

В.Я. Феденько, Б.С. Дзундза, Р.С.Яворський, Р.В. Ільницький

Оптичні та структурні властивості тонких плівок CdTe для фотоелектричних застосувань

*Карпатський національний університет імені Василя Стефаника, Івано-Франківськ, Україна,
bohdan.dzundza@cnu.edu.ua*

У роботі представлено результати дослідження тонких плівок телуриду кадмію вирощених на скляних підкладках методом відкритого випаровування у вакуумі. На основі експериментально вимірянних спектрів оптичного пропускання плівок розраховано їх оптичні параметри в програмному середовищі OPTIFIT. Порівняльний аналіз товщин вимірянний за допомогою профілометра та модель OPTIFIT показали незначні відхилення товщини для тонких плівок з товщиною до 3-4 мкм. Аналіз АСМ зображень показав значне покращення структурних характеристик плівок CdTe, зокрема, зменшення кількості дефектів і шорсткості поверхні для товщин 500-2500 нм, що сприяє підвищенню коефіцієнта корисної дії фотоелектричних перетворювачів енергії.

Ключові слова: відновлювана енергія, тонкі плівки, CdTe, сонячні елементи, оптичні властивості, програмне забезпечення, OPTIFIT, комп'ютерне моделювання, напівпровідники.

Подано до редакції 02.10.2025; прийнято до друку 10.03.2026; опубліковано 27.03.2026.

Вступ

Перетворення сонячної енергії фотоелектричними установками відіграє важливу роль у задоволенні зростаючих енергетичних потреб, особливо з огляду на поступове виснаження традиційних енергоресурсів. Перетворення сонячного випромінювання в електроенергію здійснюється без процесів, характерних для традиційної генерації, тому фотоелектричні установки не створюють прями викиди чи інші забруднювальні речовини, а екологічне навантаження зводиться переважно до етапів виробництва та утилізації компонентів. Серед фотоелектричних перетворювачів значну увагу приділяють фотоелементам другого покоління, зокрема на основі телуриду кадмію [1]. Телурид кадмію є одним із широко досліджуваних матеріалів серед напівпровідників, які використовуються при виготовленні фотоелектричних перетворювачів, завдяки поєднанню оптимальної ширини забороненої зони, хороших поглинальних властивостей та доступності осадження різними методами [2,3]. Для

вирощення плівок застосовуються як фізичні методи (вакуумне випаровування, магнетронне розпилення тощо) так і хімічні методи (хімічне осадження з ванни, електрохімічне осадження, хімічне осадження з парової фази), кожен з яких забезпечує формування плівок із різними структурними та оптичними властивостями. Тому дослідження мікроструктури та оптичних властивостей тонких плівок CdTe має важливе значення для подальшого підвищення ефективності фотоелементів, оскільки оптичні характеристики безпосередньо пов'язані з продуктивністю фотоелектричних перетворювачів.

I. Огляд літератури та постановка проблеми

Автори публікації [4] описують дослідження оптичних, електронних та структурних властивостей тонких плівок телуриду кадмію (CdTe), отриманих методом термічного випаровування на скляних підкладках. Шляхом рентгеноструктурного аналізу

встановлено, що плівка CdTe має полікристалічну структуру з піком $2\theta = 23,61^\circ$, який відповідає структурі цинкової обманки з переважною орієнтацією вздовж площини (111). Параметр решітки становив $a = 6,529 \text{ \AA}$, а значення ширини забороненої зони 1,534 еВ. Результати моделювання показали, що LDA (Local Density Approximation) значно занижує ширину забороненої зони та енергетичні рівні Cd-4d станів, а також некоректно описує s-d зв'язку, однак коректно передає спин-орбітальну взаємодію. Використання LDA+U (Local Density Approximation + Hubbard U parameter) дозволило скоригувати положення Cd-4d рівнів та розщепити одиночний s-пік на два, що узгоджується з експериментальними даними фотоемісії та свідчить про значну s-d гібридизацію. Оптичні спектри (коефіцієнти поглинання та відбивання, а також показник заломлення) розраховані з використанням LDA та LDA + U показали добру узгодженість з експериментом після застосування "scissors operator" для корекції ширини забороненої зони, хоча спостерігали деякі відхилення у величинах піків поглинання та відбиття.

