

DOI <https://doi.org/10.32782/2220-8674-2025-15-2-29>

УДК 537.311.33

А. Ф. Дяденчук, канд. техн. наук

ORCID: 0000-0002-6625-9985

Таврійський державний агротехнологічний університет імені Дмитра Моторного

e-mail: alena.dyadenchuk@tsatu.edu.ua

ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ФОТОПЕРЕТВОРЮВАЛЬНОЇ ГЕТЕРОСТРУКТУРИ CUO/POROUS-SI/SI

Анотація. У статті проведено чисельне моделювання в середовищі Matlab електричних характеристик гетероструктур CuO/porous-Si/Si та CuO/Si на основі рівняння Пуассона. Проаналізовано розподіл електростатичного потенціалу й електричного поля, визначено вплив поруватого шару та діелектричних властивостей матеріалів на ефективність переносу носіїв заряду. Встановлено, що включення поруватого шару сприяє більш плавному спаду потенціалу, покращує поділ носіїв заряду та мінімізує рекомбінаційні втрати. Досліджено залежність електричних параметрів від товщини шару CuO та діелектричної проникності поруватого кремнію. Оптимальна товщина CuO визначається в межах 200–300 нм для балансу між поглинанням світла і транспортом носіїв заряду. Практична цінність роботи полягає в обґрунтуванні оптимальних параметрів для створення ефективних сонячних елементів.

Ключові слова: гетероструктури CuO/Si, поруватий шар, електричне поле, Matlab, фотоелектричне перетворення, діелектрична проникність.

Постановка проблеми. Гетероструктури CuO/Si мають унікальні електричні й фізичні властивості, які можуть суттєво підвищити ефективність фотоелектричного перетворення [1; 2]. Однак включення проміжного поруватого шару в структуру впливатиме на рівень функціональності структури. Зважаючи на важливість детального аналізу впливу проміжного поруватого шару на електричні властивості структури, доцільно дослідити взаємозв'язок між фізичними параметрами шару та його впливом на ефективність фотоелектричного перетворення. Одним із перших етапів цього дослідження, який є економічно вигідним і дає змогу отримати базові висновки, є чисельне моделювання. Воно забезпечує можливість детального аналізу та сприяє оптимізації параметрів структури.

Порівняння структур CuO/porous-Si/Si і CuO/Si допомагає встановити їх переваги й обмеження, а отримані результати можуть бути використані для створення нових поколінь пристроїв відновлюваної енергетики, які відповідають сучасним екологічним і промисловим викликам. Актуальність дослідження визначається зростаючим попитом на високоефективні фотовольтаїчні пристрої у зв'язку з глобальним переходом до відновлюваних джерел енергії.

Аналіз останніх досліджень. У сучасних наукових дослідженнях значна увага приділяється вивченню гетероструктур CuO/Si завдяки їх унікальним електричним і фізичним властивостям, які відкривають нові можливості для підвищення ефективності фотоелектричного перетворення. CuO має моноклінну елементарну комірку та непряму заборонену зону в діапазоні 1,2–1,6 eV [3–5]. Оскільки це включає в себе оптимальну заборонену зону 1,4 eV для фотоелектричного пристрою з одним р–n-переходом, вона більше підходить для збору видимого світла та застосування відновлюваної енергії. У роботах [6–8] досліджено вплив різних методів формування гетероструктур на їх електричні характеристики, а також вивчено механізми взаємодії між шарами CuO і Si.

Окремо розглядається роль поруватого шару в структурі, що може суттєво впливати на функціональність пристроїв. Наприклад, у дослідженнях [9; 10] було показано, що включення поруватого шару дає змогу оптимізувати параметри структури, однак потребує детального аналізу для уникнення негативного впливу на електричні властивості.

