarea softului de simulare numerică SCAPS-1D în optimizarea parametrilor fotovoltaici a dispozitivelor fotovoltaice pe baza HJ CdS/ZnTe:O și realizarea experimentală a acestora pentru aplicații în energia verde.

Implementarea rezultatelor științifice: rezultatele științifice obținute pot fi implementate în procesul instructiv-educativ, atât la Facultatea de Fizică și Inginerie a Universității de Stat din Moldova, cât și în alte instituții de învățământ și cercetare din țară și de peste hotare.

ANNOTATION

of the thesis entitled "**PHYSICS OF CdS/ZnTe HETEROSTRUCTURES IN PHOTOVOLTAIC APPLICATIONS**", presented by the candidate **Ion LUNGU**, for obtaining the scientific degree of Doctor in Physical Sciences with specialty **134.01-Physics and Materials Technology**.

Thesis structure: The thesis was performed at the "Organic/Inorganic Materials in Optoelectronics" Laboratory of the State University of Moldova, Chisinau, 2024. It is written in Romanian and consists of an introduction, 5 chapters, general conclusions, recommendations, and bibliography (104 titles). The thesis is presented in 145 pages of basic text, containing 87 figures and 34 tables. The research results have been published in 26 scientific papers, including one journal article with an impact factor of 4.6; 5 articles in magazines from the National Register of professional magazines; 14 articles in national and international scientific collections; 5 theses in national and international scientific collections.

Keywords: thin films, CSS method, A^2B^6 compounds, SCAPS-1D numerical simulation, J–U characteristics, C-U characteristics, XRD, SEM, AFM, UV-Vis, FL, intermediate band, impedance spectroscopy.

Field of study: Physics and technology of photovoltaic devices based on binary compounds, numerical modeling of current-voltage characteristics and external quantum efficiency.

The aim of the work consists of analyzing the potential of using HJ CdS/ZnTe in photovoltaic applications, with an emphasis on the development of the technology to obtain the intermediate band in the absorber layer by incorporating oxygen into the ZnTe network.

Research objectives: Designing the optimal scheme of the photovoltaic device based on the CdS/ZnTe heterojunction in terms of solar energy conversion efficiency through numerical simulation with SCAPS-1D software. The development of the technology for obtaining ZnO, CdS, ZnTe thin films by optimizing the technological conditions, doping for controlled modification of the morphology, crystalline, electrical, and optical properties. Fabrication of photovoltaic devices based on the optimized compounds, studying their photoelectric properties, and establishing the transport mechanism of electric charge carriers.

Scientific novelty and originality of the results: The optimization of the technological parameters for obtaining ZnTe thin films using the CSS method and thermal treatment in an oxygen environment at 400 °C, by studying the structure, chemical composition, absorption, photoluminescence indicates the formation of the intermediate band at 1.82 eV, because of the substitution of oxygen with tellurium. The realization of photovoltaic devices with the open circuit voltage value of 0.84 V, with solar energy conversion efficiency of 0.13%, quite modest, compared to that obtained by numerical simulation with SCAPS-1D software indicating in depending on input parameters: $E_{g(\mathrm{ZnTe})}$=2.2 eV, $E_{g(\mathrm{CdS})}$=2.4 eV, $E_{g(\mathrm{ZnO})}$=3.3 eV, $\chi_{(\mathrm{Ag})}$=4.7 eV following photovoltaic parameters: V_{OC} =0.89 V, J_{SC}=25.9 mA/cm^2, FF=72.6, η=16.78%. Internal quantum efficiency reaches a value of about 0.5 in the wavelength range 490-590 nm. The originality consists in creating new materials for the development of alternative photovoltaic devices.

The main scientific problem solved: in this PhD thesis, the concept of photovoltaic device with intermediate band was proposed and experimental samples of photovoltaic devices based on HJ CdS/ZnTe were elaborated.

The theoretical significance of the work consists in the elucidation of the physic-chemical processes of the formation of the intermediate band in the ZnTe thin layers obtained, as well as of the processes at the HJ CdS/ZnTe:O interface by analyzing the J-U, C-U characteristics, and impedance spectroscopy as a function of temperature and of measurement frequency.

Applicative value: it consists in the implementation of the numerical simulation software SCAPS-1D in the optimization of the photovoltaic parameters of the photovoltaic devices based on HJ CdS/ZnTe:O and their experimental realization for applications in green energy.

Implementation of scientific results: the obtained scientific results can be implemented in the instructional-educational process, both at the Faculty of Physics and Engineering of the Moldova State University, and in other educational and research institutions from the country and abroad.

АННОТАЦИЯ

Диссертация «**ФИЗИКА ГЕТЕРОСТРУКТУР CdS/ZnTe В ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ПРИМЕНЕНИЯ**», представленной **Лунгу Ион**, на соискание степени доктора физических наук по специальности **134.01-Физика и технология материалов**.