У роботі [5] досліджено оптичні властивості тонких плівок CdTe нанесених на підкладки скло/ІТО методом високочастотного магнетронного розпилення. Метою роботи було визначення оптичних констант (показника заломлення, коефіцієнтів поглинання та екстинкції), а також товщини плівок та основі аналізу спектру пропускання з використанням методу envelope method. Досліджено дві плівки з часом осадження 0,5 та 1,25 год, що дозволило отримати плівки з товщиною 1,393 мкм та 3,200 мкм відповідно. Наявність чітких інтерференційних максимумів та мінімумів у спектрах свідчила про високу досконалість плівок. Показник заломлення мав нормальну дисперсію, зменшуючись із збільшенням довжини хвилі. Ширина забороненої зони, визначена за графіком залежності $(ah\nu)^2 = f(h\nu)$ становила 1,42 еВ та 1,44 еВ для двох зразків, що добре узгоджується з літературними даними.

Дослідження [6] зосереджено на впливі температури підкладки на мікроструктуру, морфологію, оптичні та люмінесцентні властивості тонких плівок CdTe отриманих методом близько-віддаленої сублімації на скляній підкладці. Результати свідчать, що температура росту суттєво впливає на якість плівки, повідомляється, що з підвищенням температури зростає розмір зерен, покращується кристалічність та зменшується мікронапруження, причому оптимальна температура склала близько 540°C . Оптичні дослідження виявили зсув краю поглинання та збільшення ширини забороненої зони з температурою, а фотолюмінісцентна спектроскопія дозволила дослідити природу люмінесцентних піків, пов'язаних з краєм зони, дефектами структури та поверхневими станами. Дослідження демонструє, що метод CSS дозволяє отримувати високоякісні плівки CdTe з перспективою їх застосування у фотоелектричних сонячних елементах.

Представлена публікація [7] описує результати дослідження тонких плівок CdTe отриманих методом електролітичного осадження на підкладки з FTO-скла

з подальшим відпалом на повітрі при температурах $200\text{--}450^\circ\text{C}$. Результати рентгенівської дифрактограми свідчать, що свіжоосаджені плівки мають нанокристалічну кубічну структуру з розміром зерен 6 нм, а термічна обробка призводить до росту зерен і формування полікристалічних плівок. Оптичні дослідження виявили нелінійну залежність ширини забороненої зони від температури відпалу: вона зменшилася з 1,48 еВ до 1,45 еВ при 300°C , а потім знову зросла при 450°C . На основі отриманих плівок було створено фотоелемент з напруженою холостого ходу 500 мВ та струмом короткого замикання $1,2 \text{ mA/cm}^2$ підтвердивши перспективу використання CdTe у фотоенергетиці.

Аналіз опублікованих матеріалів свідчить про те, що недостатня увага приділяється дослідженню впливу технологічних параметрів осадження на структуру та оптичні властивості тонких плівок CdTe різної товщини, зокрема у контексті фотоелектричних застосувань.

Метою роботи є: експериментальне дослідження серії зразків CdTe різної товщини, осаджених методом термічного випаровування на скляних підкладках; дослідження впливу морфології поверхні на спектри оптичного пропускання, а також визначення оптичних властивостей плівок методами комп'ютерного моделювання.

II. Методи

Тонкі плівки телуриду кадмію на скляних підкладках товщиною 0,17 мм отримано з використанням низьковартісної методики – відкритого випаровування у вакуумі з синтезованих сполук Cd-Te. Під час осадження температура підкладки становила $T_{\text{sub}} = 475 \text{ K}$, товщина плівки контролювалась часом осадження, який знаходився в діапазоні 120-570 сек. Режим осадження характеризувався температурою випаровування CdTe $T_{\text{evap}} = 790\text{--}850 \text{ K}$, що забезпечувало оптимальну швидкість сублімації.

Спектри оптичного пропускання для отриманих вимірювали за допомогою спектрофотометра Agilent Technologies Cary Series UV-Vis-NIR у діапазоні 500-2500 нм.

Застосування атомно-силової мікроскопії, що працює за принципом реєстрації взаємодії сил Ван-дер-Ваальса між вістря зонда та поверхнею плівки, реєструючи вигини пружної консолі за допомогою лазерної оптичної системи та забезпечуючи візуалізацію морфології та визначення параметрів шорсткості зразка, дозволило отримати знімки поверхні для їх подальшого аналізу у середовищі Gwyddion. Детальніше методику АСМ досліджень поверхні описано у роботі [8]. Вимірювання товщини плівок проводилось з використанням профілометра типу Dektak XTL.