Перед процесом виготовлення структур важливо провести чисельне моделювання, яке дає можливість попередньо оцінити вплив фізичних параметрів поруватого шару на електричні характеристики гетероструктур [11]. Чисельне моделювання, як зазначено в роботах [12–14], дає змогу не лише оцінити вплив поруватого шару, але й визначити оптимальні параметри для створення високоефективних фотовольтаїчних пристроїв.

Актуальним залишається питання оптимізації параметрів гетероструктур для забезпечення максимальної ефективності фотоелектричних пристроїв.

Формулювання мети статті (постановка завдання). Метою статті є чисельне моделювання електричних характеристик гетероструктур CuO/porous-Si/Si та CuO/Si для оптимізації параметрів сучасних фотовольтаїчних систем.

Основна частина. У напівпровідникових гетероструктурах, у тому числі і в CuO/porous-Si/Si та CuO/Si, розподіл електричного потенціалу й електричного поля відіграє ключову роль у визначенні механізмів переносу заряду. Для опису просторового розподілу електростатичного потенціалу $V(x)$ у структурі CuO/Si з поруватим і без поруватого шару кремнію використаємо рівняння Пуассона [15]:

$$\frac{d^2V(x)}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\epsilon_0\epsilon_r(x)}, \quad (1)$$

де $V(x)$ – електростатичний потенціал, $\rho(x)$ – об’ємна густина заряду, яка визначається концентрацією акцепторних і донорних домішок, ϵ_0 – діелектрична стала вакууму, $\epsilon_r(x)$ – відносна діелектрична проникність матеріалу, яка може змінюватися залежно від шару, x – координата в напрямку росту гетероструктури. Моделювання проводилось у середовищі Matlab. Параметри структур і сталі наведено в таблиці 1.

Графік, представлений на рис. 1, демонструє результати розв’язання рівняння Пуассона. Для гетероструктури CuO/porous-Si/Si пік потенціалу ~ 9 В спостерігається на глибині 50 нм, що відповідає шару CuO, на відміну від піка потенціалу для гетероструктури CuO/Si (~ 4 В). Після піка потенціал швидко спадає через шар porous-Si і стабілізується в кремнії. Однак за відсутності поруватого шару наявний різкий спад потенціалу після шару CuO. Більш плавним спадом потенціалу у porous-Si структура забезпечує додаткове управління рухом електронів і дірок, а стабілізація потенціалу в Si забезпечує більш ефективне транспортування носіїв заряду до електродів.

Таблиця 1

Фізичні параметри шарів і домішок у структурі

Параметр	Значення	Параметр	Значення
Концентрація домішок, см^{-3}		Діелектричні проникності	
донори в Si	$1 \cdot 10^{16}$	CuO	18
акцептори в CuO	$5 \cdot 10^{18}$	porous Si	7
акцептори в porous Si	$1 \cdot 10^{18}$	Si	11,7
Товщина шарів, нм		Діелектрична стала вакууму,	
CuO	50	Ф/м	$8,85 \cdot 10^{12}$
porous Si	100		
Si	2000	Заряд електрона, Кл	$1,6 \cdot 10^{19}$