Структура диссертации: Представленная на защиту диссертация выполнена в лаборатории «Органические/Неорганические Материалы в Оптоэлектронике» Государственного университета Молдовы, Кишинев, 2024. Она написана на румынском языке и состоит из введения, 5 глав, общих выводов, рекомендаций и библиографии (104 наименований), содержит 145 страницах основного текста, 87 рисунка и 34 таблиц. Полученные результаты опубликованы в 26 научных работах, в том числе одна журнальная статья с импакт-фактором 4,6; 5 статей в журналах Национального реестра профессиональных журналов; 14 статей в национальных и международных научных сборниках; 5 диссертаций в национальных и международных научных сборниках.

Ключевые слова: тонкие пленки, метод квазизамкнутого объема, соединения A^2B^6, I-U характеристики, C-U характеристики, РФА, СЭМ, АСМ, УФ-Вид, ФЛ, промежуточная зона, импедансная спектроскопия, численное моделирование.

Область научных интересов: Физика и технология фотоэлектрических устройств на основе бинарных соединений, численное моделирование вольтамперных характеристик и внешнего квантового выхода.

Цель работы состоит в анализе потенциала использования HJ CdS/ZnTe в фотоэлектрических устройствах с упором на разработку технологии получения промежуточной полосы в абсорбирующем слое путем внедрения кислорода в решетку ZnTe.

Задачи работы: Разработка оптимально дизайна фотоэлектрического устройства на основе гетероперехода CdS/ZnTe с точки зрения эффективности преобразования солнечной энергии путем численного моделирования в программе SCAPS-1D. Разработка технологии получения тонких слоев ZnO, CdS, ZnTe путем: управление технологических условий, легирования, контролируемого изменения морфологии, кристаллических, электрических и оптических свойств. Создание фотоэлектрических устройств на основе изученных соединений, исследование фотоэлектрических свойств и установление механизма переноса носителей электрического заряда.

Научная новизна и оригинальность: Оптимизация технологических параметров *при* различных условиях *получения* тонких слоев ZnTe методом CSS и термической обработкой в кислородной среде при температуре 400 °C, путем изучения структуры, химического состава, поглощения, фотолюминесценции указывает на образование промежуточной полосы при 1,82 эВ в результате замещения теллура кислородом. Реализация фотоэлектрических устройств со значением напряжения холостого хода 0,84 В, с КПД преобразования солнечной энергии 0,13%, достаточно скромным по сравнению с полученным при численном моделировании в программе SCAPS-1D с указанием в зависимости от входных параметров: $Eg_{(ZnTe)}$=2,2 эВ, $Eg_{(CdS)}$=2,4 эВ, $Eg_{(ZnO)}$=3,3 эВ, $\chi_{(Ag)}$=4,7 эВ следующие фотоэлектрические параметры: B_{XX} =0,89 В, J_{SC} =25,9 мА/см^2, FF=72,6, η=16,78 %. Внутренний квантовый выход достигает значения около 0,5 в диапазоне длин волн 490-590 нм. Оригинальность состоит в создание новых материалов для развития альтернативных фотовольтаических приборов.

Решенная основная научная задача: в данной докторской диссертации была предложена концепция фотоэлектрического устройства с промежуточной зоной и разработаны экспериментальные образцы фотоэлектрических устройств на основе HJ CdS/ZnTe.

Теоретическая значимость работы состоит в выяснении физико-химических процессов формирования промежуточной зоны в полученных тонких слоях ZnTe, а также процессов на границе раздела HJ CdS/ZnTe:O путем анализа J-U, C-U характеристик и импеданса спектроскопии в зависимости от температуры и частоты измерения.

Прикладное значение: заключается во внедрении программы численного моделирования SCAPS-1D при оптимизации фотоэлектрических параметров фотоэлектрических устройств на основе HJ CdS/ZnTe:O и их экспериментальной реализации для приложений в зеленой энергетике.

Внедрение научных результатов: полученные научные результаты могут быть внедрены в учебно-образовательный процесс, как на физико-техническом факультете Государственного университета Молдовы, так и в других образовательных и научно-исследовательских учреждениях в стране и за рубежом.

LUNGU Ion

FIZICA HETEROSTRUCTURILOR CdS/ZnTe ÎN APLICAȚII FOTOVOLTAICE

134.01 Fizica și Tehnologia Materialelor

Rezumatul tezei de doctor în științe fizice

Aprobat spre tipar: 23.08.2024
Hârtie ofset. Tipar ofset.
Coli de tipar: 2.0

Formatul hârtiei: 60×84 1/16
Tiraj: 35ex.
Comanda nr. 57

Centrul Editorial-Poligrafic al UPS „Ion Creangă”
Str. Ion Creangă 1, Chișinău, MD-2069