Аналіз отриманих спектрів оптичного пропускання для плівок CdTe здійснено за допомогою програмного продукту OPTIFIT (Optical parameters from transmittance spectrum), рис. 1, розробленим у Science Institute of Seville, Seville (Spain) дослідниками

Rafael Alvarez and Alberto Palmero [9]. На основі виміряного спектру оптичного пропускання програма дозволяє визначити: товщину плівки, показник заломлення, коефіцієнт поглинання. Програма OPTIFIT здійснює параметричну підгонку виміряного спектру пропускання тонкої плівки на підкладці до теоретичного розрахунку за відомими оптичними моделями. Математичну залежність між спектром пропускання та оптичними параметрами плівки програма визначає на основі рівнянь Swanepoel [10], які враховують інтерференцію світла в поглинальній тонкій плівці нанесеній на прозору підкладку. Дисперсія показника заломлення визначається за допомогою рівняння Sellmeier, що забезпечує фізично коректну та гладку спектральну залежність показника заломлення у прозорій області [11]. Коефіцієнт екстинкції визначається з використанням моделі, яка включає область міжзонного поглинання та розклад у ряд Тейлора за частотою для врахування дисперсії поза краєм поглинання [12]. Вплив шорсткості поверхні на спектри пропускання враховуються за допомогою підходу запропонованого Tikhonravov et. al [13]. Початкову оцінку товщини плівки та показника заломлення програма здійснює методом оцінювання, узагальненим у огляді Poelman та Smet [14].

Перевагою використання програмного забезпечення OPTIFIT є можливість аналізу спектрів пропускання відносно тонких шарів, у яких відсутня велика кількість інтерференційних екстремумів. На відміну від класичних підходів, зокрема класичної методики Swanepoel програма не вимагає наявності трьох послідовних мінімумів кривої пропускання $T(\%)$ у досліджуваному спектральному діапазоні, що суттєво розширює можливості аналізу отриманих зразків. Відповідно це забезпечує більш гнучке зіставлення експериментальних даних до розрахованої кривої та підвищує інформативність аналізу.

III. Результати та обговорення

Для оцінки оптичних властивостей тонких плівок, серію зразків отриманих за різних технологічних умов осадження, зокрема при зміні температури випарника та часу осадження, таблиця 1. дозволило простежити вплив на формування структури плівок, росту товщини плівки та дослідити їх оптичні властивості.

Таблиця 1.

Експериментальні параметри отриманих плівок

№ зразка	s.1	s.2	s.3	s.4
Товщина, нм	320	565	1490	7200
$T_{\text{підкл}}$, К	475	475	475	475
$T_{\text{випарника}}$, К	823	823	790	850
Час напilenня, с	120	150	300	570

Для поглибленого аналізу оптичних властивостей було застосовано програмний комплекс OPTIFIT, що реалізує моделювання спектрів пропускання з використанням інтерференційної моделі тонкої плівки та дозволяє визначити показник заломлення $n(\lambda)$, коефіцієнт поглинання та уточнену товщину шару виходячи із аналізу залежності пропускання від довжини хвилі $T(\lambda)$. Результати моделювання в спектральному діапазоні 500–2000 нм (табл. 2) демонструють загалом добру узгодженість між експериментально визначеною та розрахованою товщиною для зразків s.2–s.4, тоді як для s.1 спостерігається певне відхилення, що може бути зумовлене неоднорідністю або початковою стадією формування плівки.

Отримані значення показника заломлення при 589 нм знаходяться в межах $n = 2,6–2,95$, що відповідає літературним даним для полікристалічних плівок CdTe. Підвищене значення n для зразків s.2 та s.3 може свідчити про покращення щільності