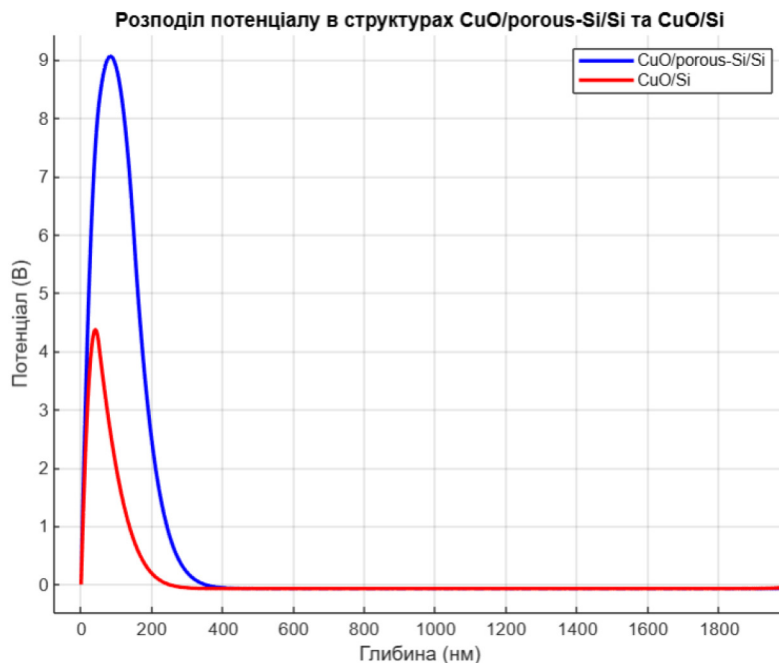


Рис. 1. Розподіл потенціалу в структурах CuO/porous-Si/Si та CuO/Si

Важливу інформацію про поведінку електричного поля в різних частинах гетероструктури надає розподіл електричного поля, який отримано як градієнт потенціалу $V(x)$:

$$E(x) = -\frac{dV(x)}{dx}. \quad (2)$$

Крива CuO/porous-Si/Si показує значні зміни електричного поля на межах між шарами CuO, porous-Si і Si, електричне поле стабілізується ближче до кремнію. Крива CuO/Si має менші

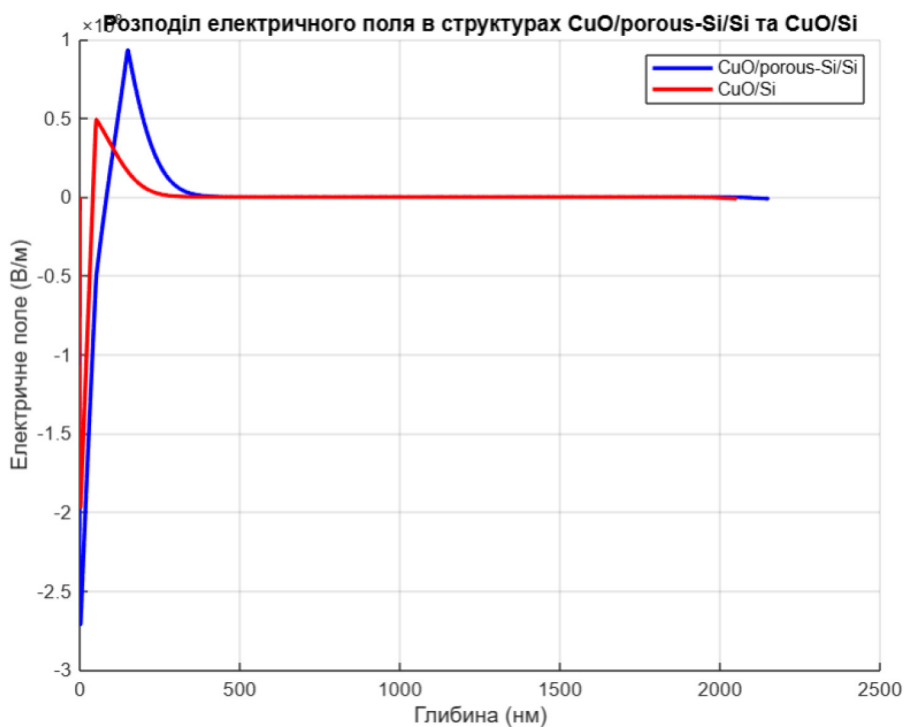


Рис. 2. Розподіл електричного поля в структурах CuO/porous-Si/Si та CuO/Si

зміни електричного поля і більш простий спад через відсутність додаткового бар'єра, який створює porous-Si. У структурі CuO/porous-Si/Si електричне поле має вищий пік, що забезпечує кращий поділ електронів і дірок, генерованих світлом, з іншого боку простий профіль поля у CuO/Si може бути менш ефективним для поділу носіїв. Шар CuO створює високий пік електричного поля через значну концентрацію акцепторів і низьку товщину, що сприяє поділу носіїв заряду. Проміжний шар porous-Si створює ширший градієнт.