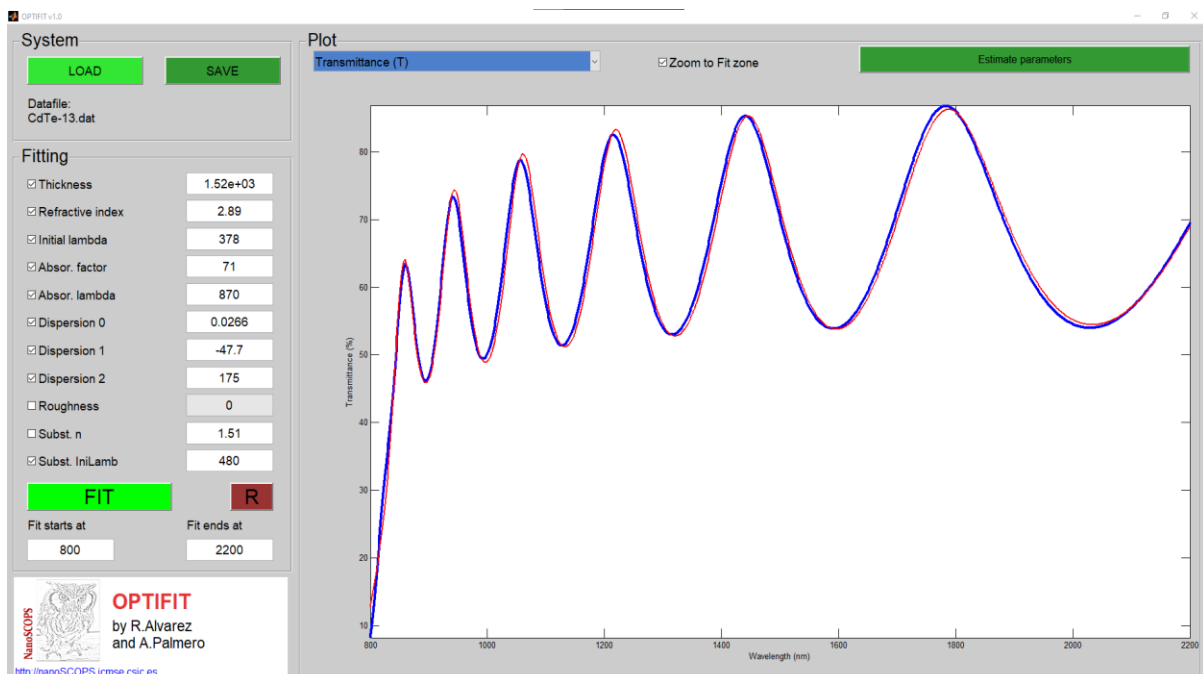


Рис. 1. Графічний інтерфейс програми OPTIFIT.

Таблиця 2.

Результати OPTIFIT моделювання в діапазоні 500–2000 нм.

Параметр	s.1	s.2	s.3	s.4
Товщина, нм	249	591	1490	8790
Показник заломлення (589 нм)	2,6	2,95	2,94	2,6
Початкова довжина хвилі, нм	320	385	379	382
Коефіцієнт поглинання	1,7	44,6	86	27,3
Довжина хвилі поглинання, нм	1040	900	867	860
Показник заломлення підкладки	1,51	1,51	1,51	1,51

структури та зменшення пористості шару при відповідних технологічних режимах. Параметри, пов'язані з поглинанням (Absor. factor та Absor. lambda), вказують на зміщення краю фундаментального поглинання в область 860–1040 нм, що узгоджується з шириною забороненої зони CdTe та можливими варіаціями дефектної структури залежно від умов осадження.

Спектри оптичного пропускання, отримані в результаті моделювання (рис. 2), характеризуються високим ступенем накладання теоретичних і експериментальних кривих для всіх досліджених зразків. Чітко виражені інтерференційні максимуми та мінімуми, особливо для товстих плівок (s.3, s.4), підтверджують однорідність шару по товщині та коректність застосованої моделі. Таким чином, результати моделювання у програмі OptiFit свідчать про адекватність обраного підходу та високу

достовірність визначених оптичних параметрів, що дозволяє обґрунтовано аналізувати вплив технологічних умов осадження на структурні та оптичні властивості плівок CdTe.

На рис. 2 представлено результати моделювання спектрів оптичного пропускання тонких плівок CdTe різної товщини, отримані шляхом апроксимації експериментальних даних у програмі OPTIFIT в діапазоні 500–2000 нм. На кожному графіку наведено експериментальні точки та теоретичну криву моделі, що дозволяє оцінити ступінь узгодження.

На представлених рисунках відображено результати моделювання спектрів оптичного пропускання тонких плівок CdTe різної товщини. Зі зростанням товщини шару спостерігається закономірне посилення інтерференційних ефектів у спектрах пропускання, що зумовлено багаторазовим відбиттям світла між межами «повітря–плівка» та «плівка–підкладка». Положення максимумів і мінімумів визначається оптичною товщиною nd , тому збільшення фізичної товщини призводить до зростання кількості осциляцій у заданому спектральному діапазоні. В області довжин хвиль понад ~800 нм плівки характеризуються високою прозорістю, що свідчить про низький коефіцієнт поглинання у підзонній області та добру структурну однорідність. Поблизу краю поглинання спостерігається різке зменшення пропускання, пов'язане з міжзонними електронними переходами, що визначають ширину забороненої зони матеріалу. Узгодження експериментальних і розрахованих спектрів підтверджує адекватність інтерференційної моделі та коректність визначених оптичних параметрів.