Таким чином, включення поруватого шару в структуру CuO/Si значно покращує її характеристики, роблячи цю гетероструктуру оптимальнішою для застосування в сонячних елементах, тоді як структура без поруватого шару підходить для менш складних пристроїв.

Далі проведено дослідження впливу товщини шару CuO на електричний бар'єр і поділ носіїв заряду у структурі CuO/porous-Si/Si. Товщина шару CuO вибиралася в межах 100–500 нм, з кроком 100 нм, при цьому товщина шару porous-Si фіксувалася на значенні 100 нм. Представлені на рис. 3 графіки відображають розподіл потенціалу у структурі CuO/porous-Si/Si залежно від товщини шару CuO.

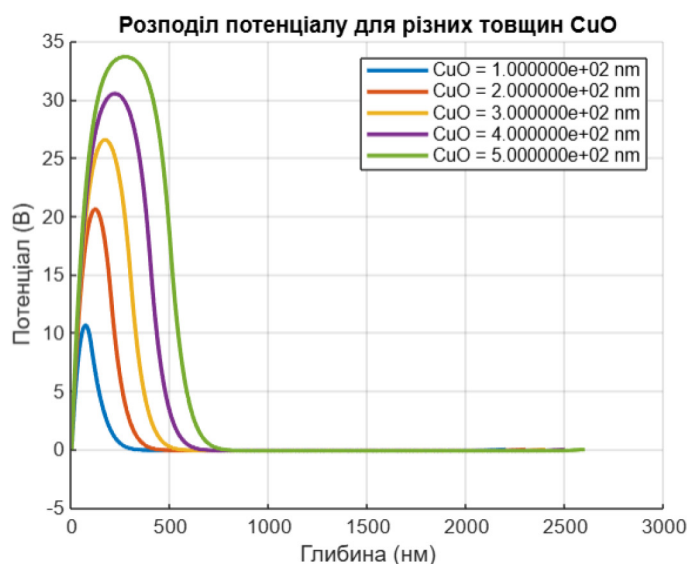


Рис. 3. Розподіл потенціалу в гетероструктурі CuO/porous-Si/Si для різних товщин CuO

Відповідно до моделювання потенціал має пік на поверхні CuO, який зростає зі збільшенням товщини цього шару. Високий початковий потенціал створює достатнє електричне поле для ефективного поділу електронів і дірок. Шари porous-Si і Si забезпечують транспорт носіїв до електродів. Спад потенціалу через porous-Si створює зону збору й направлення носіїв, а стабілізація у кремнії сприяє ефективному транспорту. Оптимальна товщина CuO для балансу між поглинанням світла і транспортом носіїв становить ~200–300 нм. Енергетичні бар'єри, які формуються в структурі, допомагають мінімізувати втрати через рекомбінацію. Водночас дефекти porous-Si можуть підвищити ризик рекомбінації носіїв і потребують врахування під час виготовлення структур.

Оскільки діелектрична проникність поруватого кремнію змінюється зі зміною поруватості, це суттєво впливає на розподіл електричного поля та потенціалу, що може змінювати ефективність структури. У випадку поруватого Si діелектрична проникність залежить від поруватості P . Значення $\epsilon_{\text{porous-Si}}$ може бути виражено через суміш діелектричних властивостей кремнію та поруватого середовища й описано приблизною моделлю Максвелла – Гарнетта [16]:

$$\epsilon_{\text{porous-Si}} = \epsilon_{\text{Si}}(1 - P) + \epsilon_{\text{air}}P, \quad (3)$$

де ϵ_{Si} – діелектрична проникність кремнію (близько $11.7\epsilon_0$), ϵ_{air} – діелектрична проникність повітря ($\epsilon_0 = 1$), P – поруватість (від 0 до 1). В таблиці 2 наведено значення діелектричної проникності поруватого Si для різних значень поруватості.

Таблиця 2

алежність діелектричної проникності від поруватості в шарі porous-Si

Поруватість, P (%)	Діелектрична проникність, $\epsilon_{porous-Si}$
0	11,7
30	8,49
50	6,35
70	4,21
90	2,17

Результати, представлені на рис. 4, демонструють залежність розподілу потенціалу в структурі CuO/porous-Si/Si від діелектричної проникності поруватого кремнію ($\epsilon_{porous-Si}$). Найвищий піковий потенціал спостерігається для найбільшої діелектричної проникності ($\epsilon_{porous-Si} = 11,70$), що підтверджує її значний вплив на формування електричного бар'єра. Зменшення $\epsilon_{porous-Si}$ призводить до суттєвого зниження пікового потенціалу, що свідчить про менший вплив на поділ носіїв заряду.

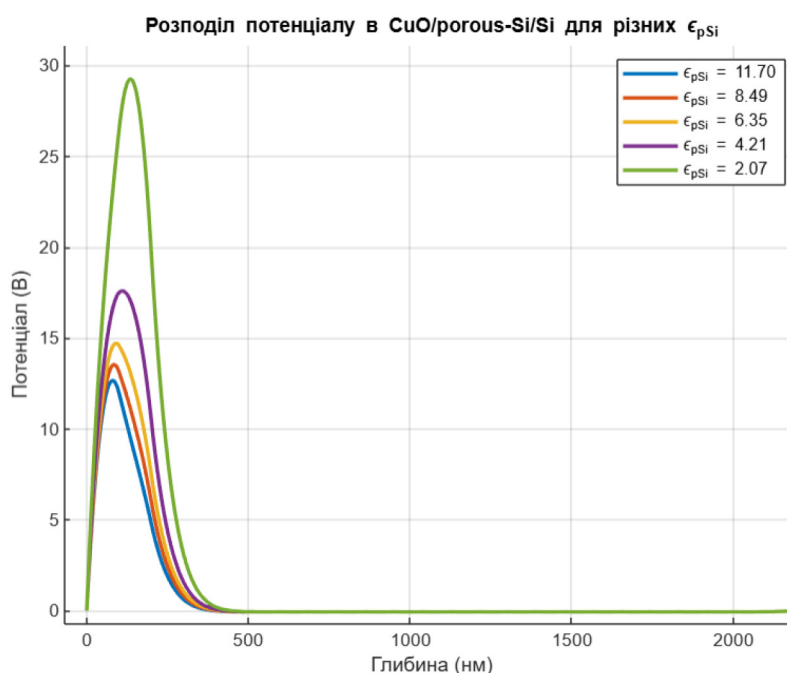


Рис. 4. Розподіл потенціалів у структурі CuO/porous-Si/Si для різних значень $\epsilon_{porous-Si}$

Потенціал стрімко падає після досягнення піка, показуючи різкий градієнт у porous-Si, що зумовлено зміною діелектричних властивостей і товщини шару. На більших глибинах потенціал стабілізується у кремнії, що важливо для транспорту носіїв до електродів.

Таким чином, підвищення $\epsilon_{porous-Si}$ забезпечує більш плавний перехід потенціалу, покращуючи поділ носіїв заряду завдяки ширшому електричному бар'єру. Низькі значення $\epsilon_{porous-Si}$ створюють менший градієнт потенціалу, що може обмежувати ефективність структури.