На рис. 3. Наведено АСМ зображення морфології

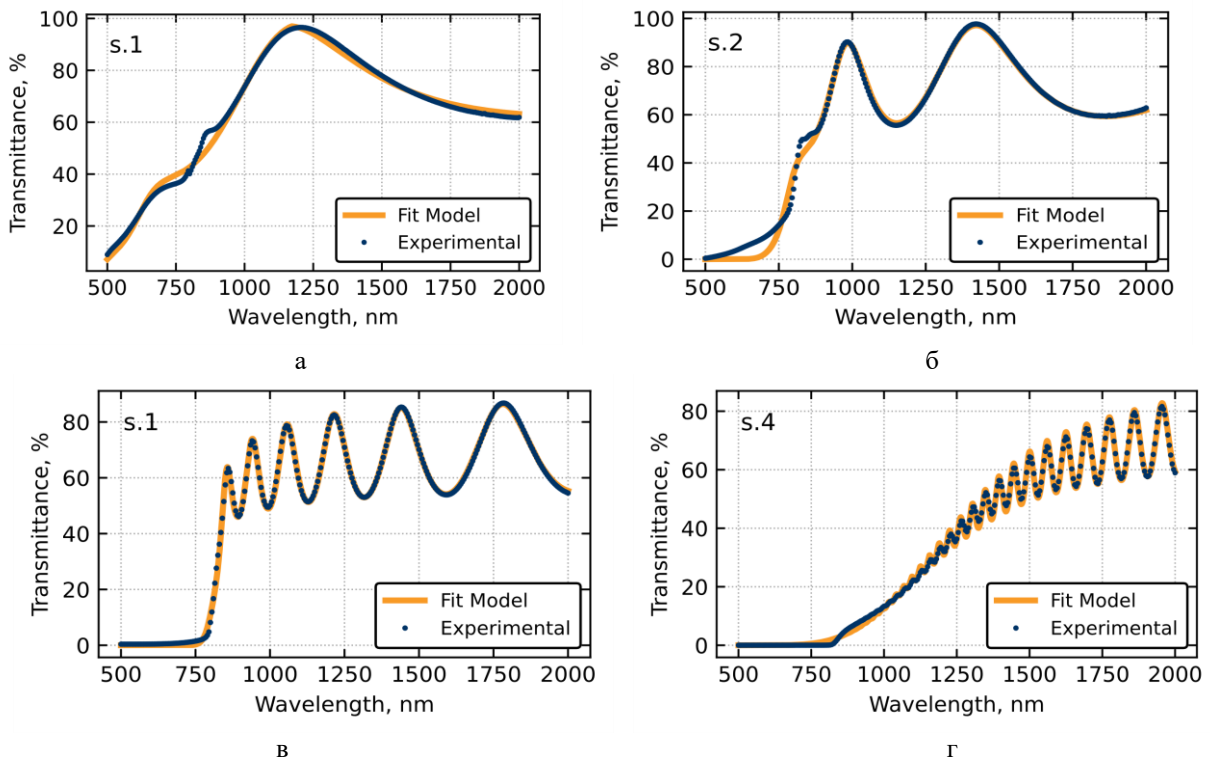


Рис. 2. Результати моделювання зразків s.1-s.4 в програмі OPTIFIT
а – 249 нм; б – 591 нм; в – 1490 нм; г – 8790 нм.

поверхні тонких плівок CdTe отримана з використанням

Аналіз отриманих АСМ зображень (рис.3) та профілограм (рис. 4) виявляє характерний механізм росту Странскі-Крастанова, при якому на початковій стадії формується суцільний гладкий змочувальний шар на поверхні підкладки. Після досягнення критичної товщини плівки спостерігається перехід до тривимірного острівцевого росту, про що свідчать зернисті структури. Така поведінка зумовлена

накопиченням напружень, пов'язаних із невідповідністю параметрів ґратки шару та підкладки.

Збільшення товщини плівки до 500 нм призводить до суттєвого покращення однорідності структури поверхні, але при подальшому збільшенні товщини понад 5 мкм спостерігається укрупнення зерен та гладження вершин пірамідальних структур.

На основі аналізу отриманих результатів, показано, що застосування термічних вакуумних методи отримання плівок дають можливість