Висновки. Таким чином, включення шару porous-Si у гетероструктуру CuO/Si забезпечує більш плавний спад електростатичного потенціалу, що сприяє ефективнішому транспортуванню носіїв заряду та зменшенню рекомбінаційних втрат. Розрахунки показують, що максимальний пік потенціалу в структурі CuO/porous-Si/Si (~9 В) спостерігається на межі CuO,

тоді як для CuO/Si він значно нижчий (~4 В). Дослідження залежності потенціалу від товщини шару CuO показало, що за товщини 200–300 нм забезпечується оптимальний баланс між ефективним поглинанням світла та поділом носіїв заряду. Досліджено залежність електричного поля від діелектричної проникності поруватого кремнію. Отримані результати підтверджують, що використання проміжного шару porous-Si є перспективним для покращення характеристик сонячних елементів, а оптимізація його параметрів дасть можливість підвищити ефективність фотоелектричних пристроїв.

Список використаних джерел

1. Yigit Gezgin S., Baturay Ş., Ozaydin C., & Kilic H.S. Experimental and Theoretical Investigation of Zr-Doped CuO/Si Solar Cell. *Physica Status Solidi (A)*. 2024. Vol. 221 (14). P. 2400112. <https://doi.org/10.1002/pssa.202400112>
2. Kotbi A., Lejeune M., Barroy P., Alaoui I.H., Zeinert A., & Jouiad, M. High photovoltaic performances of a p-CuO/n-Si heterojunction prepared by a simple fabrication method. *Journal of Sol-Gel Science and Technology*. 2025. P. 1–13. <https://doi.org/10.1007/s10971-025-06699-4>
3. Song H. J., Seo M. H., Choi K. W., Jo M. S., Yoo J. Y., Yoon J. B. High-Performance Copper Oxide Visible-Light Photodetector via Grain-Structure Model. *Scientific Reports*. 2019. Vol. 9 (1). P. 7334. <https://doi.org/10.1038/s41598-019-43667-9>
4. Wong T. K. S., Zhuk S., Masudy-Panah S., Dalapati G. K. Current Status and Future Prospects of Copper Oxide Heterojunction Solar Cells. *Materials (Basel)*. 2016. Vol. 9 (4). P. 271. <https://doi.org/10.3390/ma9040271>
5. Wang Y., Lany S., Ghanbaja J., Fagot-Revurat Y., Chen Y. P., Soldera F., Horwat D., Mucklich F., & Pierson J. F. Electronic structures of Cu₂O, Cu₄O₃, and CuO: A joint experimental and theoretical study. *Physical Review B*. 2016. Vol. 94 (24). P. 245418. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.245418>
6. Abdel-Wahab M. S., Hammad A. H., Jilani A., Alshahrie A., Melaibari A. A. Improvement the morphology, surface roughness, and some physical properties of sputtered CuO thin films by Si. *Optical and Quantum Electronics*. 2021. Vol. 53 (7). P. 374. <https://doi.org/10.1007/s11082-021-03039-y>
7. Hassan M. A., Mohsin M. H., & Ismail R. A. Preparation of high-responsivity strontium-doped CuO/Si heterojunction photodetector by spray pyrolysis. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*. 2023. Vol. 34 (10). P. 912. <https://doi.org/10.1007/s10854-023-10348-3>
8. Alkhayatt A. H. O., Jaafer M. D., Al Alak H. H. A., & Ali A. H. Characterization of CuO/n-Si pn junction synthesized by successive ionic layer adsorption and reaction method. *Optical and Quantum Electronics*. 2019. Vol. 51. P. 1–13. <https://doi.org/10.1007/s11082-019-1951-4>
9. Dyadenchuk A., Domina N., Oleksenko R. Simulation of Solar Element Characteristics Based on Porous Silicon. 2022 IEEE 4th International Conference on Modern Electrical and Energy System (MEES), Kremenchuk, Ukraine. 2022. P. 1–4. <https://doi.org/10.1109/MEES58014.2022.10005773>
10. Dzhaferov T., Bayramov A. Porous silicon and solar cells. *Handbook of Porous Silicon: Second Edition*. 2018. Vol. 2 (2). P. 1479–1492. https://doi.org/10.1007/978-3-319-71381-6_95
11. Дмитрук М. Л., Барлас Т. Р., Сердюк В. О. Пористі напівпровідники АЗВ5: технологія електрохімічного пороутворення, структура та оптичні властивості (Огляд). *Фізика і хімія твердого тіла*. 2010. Т. 11 (1). С. 13–33.
12. Dyadenchuk A. F., Oleksenko R. I. Simulation photoconverters of porous-Si/Si with different anti-reflective coatings. *International Journal of Mathematics and Physics*. 2023. Vol. 14 (2). P. 89–94. <https://doi.org/10.26577/ijmph.2023.v14.i2.010>
13. Faltakh H., Bourguiga R., Rabha M. B., Bessais B. Simulation and optimization of the performance of multicrystalline silicon solar cell using porous silicon antireflection coating layer. *Superlattices and Microstructures*. 2014. Vol. 72. P. 283–295. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2014.04.011>
14. Banerjee M., Dutta S.K., Gangopadhyay U., Majumdar D., & Saha H. Modeling and simulation of layer-transferred thin silicon solar cell with quasi monocrystalline porous silicon as active layer. *Solid-state electronics*. 2005. Vol. 49 (8). P. 1282–1291. <https://doi.org/10.1016/j.sse.2005.06.019>
15. Монастирський Л. С., Оленич І. Б., Соколовський Б. С. Моделювання розподілу електростатичного потенціалу у поруватому кремнії. *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*. 2019. Т. 17 (3). С. 519–528.