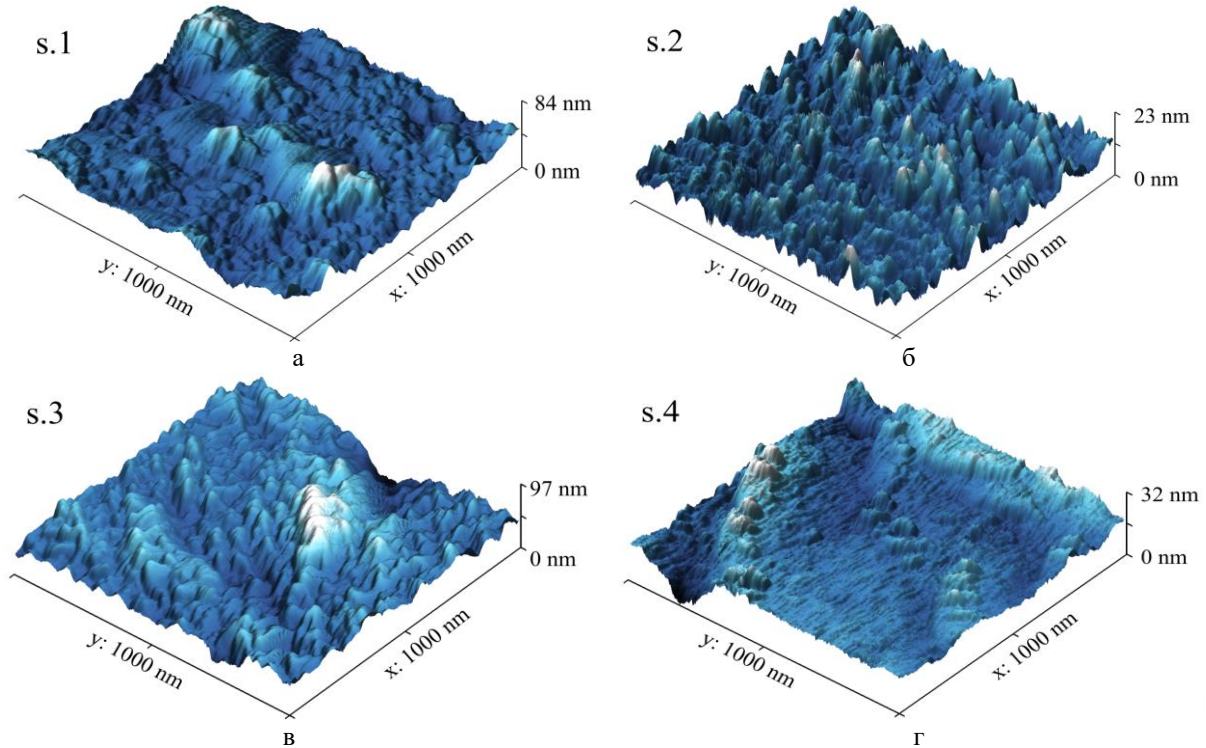


Рис. 3. Морфологія поверхні тонких плівок CdTe різної товщини отримана з використанням а – 249 нм; б – 591 нм; в – 1490 нм; г – 8790 нм.

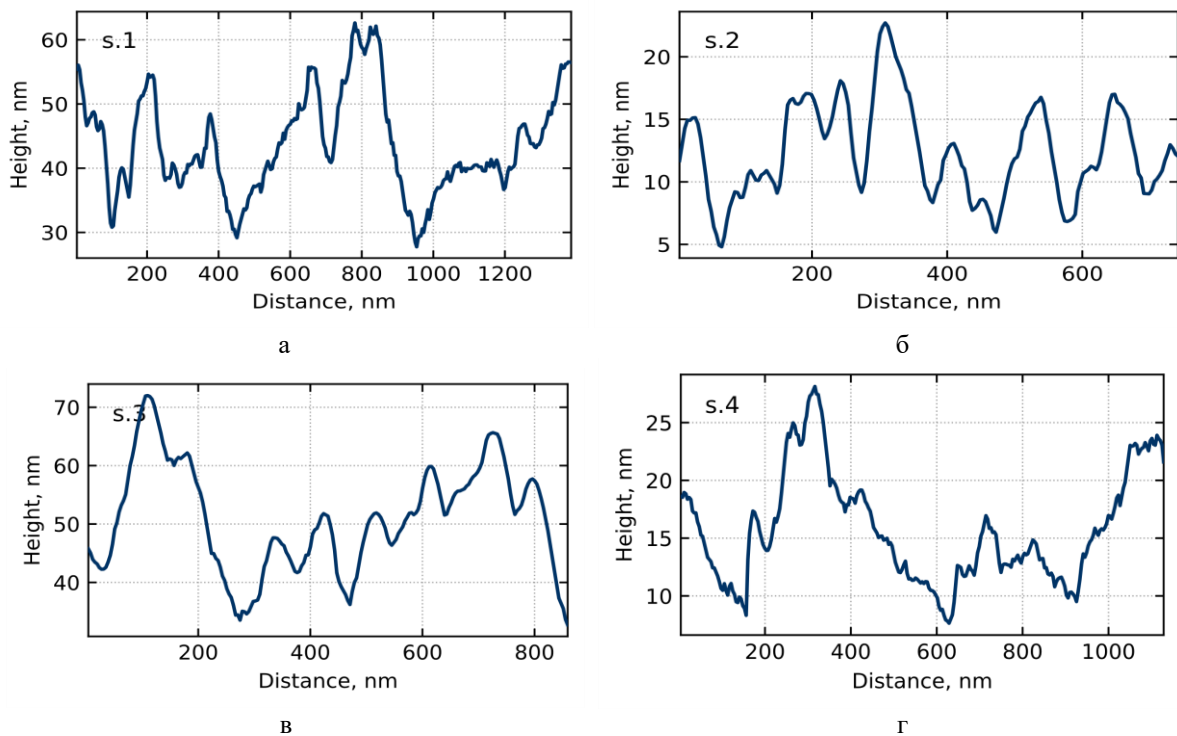


Рис. 4. Профілограми поверхні зразків s.1-s.4 а – 249 нм; б – 591 нм; в – 1490 нм; г – 8790 нм.

контролювати структурні зміни в процесі напilenня, що дає змогу отримувати плівки з прогнозованими оптичними властивостями. Зокрема, спостерігається покращення структурних характеристик плівок телуриду кадмію, зокрема, зменшення кількості дефектів та шорсткості поверхні при температурі підкладки 475 К та температурі випаровування близько 788-823 К, та товщинах 500-1500 нм.

З аналізу спектрів оптичного пропускання бачимо, що отримані на скляних підкладках тонкі плівки телуриду кадмію характеризуються високим коефіцієнтом оптичного пропускання у діапазоні довжин хвиль більше 800 нм (~75-95%), та високим коефіцієнтом оптичного поглинання у діапазоні довжин хвиль до червоної межі фотоефекту. Така прозорість плівок у поєднанні з вибором оптимальної товщини (1,5-2,5 мкм) свідчить про придатність застосування плівок, отриманих даним методом при заданих технологічних параметрах для використання у тонкоплівкових фотоелектричних елементах на основі структур CdTe/CdS.

Порівняння результатів експериментальних вимірювань та значень розрахованих за допомогою OPTIFIT свідчать про незначні відхилення отриманих даних, що пояснюється суттєвою складністю отримання ідеальної моделі спектру пропускання, а також зростання похибок вимірювання під час проведення експериментальних досліджень для плівок товщиною понад 5 мкм.

Одним із подальшими шляхів підвищення ефективності може бути введення в телурид кадмію легуючих домішок [15].

Висновки

Використовуючи метод відкритого випаровування у вакуумі отримано серію зразків

тонких плівок CdTe на скляних підкладках товщиною 0,17 мм. Показано, що вакуумні парофазні методи осадження плівок дають можливість контролювати структурні зміни при осадженні, що дає змогу отримувати плівки з прогнозованими оптичними властивостями. Зокрема, спостерігається покращення структурних характеристик плівок CdTe, зокрема, зменшення кількості дефектів і шорсткості поверхні для товщин 500-2500 нм.

Застосування середовища OPTIFIT забезпечило проведення параметричної підгонки параметрів до експериментальних даних, що в результаті дозволило отримати оптичні характеристики тонких плівок та провести порівняння з результатами вимірювання.

Показано, що плівки телуриду кадмію товщиною 1500-2000 нм характеризуються високим коефіцієнтом оптичного пропускання у діапазоні довжин хвиль більше 800 нм (~75-95%), та високим коефіцієнтом оптичного поглинання у діапазоні довжин хвиль до червоної межі фотоефекту, що робить їх перспективними для побудови високоефективних фотоелектричних перетворювачів енергії.

Подяки

Автори висловлюють подяку Stefan GACEFF з OPTICS SQ Consulting and IOR за надані консультації та методичні рекомендації щодо використання та інтерпретації програмного забезпечення для аналізу оптичних даних OPTIFIT, яке дозволило проаналізувати оптичні властивості отриманих тонких плівок CdTe.

Феденько В.Я. – аспірант;
Дзундза Б.С. – доктор технічних наук, професор;
Яворський Р.С. – доктор філософії;
Льницький Р.В. – доктор фізико-математичних наук, професор.