16. Ушенін Ю. В., Христосенко Р. В., Самойлов А. В., Громовой Ю. С., Каганович Е. Б., Манойлов Е. Г.,... Снопко Б. А. Тонкі плівки пористого оксиду алюмінію, одержані імпульсним лазерним осадженням, для поверхневих плазмон-поляритонних сенсорних структур. *Фізика і хімія твердого тіла*. 2012. Т. 13, № 1. С. 259–264.

Стаття надійшла до редакції 17.10.2025

Стаття прийнята 03.11.2025

Статтю опубліковано 22.12.2025



A. Dyadenchuk

Dmytro Motornyi Tavria State Agrrotechnological University

NUMERICAL MODELING OF THE PHOTOCONVERTING HETEROSTRUCTURE CUO/POROUS-SI/SI

Summary

This paper presents a numerical simulation in the Matlab environment of the electrical characteristics of CuO/porous-Si/Si and CuO/Si heterostructures based on Poisson's equation. The spatial distribution of electrostatic potential and electric field was analyzed, and the influence of the porous layer and the dielectric properties of materials on charge carrier transport efficiency was determined. The results indicate that including a porous silicon layer ensures a smoother potential drop, improves charge carrier separation, and minimizes recombination losses. The dependence of the electrical parameters on the CuO layer thickness and the dielectric permittivity of porous silicon was investigated. The simulation showed that the potential peak in the CuO/porous-Si/Si structure (~9 V) is significantly higher than in CuO/Si (~4 V), highlighting the role of the porous layer in forming the electric barrier. The analysis of CuO layer thickness (ranging from 100 nm to 500 nm) demonstrated that an optimal thickness of 200–300 nm provides a balance between light absorption and charge carrier transport. Additionally, the dielectric permittivity of porous silicon was found to significantly impact the electric field distribution, with lower values leading to a reduced potential barrier, which may limit carrier separation efficiency. The study confirms that the presence of a porous-Si intermediate layer enhances the overall efficiency of the heterostructure by forming a wider electric barrier and facilitating charge transport. The practical significance of this work lies in substantiating optimal design parameters for the development of efficient solar cell structures.

Keywords: CuO/Si heterostructures, porous layer, electric field, Matlab, photoelectric conversion, dielectric constant