- [1] A. Romeo, E. Argegnani, *CdTe-Based Thin Film Solar Cells: Past, Present and Future*, Energies, 14(6), 1684 (2021); <https://doi.org/10.3390/en14061684>.
- [2] R. Yavorskyi, Y. Saliy, L. Nykyruy. et al, *Thermally evaporated CdTe thin films on glass and (100) silicon substrates for solar cells applications*, Applied Nanoscience, 13(11), 7275 (2023); <https://doi.org/10.1007/s13204-023-02886-3>.
- [3] A. D. Compaan, A. Gupta, S. Lee, S. Wang, J. Drayton, *High efficiency, magnetron sputtered CdS/CdTe solar cells*, Solar Energy, 77(6), 815 (2004); <https://doi.org/10.1016/j.solener.2004.06.013>.
- [4] S. Lalitha, S. Zh. Karazhanov, P. Ravindran, S. Senthilarasu, R. Sathyamoorthy, J. Janabergenov, *Electronic structure, structural and optical properties of thermally evaporated CdTe thin films*, Physica B: Condensed Matter, 387(1-2), 227 (2007); <https://doi.org/10.1016/j.physb.2006.04.008>.
- [5] R. Petrus, H. Ilchuk, A. Kashuba, I. Semkiv, E. Zmiiivska, *Optical properties of CdTe thin films obtained by the method of high-frequency magnetron sputtering*, Functional Materials, 27(2), 342 (2020); <https://doi.org/10.15407/fm27.02.342>.
- [6] X. Ai et al., *Microstructure and optical properties of CdTe thin films prepared by close spaced sublimation method at various growth temperatures*, Journal of Luminescence, 252, 119372 (2022); <https://doi.org/10.1016/j.jlum.2022.119372>.
- [7] A. Tanushevski, D. Sokolovski, *Structural and optical properties of CdTe thin films obtained by electrodeposition*, RAD Conference Proceedings, 2, 149 (2017); <https://doi.org/10.21175/RadProc.2017.30>
- [8] Y. P. Saliy, B. S. Dzungza, I. S. Bylina, O. B. Kostyuk, *The Influence of the Technological Factors of Obtaining on the Surface Morphology and Electrical Properties of the PbTe Films doped Bi*. Journal of nano- and electronic physics, 8(2), 2045-1(2016); [https://doi.org/10.21272/jnep.8\(2\).02045](https://doi.org/10.21272/jnep.8(2).02045).
- [9] OPTIFIT software. Web page: <https://nanoscops.icms.us-csic.es/software/optifit/>.

- [10] R. Swanepoel, *Determination of the thickness and optical constants of amorphous silicon*, Journal of Physics E: Scientific Instruments, 16(12), 1214 (1983); <https://doi.org/10.1088/0022-3735/16/12/023>.
- [11] B. Tatian, *Fitting refractive-index data with the Sellmeier dispersion formula*, Applied Optics, 23(24), 4477 (1984); <https://doi.org/10.1364/AO.23.004477>.
- [12] N. Ghobadi, *Band gap determination using absorption spectrum fitting procedure*, International Nano Letters, 3(1), 1 (2013) <https://doi.org/10.1186/2228-5326-3-2>.
- [13] A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov, A. A. Tikhonravov, A. Duparré, *Effects of interface roughness on the spectral properties of thin films and multilayers*, Applied Optics, 42(25), 5140 (2003); <https://doi.org/10.1364/AO.42.005140>.
- [14] D. Poelman, P. F. Smet, *Methods for the determination of the optical constants of thin films from single transmission measurements: a critical review*, Journal of Physics. D: Applied Physics, 36(15), 1850 (2003); <https://doi.org/10.1088/0022-3727/36/15/316>.
- [15] I.V. Vakaliuk, R.S. Yavorskyi, B.P. Naidych, L.I. Nykyruy, L.O. Katanova, O.V. Zamuruieva, *Optical Properties of CdTe:In Thin Films Deposited by PVD Technique*, Journal of Nano- and Electronic Physics, 15(5), 05023 (2023). [https://doi.org/10.21272/jnep.15\(5\).05023](https://doi.org/10.21272/jnep.15(5).05023).

V.Y. Fedenko, B.S. Dzundza, R.S. Yavorskyi, R.V. Ilnytskyi

Optical and Structural Properties of CdTe Thin Films for Photovoltaic Applications

Vasyl Stefanyk Carpathian National University, Ivano-Frankivsk, Ukraine, vitalii.fedenkoj@gmail.com

The paper presents the results of a study of cadmium telluride thin films grown on glass substrates by open evaporation in vacuum. Based on experimentally measured optical transmittance spectra of the films, their optical parameters were calculated using the OPTIFIT software environment. A comparative analysis of the film thickness measured with a profilometer and the OPTIFIT model showed only minor deviations in thickness for thin films up to 3-4 μm . Analysis of AFM images revealed a significant improvement in the structural characteristics of CdTe films, in particular a reduction in the number of defects and in surface roughness for thicknesses of 500–2500 nm, which contributes to increasing the efficiency of photovoltaic energy converters.

Keywords: renewable energy, thin-films, CdTe, solar cell, optical properties, OPTIFIT, software, computer simulation, semiconductors.